

6. Hartree-Fock Bogoliubov Approximation kleiner Quantenfluktuationen

Bisher haben wir die Eigenschaften eines Bosekondensats bei $T=0$ im Rahmen einer semiklassischen Theorie behandelt. Nun wollen wir eine systematische Erweiterung auf eine approximative Quantentheorie kennenlernen in denen die Quantenbeiträge jedoch als klein betrachtet werden. Das wird uns auf die verschiedenen Varianten der Hartree-Fock Bogoliubov Theorie führen. Ausgangspunkt ist der großkanonische Hamiltonoperator

$$(1) \quad \hat{H} - \mu \hat{N} = \int d^3\vec{r} \left[\hat{\psi}^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi} + \hat{\psi}^\dagger V_{\text{trap}} \hat{\psi} + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} - \mu \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \right]$$

Jetzt sehen wir

$$(2) \quad \hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sqrt{N_0} \phi(\vec{r}, t) + \hat{\xi}(\vec{r}, t)$$

wobei $\phi(\vec{r}, t)$ die Wellenfunktion des Kondensats mit N_0 Teilchen sein. Der Operator $\hat{\xi}(\vec{r}, t)$ beschreibt dann alle Teilchen in anderen, nicht makroskopisch besetzten Zuständen. Daher nehmen wir an, daß $\hat{\xi}(\vec{r}, t)$ nur zu $\phi(\vec{r}, t)$ orthogonale Moden enthält

$$(3) \quad \int d^3\vec{r} \phi^*(\vec{r}, t) \hat{\xi}(\vec{r}, t) = 0$$

• (A) Bogoliubov Theorie der elementaren Anregungen
für $T \ll T_c$

Wir nehmen an, daß $\phi(\vec{r}, t)$ Lösung der Gross-Pitaevski Gleichung ist

$$(4) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + V_{\text{trap}} \phi + g N_0 |\phi|^2 \phi = \mu \phi$$

Einsetzen von (2) in (1) und Vernachlässigung
höherer als quadratischer Terme in ξ bzw ξ^+
liefert:

$$(5) \quad \hat{H} - \mu \hat{N} = \int d^3 \vec{r} \left[\xi^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \xi(\vec{r}) + \xi^{\dagger} (V - \mu) \xi \right. \\
\left. + 2 g N_0 |\phi|^2 \xi^{\dagger} \xi + \frac{g}{2} N_0 \phi^2 \xi^{\dagger 2} + \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} \xi^2 \right] \\
+ \text{c-Zahl}$$

Lineare Beiträge in ξ bzw ξ^+ verschwinden,
da ϕ die GPGL (4) erfüllen soll. Der Hamilton-
operator ist bilinear in ξ und ξ^+ , daher
versuchen wir eine Diagonalisierung mittels der
sogenannten Bogoliubovtransformation

$$(6) \quad \hat{\xi}(\vec{r}, t) = \sum_{\nu}' u_{\nu}(\vec{r}) \hat{b}_{\nu}(t) - v_{\nu}^{*}(\vec{r}) \hat{b}_{\nu}^{\dagger}(t) \\
\hat{\xi}^{\dagger}(\vec{r}, t) = \sum_{\nu}' u_{\nu}^{*}(\vec{r}) \hat{b}_{\nu}^{\dagger}(t) - v_{\nu}(\vec{r}) \hat{b}_{\nu}(t)$$

Dabei sind die $\{u_v(\vec{r}), v_v(\vec{r})\}$ ein geeigneter Satz von Basisfunktionen die orthogonal zu $\phi(\vec{r})$ sind. Die Orthogonalitätsforderung wird durch den Strich am Summenzeichen zum Ausdruck gebracht.

Für die Vertauschungsregeln von $\hat{\xi}$ und $\hat{\xi}^+$ gilt

$$(7) \quad [\hat{\xi}(\vec{r}), \hat{\xi}^+(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Fordert man nun, daß die $\hat{b}_v, \hat{b}_v^+$ Bosevertauschungsregeln erfüllen

$$(8) \quad [\hat{b}_v, \hat{b}_{v'}^+] = \delta_{vv'} \quad [\hat{b}_v, \hat{b}_{v'}] = 0$$

folgt für die $u_v(\vec{r})$ und $v_v(\vec{r})$ die Vollständigkeitsrelation:

$$(9) \quad \begin{aligned} [\hat{\xi}(\vec{r}), \hat{\xi}^+(\vec{r}')] &= \sum_v' u_v(\vec{r}) u_v^*(\vec{r}') \\ &\quad - \sum_v' v_v^*(\vec{r}) u_v(\vec{r}') \\ &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

Mit (6) findet man

$$(10) \quad \begin{aligned} \xi^+ \xi &= \sum_{v_1 v_2} (u_{v_1}^* b_{v_1}^+ - v_{v_1} b_{v_1}) (u_{v_2} b_{v_2} - v_{v_2}^* b_{v_2}^+) \\ &\equiv \sum_{v_1 v_2} (b_{v_1}^+ b_{v_2} u_{v_1}^* u_{v_2} + b_{v_1} b_{v_2}^+ v_{v_1} v_{v_2}^* \\ &\quad + b_{v_1}^+ b_{v_2} u_{v_1}^* v_{v_2}^* - b_{v_1} b_{v_2} v_{v_1} u_{v_2}) \end{aligned}$$

$$g^2 = \sum'_{\nu\lambda} (u_\nu b_\nu - v_\nu^* b_\nu^+) (u_\lambda b_\lambda - v_\lambda^* b_\lambda^+)$$

$$(11) \quad = \sum'_{\nu\lambda} (b_\nu b_\lambda u_\nu u_\lambda + b_\nu^+ b_\lambda^+ v_\nu^* v_\lambda^* - b_\nu^+ b_\lambda v_\nu^* u_\lambda - b_\nu b_\lambda^+ u_\nu v_\lambda^*)$$

$$g^{+2} = \sum'_{\nu\lambda} (u_\nu^* b_\nu^+ - v_\nu b_\nu) (u_\lambda^* b_\lambda^+ - v_\lambda b_\lambda)$$

$$(12) \quad = \sum'_{\nu\lambda} (b_\nu^+ b_\lambda^+ u_\nu^* u_\lambda^* + b_\nu b_\lambda v_\nu v_\lambda - b_\nu^+ b_\lambda u_\nu^* v_\lambda - b_\nu b_\lambda^+ v_\nu u_\lambda^*)$$

D.h. der Hamiltonoperator (5) erhält die Form

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum'_{\nu\lambda} b_\nu^+ b_\lambda \int d^3\vec{r} \left[u_\nu^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \mu + 2g N_0 |\phi|^2 \right) u_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^2 u_\nu^* v_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} v_\nu^* u_\lambda \right]$$

$$(13) \quad + \sum'_{\nu\lambda} b_\lambda b_\nu^+ \int d^3\vec{r} \left[v_\lambda \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \mu + 2g N_0 |\phi|^2 \right) v_\nu^* - \frac{g}{2} N_0 \phi^2 v_\lambda u_\nu^* - \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} u_\lambda v_\nu^* \right]$$

$$- \sum'_{\nu\lambda} b_\nu^+ b_\lambda^+ \int d^3\vec{r} \left[u_\nu^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \mu + 2g N_0 |\phi|^2 \right) v_\lambda^* - \frac{g}{2} N_0 \phi^2 u_\nu^* u_\lambda^* - \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} v_\nu^* v_\lambda^* \right]$$

$$- \sum'_{\nu\lambda} b_\nu b_\lambda \int d^3\vec{r} \left[v_\nu \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \mu + 2g N_0 |\phi|^2 \right) u_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^2 v_\nu v_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} u_\nu u_\lambda \right]$$

Nun fordern wir, daß u_k, v_k die sogenannten Bogoliubov-deGennes Gleichungen erfüllen:

$$(14) \quad \begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \mu + 2gN_0 |\phi|^2 \right) u_k - gN_0 \phi^2 v_k = E_k u_k \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V - \mu + 2gN_0 |\phi|^2 \right) v_k - gN_0 \phi^{*2} u_k = -E_k v_k \end{cases}$$

$= \mathcal{L} \qquad E_k = \text{Quasienergie}$

Aus diesen folgt

$$\begin{aligned} \int d^3 \vec{r} \, u_j^* (\mathcal{L} u_k - gN_0 \phi^2 v_k) &= \int d^3 \vec{r} \, E_k u_j^* u_k \\ - \int d^3 \vec{r} \, u_k (\mathcal{L} u_j^* - gN_0 \phi^{*2} v_j^*) &= - \int d^3 \vec{r} \, E_j^* u_j^* u_k \\ + \int d^3 \vec{r} \, v_j^* (\mathcal{L} v_k - gN_0 \phi^{*2} u_k) &= \int d^3 \vec{r} \, -E_k v_j^* v_k \\ - \int d^3 \vec{r} \, v_k (\mathcal{L} v_j^* - gN_0 \phi^2 u_j^*) &= \int d^3 \vec{r} \, +E_j^* v_j^* v_k \end{aligned}$$

$$(15) \Rightarrow \quad 0 = \int d^3 \vec{r} \, (u_j^* u_k - v_j^* v_k) (E_k - E_j^*)$$

Solange die Quasienergien nicht entartet sind können wir daher sehen

$$(16) \quad \int d^3 \vec{r} \, (u_j^* u_k - v_j^* v_k) = \delta_{jk}$$

Eine analoge Rechnung führt auf

$$(17) \quad 0 = \int d^3 \vec{r} \, (u_j v_k - u_k v_j) (E_k + E_j)$$

was mit $E_k > 0$ auf

$$(18) \quad \boxed{\int d^3\vec{r} (u_j v_k - u_k v_j) = 0}$$

führt.

Mit den Bogoliubov - de Gennes Gleichungen wird aus den Termen im Hamiltonoperator (13):

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu\lambda} b_{\nu}^{\dagger} b_{\lambda} \int d^3\vec{r} \left[u_{\nu}^* \mathcal{L} u_{\lambda} - \frac{g}{2} N \phi^2 u_{\nu}^* v_{\lambda} - \frac{g}{2} N \phi^{*2} v_{\nu}^* u_{\lambda} \right] \\ &= \sum_{\nu\lambda} b_{\nu}^{\dagger} b_{\lambda} \int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} u_{\nu}^* \mathcal{L} u_{\lambda} + \frac{1}{2} u_{\lambda} \mathcal{L} u_{\nu}^* - \frac{g}{2} N \phi^2 u_{\nu}^* v_{\lambda} \right. \\ & \quad \left. - \frac{g}{2} N \phi^{*2} v_{\nu}^* u_{\lambda} \right] \end{aligned} \quad (19)$$

$$= \sum_{\nu\lambda} b_{\nu}^{\dagger} b_{\lambda} \int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} (E_{\lambda} + E_{\nu}) u_{\nu}^* u_{\lambda} \right]$$

sowie

$$\begin{aligned} & \sum_{\nu\lambda} b_{\lambda} b_{\nu}^{\dagger} \int d^3\vec{r} \left[v_{\lambda} \mathcal{L} v_{\nu}^* - \frac{g}{2} N \phi^2 v_{\lambda} u_{\nu}^* - \frac{g}{2} N \phi^{*2} u_{\lambda} v_{\nu}^* \right] \\ (20) \quad &= \sum_{\nu\lambda} b_{\lambda} b_{\nu}^{\dagger} \int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} v_{\lambda} \mathcal{L} v_{\nu}^* + \frac{1}{2} v_{\nu}^* \mathcal{L} v_{\lambda} - \frac{g}{2} N \phi^2 v_{\lambda} u_{\nu}^* \right. \\ & \quad \left. - \frac{g}{2} N \phi^{*2} u_{\lambda} v_{\nu}^* \right] \\ &= - \sum_{\nu\lambda} b_{\lambda} b_{\nu}^{\dagger} \int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} (E_{\lambda} + E_{\nu}) v_{\nu}^* v_{\lambda} \right] \end{aligned}$$

während man für die Nichtdiagonalelemente erhält

$$\sum'_{\nu\lambda} b_\nu b_\lambda \int d^3\vec{r} \left[V_\nu \mathcal{L} u_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^2 V_\nu V_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} u_\nu u_\lambda \right]$$

$$\stackrel{\text{pol.}}{\underset{\text{Int.}}{=}} \sum'_{\nu\lambda} b_\nu b_\lambda \int d^3\vec{r} \left[\frac{1}{2} V_\nu \mathcal{L} u_\lambda + \frac{1}{2} u_\lambda \mathcal{L} V_\nu - \frac{g}{2} N_0 \phi^2 V_\nu V_\lambda - \frac{g}{2} N_0 \phi^{*2} u_\lambda u_\nu \right] \quad (21)$$

$$= \sum'_{\nu\lambda} b_\nu b_\lambda \int d^3\vec{r} (E_\lambda - E_\nu) u_\lambda V_\nu = 0$$

denn $\int d^3\vec{r} u_\lambda V_\nu = \int d^3\vec{r} u_\nu V_\lambda$ d.h. symmetrisch in λ und ν während $E_\lambda - E_\nu$ antisymmetrisch in λ und ν ist.

Damit finden wir für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum'_{\nu\lambda} b_\nu^\dagger b_\lambda \int d^3\vec{r} (u_\nu^* u_\lambda - V_\nu^* V_\lambda) \frac{1}{2} (E_\lambda + E_\nu) \quad (22)$$

$$- \sum_\nu \int d^3\vec{r} E_\nu |V_\nu|^2$$

was mit der Orthogonalitätsrelation (16) übergeht in

$$(23) \quad \boxed{\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_\nu E_\nu \hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\nu - \sum_\nu \int d^3\vec{r} E_\nu |V_\nu|^2}$$

In Bogoliubov Näherung entspricht der Hamiltonoperator einem Gas wechselwirkungsfreier Bosonen $\hat{b}_\nu, \hat{b}_\nu^\dagger$, den sog. Quasiteilchenanregungen mit einem Energiespektrum E_ν , welches aus den Bogoliubov -

de Gennes Gleichungen (14) folgt.

Nun wollen wir die Bogoliubov-de Gennes Gleichungen für ein homogenes Kondensat lösen. Dazu können wir ebene Wellen ansetzen bei periodischen Randbedingungen

$$(24) \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{L^{3/2}} u_{\vec{k}}$$

$$v_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{L^{3/2}} v_{\vec{k}}$$

Ist $\phi_0 = N_0 |\phi|^2 = N_0 \phi^2 = N_0 \phi^{*2}$ die Kondensatdichte geht (14) in die Matrixgleichung

$$(25) \quad \overset{M_{\vec{k}}}{\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + 2g\phi_0 & -g\phi_0 \\ g\phi_0 & -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mu - 2g\phi_0 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} \end{pmatrix} = E_{\vec{k}} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} \end{pmatrix}$$

D.h. $\begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} \end{pmatrix}$ ist ein Rechtseigenzustand der Matrix $M_{\vec{k}}$ zum Eigenwert $E_{\vec{k}}$. Da im homogenen Kondensat gilt:

$$(26) \quad \mu = g\phi_0$$

(Energie ist nur Wechselwirkungsenergie), sind die Bogoliubovenergien die Eigenwerte der Matrix

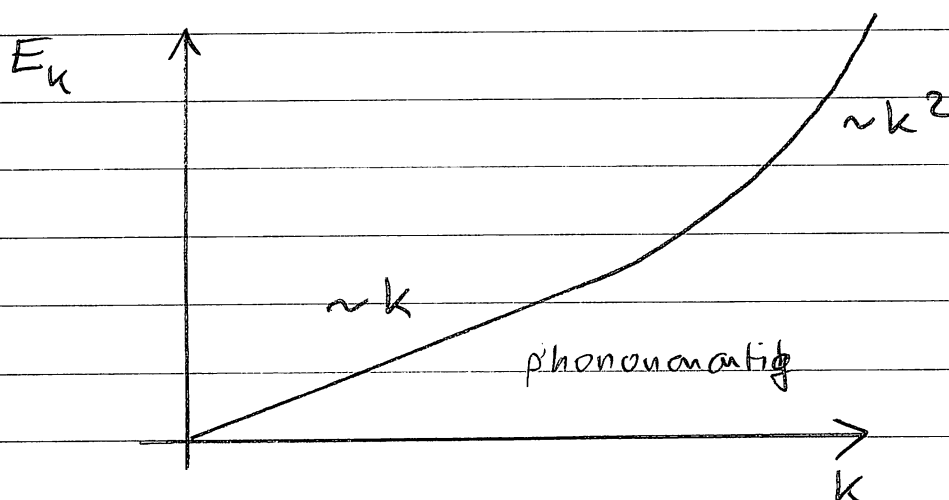
$$(27) \quad M_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gS_0 & -gS_0 \\ gS_0 & -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - gS_0 \end{pmatrix}$$

Für $k \neq 0$ (und diesen Wert müssen wir ausschließen um die Orthogonalität der Eigenfunktionen zum Grundzustand zu garantieren) ist $M_{\vec{k}}$ diagonalisierbar und man findet

$$(28) \quad E_{\vec{k}} = \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2gS_0 \right) \right]^{1/2}$$

Die Energien $E_{\vec{k}}$ sind nur reell falls $g > 0$ d.h. bei repulsiver Wechselwirkung. Für attraktive Wechselwirkung gibt es imaginäre Werte $E_{\vec{k}}$, was die Instabilität des Gases bei $g < 0$ andeutet.

Man findet, daß das Bogoliubovspektrum für kleine Werte von k linear ist



Im linearen Bereich gilt

$$(29) \quad E_{\vec{k}} \simeq \hbar k \sqrt{\frac{\rho g}{m}} = \hbar \omega_{\vec{k}}$$

D.h. in diesem Bereich breiten sich Anregungen mit der Gruppen (= Phasengeschwindigkeit

$$(30) \quad c_s = \frac{d\omega_{\vec{k}}}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_{\vec{k}}}{dk} = \sqrt{\frac{\rho g}{m}}$$

Schallgeschwindigkeit niederenergetischer Anregungen

Die Tatsache, daß ein wechselwirkendes Bosegas (im Unterschied zum freien Bosegas) für niedrige Energien eine lineare Dispersion besitzt führt zur Superfluidität des Gases. Superfluidität bedeutet, daß ein Teilchen der Masse m_1 sich ungestört d.h. ohne Widerstand durch das Gas bewegen kann, solange seine Geschwindigkeit u unterhalb eines kritischen Wertes ist: Um abgebremst zu werden, muß das Teilchen kinetische Energie und Impuls $\hbar \vec{k}$ an das Gas abgeben

$$(31) \quad \frac{1}{2} m_1 \vec{u}^2 - \frac{1}{2m_1} (m_1 \vec{u} - \hbar \vec{k})^2 = \Delta E_{\vec{k}}$$

$$(32) \quad \hbar \vec{k} \cdot \vec{u} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} = \Delta E_{\vec{k}}$$

Damit eine solche Anregung mit dem Bogoliubovspektrum verträglich ist muß

$$(33) \quad u \geq \frac{|\vec{k} \cdot \vec{u}|}{k} \geq \frac{E_{\vec{k}}}{\hbar k} = c_s$$

Für (34)

$$u < c_s$$

Landau's Kriterium
des Superfluidität

ist keine Abgabe von Energie und Impuls an das Gas möglich, d.h. das Gas ist Superfluid.

Mit Hilfe der Bogoliubov Theorie können wir die mittlere Zahl der Teilchen außerhalb des Kondensats berechnen im thdyn. Gleichgewicht und Temperatur T

$$(35) \quad \begin{aligned} \langle \hat{N}_{nc} \rangle_T &= \int d^3\vec{r} \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle_T \\ &= \sum_{k,k'} \left\{ \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} \rangle_T \int d^3\vec{r} u_k^* u_{k'} + \langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle_T \int d^3\vec{r} v_k v_{k'}^* \right\} \end{aligned}$$

wobei $\langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \rangle_T = \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle_T = 0$ benutzt wurde.

Außerdem gilt im thdyn. GG. daß nur Erwartungswerte mit gleichen Indizes von null verschieden sind, d.h.

$$(36) \quad \begin{aligned} \langle \hat{N}_{nc} \rangle_T &= \sum_k \int d^3\vec{r} |v_k|^2 & T=0 \\ &+ \sum_k \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle_T \int d^3\vec{r} (|u_k|^2 + |v_k|^2) & \text{nur bei } T \neq 0 \end{aligned}$$

Der erste Term existiert auch bei $T=0$ und beschreibt die Teilchenzahl die aufgrund der Wechselwirkung aus dem Kondensat verloren geht ("quantum depletion")

Im Falle eines homogenen Kondensats (mit periodischen Randbedingungen) findet man mittels (24) und Lösung von (25) das auf

$$\begin{aligned}
 (37) \quad U_k + V_k &= \left(\frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2g_0 g} \right)^{1/4} \\
 U_k - V_k &= \left(\frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2g_0 g} \right)^{-1/4}
 \end{aligned}$$

führt, nach Ersetzung $\sum_k \rightarrow \int d^3k \frac{L^3}{(2\pi)^3}$

$$(38) \quad \boxed{\frac{\langle \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0}}{N_0} = \frac{g}{3\pi^{1/2}} (g_0 a^3)^{1/2}} \quad \text{quantum depletion}$$

mit $g_0 = N_0/L^3$ und a der s-Wellenstreuungslänge.
 Bei endlichen Temperaturen muß auch noch der zweite Term in (36) berücksichtigt werden und man findet für das homogene Kondensat für $k_B T \ll g_0 g$

$$(39) \quad \boxed{\frac{\langle \hat{N}_{nc} \rangle_T}{N_0} = \frac{\langle \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0}}{N_0} \left[1 + \left(\frac{\pi k_B T}{2g g_0} \right)^2 + \dots \right]}$$

bzw. im Hochtemperaturlimit $k_B T \gg g_0 g$:

$$(40) \quad \boxed{\frac{\langle \hat{N}_{nc} \rangle_T}{N_0} \simeq \frac{g(3/2)}{g_0 \lambda_{dB}^3}}$$

Analog zu obigen Rechnungen kann man auch die Fluktuationen der Teilchenzahl berechnen.

Für $T=0$ findet man

$$(41) \quad \langle \delta \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0} = \sqrt{\langle \hat{N}_{nc}^2 \rangle_{T=0} - \langle \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0}^2}$$

$$= \langle \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0} + \sum_k' |V_k|^4 + |U_k|^2 |V_k|^2$$

Ohne Wechselwirkung, d.h. für $g=0$ folgt aus (37)

$$(42) \quad V_k \equiv 0 \quad (g=0)$$

und somit wie erwartet

$$(43) \quad \langle \delta \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0} = \langle \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0} = 0$$

Mit Wechselwirkungen findet man hingegen

$$(44) \quad \langle \delta \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0} = \frac{1}{g} \sum_k' \frac{1}{g^2(1+g^2)}$$

wobei

$$(45) \quad g^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{4m g_0 g}$$

Ersetzen der Summe in (44) durch ein Integral $\sum_k \rightarrow \int d^3k \frac{L^3}{(2\pi)^3}$ liefert schließlich

$$(46) \quad \boxed{\frac{\langle \delta \hat{N}_{nc} \rangle_{T=0}}{N_0} = 2\pi^{1/2} (g_0 a^3)^{1/2} = \frac{\langle \delta \hat{N}_c \rangle_{T=0}}{N_0}}$$

(Bei fester Gesamtteilchenzahl gilt natürlich $\delta \hat{N}_{nc} = \delta \hat{N}_c$.)
 Man erkennt, daß die Teilchenzahlfuktuationen des Kondensats sub-poissonisch sind da $g a^3 \ll 1$.

Bemerkungen:

- Die Lösung der Bogoliubov-de Gennes Gleichungen für ein Kondensat in einer harmonischen Falle ist i.A. kompliziert. Eine näherungsweise analytische Lösung findet man in P. Öhberg et al. Phys. Rev. A 56 (1997) 123346,

(B) Hartree-Fock Bogoliubov Approximation

In der Bogoliubov Theorie wird die Auswirkung thermischer Atome auf das Kondensat nicht berücksichtigt. Eine verbesserte Näherung die dieses tut wollen wir nun kennenlernen. Dazu schreiben wir den Ansatz (2)

$$(47) \quad \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \sqrt{N_0} \phi(\vec{r}, t) + \hat{\xi}(\vec{r}, t)$$

in die Heisenbergsche Bewegungsgleichung für $\hat{\Psi}$

$$(48) \quad i\hbar \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\Psi} + V_{\text{trap}} \hat{\Psi} + g \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi}$$

ein. Für den nichtlinearen Term in (48) liefert dies

$$\begin{aligned}
 \hat{\psi}^{\dagger} \hat{\psi} \hat{\psi}^{\dagger} &= N_0^{3/2} |\phi|^2 \phi + 2N_0 |\phi|^2 \hat{\xi}^{\dagger} + N_0 \phi^2 \hat{\xi}^{\dagger} + \\
 (49) \quad &+ \sqrt{N_0} \phi^* \hat{\xi}^{\dagger 2} + 2\sqrt{N_0} \phi \hat{\xi}^{\dagger} \hat{\xi} + \hat{\xi}^{\dagger} \hat{\xi} \hat{\xi}^{\dagger}
 \end{aligned}$$

Nun fordern wir, daß $\langle \hat{\xi}^{\dagger} \rangle = \langle \hat{\xi} \rangle = 0$,
 d.h. $\langle \hat{\psi} \rangle = \sqrt{N_0} \phi(\vec{r}, t)$. Damit erhalten wir
 aus (48) nach Mittelwertbildung

$$\begin{aligned}
 i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + V_{\text{trap}} \phi \\
 (50) \quad &+ g \langle \hat{\psi}^{\dagger} \hat{\psi} \hat{\psi} \rangle
 \end{aligned}$$

Die stationäre Lösung $\phi(\vec{r}, t) = \phi_0(\vec{r}) e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t}$
 muß daher unter Berücksichtigung von (49) der
 Gleichung genügen

$$\begin{aligned}
 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} - \mu \right] \phi_0 + g (N_0 |\phi_0|^2 + 2\langle \hat{\xi}^{\dagger} \hat{\xi} \rangle) \phi_0 \\
 (51) \quad + g \langle \hat{\xi}^{\dagger 2} \rangle \phi_0^* = 0
 \end{aligned}$$

Hierbei haben wir den Term $\langle \hat{\xi}^{\dagger} \hat{\xi} \hat{\xi}^{\dagger} \rangle \approx 0$ gesetzt.
 Nun führen wir die folgenden Bezeichnungen ein

$$\begin{aligned}
 n_c &= N_0 |\phi_0|^2 && \text{Kondensatdichte} \\
 \bar{n} &= \langle \hat{\xi}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\xi}(\vec{r}) \rangle && \text{normale Dichte therm. Atome} \\
 \bar{m} &= \langle \hat{\xi}(\vec{r}) \hat{\xi}(\vec{r}) \rangle && \text{anomale Dichte}
 \end{aligned}
 \quad (52)$$

Wir sehen, daß die Kondensatwellenfunktion in der HFB Näherung der verallgemeinerten Gross-Pitaevski Gleichung genügt die die Streuung an nicht-kondensatomen berücksichtigt

$$(53) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} - \mu + g(n_c + 2\bar{n}) \right] \phi_0 + g\bar{m} \phi_0^* = 0$$

Für die Fluktuationen $\hat{\xi}(\vec{r}, t)$ um die stationäre Lsg. ϕ_0 folgt

$$(54) \quad i\hbar \hat{\xi}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} - \mu \right) \hat{\xi}(\vec{r}, t) + g \left(\hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} - \langle \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \rangle \right)$$

Hier können wir den letzten Term in (49) jetzt nicht vernachlässigen. Vielmehr machen wir eine Molekularfeld-Näherung (mean-field approximation) in (49)

$$(55) \quad \begin{aligned} \hat{\xi}^2 &\rightarrow \langle \hat{\xi}^2 \rangle \\ \hat{\xi}^\dagger + \hat{\xi} &\rightarrow \langle \hat{\xi}^\dagger + \hat{\xi} \rangle \\ \hat{\xi}^\dagger \hat{\xi} \hat{\xi} &\rightarrow 2\langle \hat{\xi}^\dagger \hat{\xi} \rangle \hat{\xi} + \langle \hat{\xi}^\dagger \hat{\xi} \rangle \hat{\xi}^\dagger \end{aligned}$$

Damit wird

$$(56) \quad \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} - \langle \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \rangle = 2n \hat{\xi} + m \hat{\xi}^\dagger$$

mit

$$(57) \quad n = N_0 |\phi_0|^2 + \langle \vec{\psi}^\dagger \vec{\psi} \rangle = n_c + \bar{n} = \langle \vec{\psi}^\dagger \vec{\psi} \rangle$$

$$m = N_0 \phi_0^2 + \langle \vec{\psi} \vec{\psi} \rangle = N_0 \phi^2 + \bar{m} = \langle \vec{\psi} \vec{\psi} \rangle$$

als totale normale bzw. anormale Dichten. Das liefert

$$(58) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\psi}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} - \mu \right) \vec{\psi}(\vec{r}, t) + 2g n(\vec{r}) \vec{\psi}(\vec{r}, t) + g m(\vec{r}) \vec{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)$$

Zur Diagonalisierung von (58) verwenden wir wieder die Bogoliubov Transformation

$$(59) \quad \begin{aligned} \vec{\psi} &= \sum_j u_j \hat{b}_j - v_j^* \hat{b}_j^\dagger \\ \vec{\psi}^\dagger &= \sum_j u_j^* \hat{b}_j - v_j \hat{b}_j^\dagger \end{aligned}$$

Wenn die u_j und v_j jetzt so gewählt werden, daß sie den verallgemeinerten Bogoliubov-Gleichungen

$$(60) \quad \begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} - \mu + 2g n(\vec{r}) \right] u_k - g m(\vec{r}) v_k = E_k u_k \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{trap}} - \mu + 2g n(\vec{r}) \right] v_k - g m^*(\vec{r}) u_k = -E_k v_k \end{cases}$$

genügen, mit Eigenenergien E_k gilt

$$(61) \quad \hat{\psi}(\vec{r}, t) = \sum_j u_j(\vec{r}) \hat{b}_j e^{-i \frac{E_j}{\hbar} t} - v_j^*(\vec{r}) \hat{b}_j^\dagger e^{i \frac{E_j}{\hbar} t}$$

Im Unterschied zur Bogoliubov-Theorie müssen nun die Gleichungen für das Kondensat ((53) anstelle (4)) und die Wellenfunktionen u_j, v_j der Quasiteilchen ((60) anstelle (14)) selbstkonsistent gelöst werden. Dies kann in der Regel nur numerisch geschehen.

Oft verwendet man noch die sog. Papov Näherung bei der die anomale Dichte vernachlässigt wird

$$(62) \quad \overline{m} = 0$$

In Papov Näherung findet man, daß die Lösung der Bogoliubov-de Gennes Gleichungen niedrigster Energie $E_0 = 0$ die Kondensatwellenfunktion ϕ_0 ist, d.h.

$$(63) \quad u_0 = v_0 = \phi_0 \quad E_0 = 0$$

Dies war auch schon der Fall für die einfache Bogoliubov Näherung, die wir in (4) diskutiert hatten. Ausdrück der Lösung mit $E_0 = 0$ erzeugt damit automatisch Lösungen $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$ die orthogonal zu ϕ_0 waren. Diese Eigenschaft ist in der HFB Näherung mit $\overline{m} \neq 0$ nicht mehr gegeben.

Die nachfolgende Abbildung zeigt einen Vergleich zwischen der HFB - Teilchendichte (in Popov Näherung) und einem Resultat aus Quanten - Monte Carlo Simulationen (M. Holzmann, W. Krauth, M. Navaschewski, Phys. Rev. A 59 (1999) 2956)

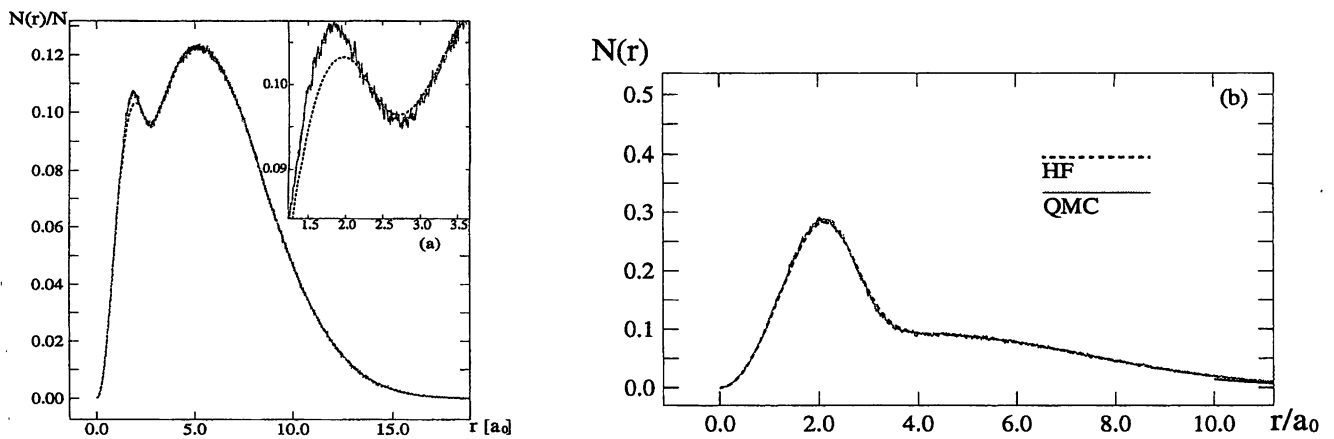


Figure 8: Radial density of particles, $r^2 \rho(r)$, for an interacting Bose gas at thermal equilibrium in an isotropic harmonic trap. Noisy lines: results of a Quantum Monte Carlo simulation. Smooth solid lines: Hartree-Fock prediction. The curves corresponds to the temperatures $T/T_c^0 = 0.88$ (a), $T/T_c^0 = 0.7$ (b). The number of particles is $N = 10^4$ and the parameters are the ones of ^{87}Rb . These figures are taken from [25].