Bose-Einstein kondenzáció

Vizsgálódásunk elején tegyük fel, hogy elég nagy hőmérsékleten vagyunk! A korábbiakat, Soktestprobléma I előadáson tanultakat idézzük fel! Bozonokra a Hamilton operátor:

$$H = \underbrace{\sum_{\mathbf{k},s} e_k a^+_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k},s}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \\ s,s'}} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s} a^+_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},s'} a_{\mathbf{k}',s'} a_{\mathbf{k},s}}_{H_1}$$

ahol H_1 perturbáció.

Nagykanonikus sokaság termodinamikai potenciálja: $K = H - \mu N = K_0 + K_1$, ahol $K_0 = H_0 - \mu N$. A perturbálatlan, H_0 -hoz tartozó rendszer Green-függvénye, vagyis a szabad Green-függvény is tavalyról ismeretes:

$$G_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}$$

ahol bevezettük a $e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ jelölést. A teljes rendszer Green-függvénye pedig

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu) - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

valamint a teljes részecskeszám:

$$N(T, V, \mu) = V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{-1}{\beta \hbar} \sum_n G(\mathbf{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n \eta}$$

ahol η a konvergencia faktor, ami az időrendezés sorrendjét állítja be (azaz a számolások végén elvégezhetjük a $\lim\limits_{\eta \to 0}$ határesetet).

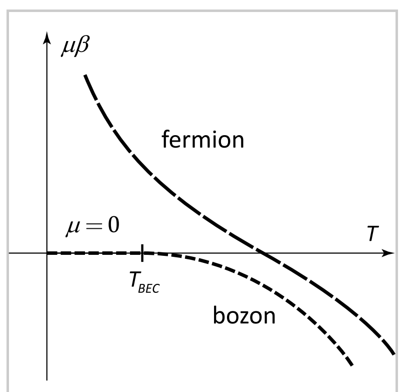
A részecskék száma a Bose-Einstein eloszlás alapján:

$$N'(T, V, \mu) = V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu) - 1}}$$

, melyben az integrandust a

$$-\frac{1}{\beta \hbar} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu)}}$$

összefüggésből kaptuk. Az integrális kifejezés akkor helyénvaló, ha a betöltési-szám függvény elég sima. Bose-Einstein kondenzáció felléptekor pont ez a közelítés nem alkalmazható, ugyanis a legalacsonyabb energiás állapot betöltöttsége makroszkópikus lesz. A későbbiekben majd úgy számolunk, hogy az integrálást tulajdonképp a $\mathbf{k} \neq 0$ állapotokra kell csak elvégezni, a $\mathbf{k} = 0$ esetet pedig külön kiszámolni Ugyanakkor elvégezhetjük az integrálást a teljes impulzustérre, hisz egy pontot kihagyva (aminek a mértéke 0) az integrál értéke nem változik az

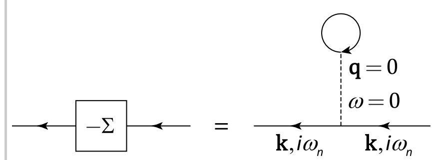


A bozonok görbéje hozzásimul a tengelyhez.

integrandus exponenciális függése miatt.

Tudjuk, hogy $\mu \leq 0$ stabilitási feltételnek teljesülnie kell. Ahhoz, hogy N visszaadja valóban a teljes részecskeszámot, ehhez hozzá kell még adni a $\mathbf{k} = 0$ állapotú részecskéket, így a teljes részecskeszám $T < T_{BEC}$ hőmérsékleten: $N(T, V, \mu = 0) = N' + N_0$, ahol N_0 a Bose-Einstein kondenzációban (BEC) lévő részecskék száma, hullámszámvektoruk $\mathbf{k} = 0$.

Hartree-közelítés



Hartree-diagram

$-\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(-\hbar^{-1}\right) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \underbrace{\frac{1}{\beta\hbar} \sum_m -G_0(\mathbf{q}, i\omega_n) e^{i\omega_n \eta}}_{\frac{1}{e^{\beta(e_q - \mu)} - 1} = n^{(0)}(\mathbf{q})} \cdot v(0)$, ahol $\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta\hbar}$ a Matsubara-frekvencia. $\hbar\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v(0) n^{(0)}(\mathbf{q})$, melyből $v(0)$ kivihető az integrálás elé, így

$$-\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v(0) n^{(0)}(\mathbf{q}) = v(0) n$$

ahol $n = N/V$.

A Hartree-propagátor így:

$$G^H(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k + nv(0) - \mu)}$$

ahol $\omega_n = \frac{2\pi m}{\beta\hbar}$

BEC.: $\mu = nv(0)$, $e_k^H := e_k + nv(0)$

$$G^H(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}\left(e_k^H - \mu\right)} = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu_0)}$$

ahol $\mu_0 = \mu - nv(0)$. Általánosan akkor következik be Bose-Einstein kondenzáció, amikor $\mu = \hbar\Sigma(0,0)$ lesz.

T_C meghatározása

$T = T_c$ épp akkor, amikor $\mu_0 = 0$, de még $N_0 = 0$.

$$N = V(2s+1) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta_c e_k} - 1}$$

ahol $\beta_c = \frac{1}{k_B T_{BEC}}$. Számoljuk ki az integrált! Vezessük be a $\beta_C e_k = \frac{\beta_c \hbar^2 k^2}{2m} = x^2$, vagyis $x = \sqrt{\frac{\beta_c \hbar^2}{2m}} \cdot k$ rövidítést dimenziótlanítás végett! Ekkor

$$N = \frac{V \cdot (2s+1)}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{2m}{\beta_c \hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^{x^2} - 1}$$

Vezessük be: $t = x^2 \Rightarrow dt = 2xdx \Rightarrow x^2 dx = \frac{1}{2}\sqrt{t}dt$. Ekkor

$$N = \frac{V(2s+1)}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\beta_c \hbar^2}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^\infty dt \frac{t^{1/2}}{e^t - 1}}_{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\cdot\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \Rightarrow k_B T_{BEC} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4\pi^2}{(2s+1)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left[\left(\frac{3}{2}\right)\right]}\right)^{2/3} \cdot \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \approx \frac{\hbar^2}{(2s+1)^{2/3}} n^{2/3} \frac{3{,}31}{m}$$

vagyis láthatjuk, hogy a kritikus hőmérséklet a Hartree-közelítésben nem változik az ideális gázmodell közelítéséhez képest.

T_c alatti eset tárgyalása

$N = N_0 + N'$, ahol $N' = V(2s+1)\int \frac{dk^3}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta e_k} - 1} = N\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$. Ekkor $N_0 = N - N' = N \cdot \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right)$. Ez csak $T \approx T_c$ esetén igaz, mert minél kisebb T , annál több atom lesz a kondenzátumban, márpedig mi a kölcsönhatást nem vettük figyelembe a kondenzátumban levő atomokra. Későbbiekben ezt figyelembe kell venni, azaz a kondenzált atom kondenzált atomon történő szóródását.

Kölcsönható Bose gáz 0 hőmérsékleten

Az előző képletet, ha megnézzük, $T = 0$ esetén $N_0 = N$. Ha van kölcsönhatás is, az kiszór atomokat a kondenzátumból, de első közelítésben azt mondjuk, hogy ez nagyon kicsi, vagyis hogy $N_0 \approx N$, és hogy a kölcsönhatás nagyon gyenge. A Hamilton operátor az eddig felírt, azaz

$$H = \sum_{\mathbf{k}} e_k a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}$$

ahol $a_0|BEC\rangle = \sqrt{N}|BEC\rangle_{N-1}$, melyben $|BEC\rangle = |N,0,0,...\rangle$. Ugyanígy $a_0^+|BEC\rangle_N = \sqrt{N+1}|BEC\rangle_{N+1}$. Bogo azt mondta, hogy $N - 1 \approx N \approx N + 1$ ha $N \to \infty$. Ekkor az ún. Bogoljubov-előírás: $a_0 = a_0^+ = \sqrt{N}$. (Tudjuk, hogy $\left[a_k, a_{k'}^+\right] = \delta_{k,k'}$, azaz $\left[a_0, a_0^+\right] = 1$, most pedig $\left[a_k, a_{k'}^+\right] = 0$, azaz a felcserélési relációt elrontjuk. A hiba $1/N$ -es , de ez nem olyan nagy, mert ekkora hibát akkor is elkövetünk, ha azt mondjuk, hogy egy véges rendszerben fázisátalakulás megy végbe, pedig végesben ez sosem megy végbe). Cseréljük le ezeket az operátorokat a Hamilton operátorban! Vegyük figyelembe, hogy mely kombinációkban fordulhatnak elő a keltő és eltüntető operátorok 0 indexű változatai! Ekkor

$$H = \sum_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V}\sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \\ \mathbf{k}\neq 0\neq \mathbf{k}' \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0 \\ \mathbf{k}'-\mathbf{q}\neq 0}} v(q) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} + \sqrt{\frac{n_0}{V}} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{q} \\ \mathbf{k}\neq 0 \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0 \\ \mathbf{q}\neq 0}} v(q)\left(\underbrace{a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}}_{\text{ha } \mathbf{k}'=\mathbf{q}} + \underbrace{a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}}_{\text{ha } \mathbf{k}'=0}\right) +$$

$$+ n_0 v(0) \overbrace{\sum_{\substack{\mathbf{k} \\ k\neq 0}} \underbrace{a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}}_{\text{ha } \mathbf{q}=0 \text{ és } \mathbf{k}'=0}}^{n'} + n_0 \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ q\neq 0}} v(\mathbf{q}) \underbrace{a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}}}_{\text{ha } \mathbf{k}=0 \text{ és } \mathbf{q}=\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} n_0 \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ q\neq 0}} v(\mathbf{q})\left(\underbrace{a_{\mathbf{q}}^+ a_{-\mathbf{q}}^+}_{\text{ha } \mathbf{k}'=\mathbf{k}=0} + \underbrace{a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}}}_{\text{ha } -\mathbf{k}=\mathbf{q}=\mathbf{k}'}\right) + \underbrace{\overbrace{\frac{V}{2} n_0^2 v(0)}^{\approx \frac{V}{2} n^2 v(0) - 2\frac{V}{2} n' n_0 v(0)}}_{\text{ha } \mathbf{k}=\mathbf{k}'=0 \text{ és } \mathbf{k}=\mathbf{q}}$$

ahol $n_0 = N_0/V$ és $n' = N'/V$. Feltételezzük, hogy a 2. és 3. tagok kicsik, valamint az n_0 -t nem tartalmazó tagokat elhagytuk. Jó lenne, ha n_0 -t eliminálhatnánk. Feltettük, hogy $n' \ll n_0$, emiatt $n = n_0 + n' \approx n_0$, illetve $n^2 = (n_0 + n')^2 = n_0^2 + 2n_0 n'^2 \approx n_0^2 + 2n_0 n'$. Ezt írjuk be a Hamilton operátorba, s írjuk be a közelítéseket!

$$H = \frac{V}{2} n^2 v(0) + \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} (e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} n \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} v(\mathbf{k}) \left(a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ \right) + \frac{1}{2} n \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} v(\mathbf{k}) \left(a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ \right)$$

Szeretnénk diagonalizálni ezt a Hamilton operátort, azaz

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + E_0$$

alakra hozni, ahol $\alpha_{\mathbf{k}} |BEC\rangle = 0$. Vegyük $\alpha_{\mathbf{k}}$ és $\alpha_{\mathbf{k}}^+$ -nak a következőket, majd ellenőrizzük le a felcserélési relációkat: $\alpha_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^+$, illetve $\alpha_{-\mathbf{k}}^+ = u_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^+ - v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}$, tegyük fel továbbá, hogy $u_{\mathbf{k}} = u_k$ és $v_{\mathbf{k}} = v_k$, azaz $\mathbf{k}$ -nak csak az abszolút értékétől függ, illetve u_k és v_k is valós. Kell, hogy teljesítsék a felcserélési relációt, azaz $\left[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k'}}^+ \right] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k'}}$. A definíciójukból eredően ez feltételt ró u_k és v_k paraméterekre:

$$\left[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k'}}^+ \right] = u_k u_{k'} \left[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k'}}^+ \right] - v_k v_{k'} \left[a_{-\mathbf{k'}}, a_{-\mathbf{k}}^+ \right] = \left(u_k^2 - v_k^2 \right) \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k'}} \Rightarrow \boxed{u_k^2 - v_k^2 = 1}$$

Ezek segítségével algebrai úton kifejezhető az eredeti keltő és eltüntető operátor:

$$a_{\mathbf{k}} = u_k \alpha_{\mathbf{k}} + v_k \alpha_{-\mathbf{k}}^+$$

$$a_{\mathbf{k}}^+ = u_k \alpha_{\mathbf{k}}^+ + v_k \alpha_{-\mathbf{k}}$$

Ekkor a Hamilton-operátort a $H = U + H_{11} + H_{20}$ alakban írhatjuk, ahol

$$U = \frac{V}{2} n^2 v(0) + \sum_{\mathbf{k}} \left[(e_k + nv(0)) v_k^2 + nv(k) u_k v_k \right]$$

$$H_{11} = \sum_{\mathbf{k}} \left[(e_k + nv(k)) \left(u_k^2 + v_k^2 \right) + 2nv(\mathbf{k}) u_k v_k \right] \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}$$

$$H_{20} = \sum_{\mathbf{k}} \underbrace{\left[(e_k + nv(\mathbf{k})) u_k v_k + \frac{1}{2} nv(\mathbf{k}) \left(u_k^2 + v_k^2 \right) \right]}_{\text{ez legyen } =0, \text{ mert akkor } H \text{ diagonális lesz}} \left(\alpha_k \alpha_{-k} + \alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ \right)$$

Ezeknek a megoldása, vagyis a

$$u_k^2 - v_k^2 = 1$$

$$(e_k + nv(\mathbf{k})) u_k v_k + \frac{1}{2} nv(\mathbf{k}) \left(u_k^2 + v_k^2 \right) = 0$$

egyenletrendszernek: $u_k = \operatorname{ch} \chi_k$, illetve $v_k = \operatorname{sh} \chi_k$, ahol χ_k tetszőleges függvény. Erre a χ_k -ra további megszorításokat tehetünk.