

Superfluide Eigenschaften ungeordneter Bosonen

Diplomarbeit von
Ben Klünder



vorgelegt dem Fachbereich Physik
der Universität Duisburg-Essen
am 4. Dezember 2007

ii

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Duisburg, 4. Dezember 2007

Hauptgutachter: Prof. Dr. Dr. h.c. Robert Graham
Zweitgutachter: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Ideales Bose-Gas in harmonischer Falle	9
2.1	Theorie ohne Ordnungsparameter	11
2.1.1	Großkanonisches Potential	11
2.1.2	Teilchenzahlgleichung	12
2.1.3	Besetzung des Grundzustandes	14
2.1.4	Wärmekapazität	14
2.2	Theorie mit Ordnungsparameter	17
2.2.1	Kanonische Zustandssumme für ein Teilchen	18
2.2.2	Funktionalintegral für großkanonische Zustandssumme	19
2.2.3	Definition des Effektiven Potentials	22
2.2.4	Berechnung des Erzeugenden Funktional	24
2.2.5	Berechnung des Effektiven Potentials	26
2.2.6	Berechnung der Vielteilchen-Green-Funktion	28
2.2.7	Berechnung des $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$	30
2.2.8	Semiklassische Näherung	31
2.3	Korrigiertes großkanonisches Potential	33
2.3.1	Korrigierter Ansatz für Bose-Felder	34
2.3.2	Bose-Gas in isotroper harmonischer Falle	34
2.3.3	Teilchenzahlgleichung	35
2.3.4	Wärmekapazität	35
2.4	Korrigierte semiklassische Näherung	38
2.4.1	Teilchenzahlgleichung	39
2.4.2	Chemisches Potential	40
2.4.3	Kritische Temperatur	41
2.4.4	Kondensatanteil	42
2.4.5	Wärmekapazität	44
2.4.6	Vergleich mit der Literatur	48
2.4.7	Vielteilchen-Green-Funktion des harmonischen Oszillators	49

3	Ungeordnetes Bose-Gas in harmonischer Falle	55
3.1	Zufallspotential	55
3.2	Hintergrund-Methode	56
3.3	Effektives Potential für schwache Unordnung	59
3.4	Chemisches Potential	62
3.5	Greensche Funktion	64
3.6	Kritische Temperatur	67
3.7	Unordnungsmittel	69
3.7.1	Semiklassik	69
3.7.2	Erster Beitrag höherer Ordnung	71
3.7.3	Weitere Beiträge höherer Ordnung	73
3.7.4	Thermodynamischer Limes großer Teilchenzahlen	75
3.7.5	Vergleich mit der Literatur	81
3.7.6	Varianz und Standardabweichung	82
4	Zusammenfassung und Ausblick	85
5	Danksagung	89
A	Resummation	91
A.1	Euler-MacLaurin-Formel	91
A.2	Dimensionale Regularisierung	93
A.3	Vollständige Induktion	95
B	Greensche Funktion des harmonischen Oszillators	99
C	Unordnungsmittel für effektives Potential	103
	Literaturverzeichnis	107

Kapitel 1

Einleitung

Die Bose-Einstein-Kondensation beschreibt die Entstehung einer makroskopischen Besetzung des Grundzustandes eines massiven Vielteilchen-Systems und wurde bereits 1924 von A. Einstein, basierend auf einer Arbeit von S. N. Bose zu masselosen Teilchen, vorausgesagt [1, 2]. Da sie im Allgemeinen bei sehr niedrigen Temperaturen auftritt, konnte ein experimenteller Nachweis erst nach der Entwicklung neuartiger Kühlmethoden im Jahr 1995 von E. A. Cornell, C. E. Wieman und W. Ketterle erbracht werden [3, 4]. Bosonische Atomgase werden stark verdünnt in eine Atomfalle plaziert und abgekühlt. Wichtig ist hierbei, dass das Gas so verdünnt ist, dass es sich beim Abkühlen nicht verflüssigt und auch nicht zu kristallisieren beginnt. In den gleichen Zeitraum wie die ersten Experimente zur Bose-Einstein-Kondensation fallen auch einige theoretische Arbeiten, die sich mit der Beschreibung der entsprechenden Bose-Einstein-Kondensate befassen. Im großkanonischen Ensemble lassen sich die thermodynamischen Größen mithilfe einer semiklassischen Näherung analytisch berechnen, wobei die führende Ordnung dieser Entwicklung dem thermodynamischen Limes unendlich vieler Bosonen entspricht. Die Korrekturen dieses Limes, die der Endlichkeit des Systems Rechnung tragen, werden als Finite-Size-Effekte bezeichnet und gerieten in den Blickpunkt der Arbeiten von S. Grossmann, M. Holthaus, N. J. van Druten und W. Ketterle [5, 6]. Nachdem auch der Einfluss der schwachen Zwei-Teilchen-Wechselwirkung auf die kritische Temperatur, bei der die Bose-Einstein-Kondensation auftritt, von L. P. Pitaevskii und S. Stringari berechnet wurde [7], war es also möglich, die experimentell bestimmte kritische Temperatur auch quantitativ mit theoretischen Berechnungen zu vergleichen. Der Finite-Size-Effekt der kritischen Temperatur wurde 1996 von E. A. Cornell und C. E. Wieman bestätigt [8], der Einfluss der Wechselwirkung konnte 2004 von A. Aspect nachgewiesen werden [9].

Häufig werden zur theoretischen Beschreibung von Experimenten idealisierte Annahmen zu den auftretenden Ein-Teilchen-Potentialen gemacht, beispielsweise werden die für die Bose-Einstein-Kondensation verwendeten Atomfallen oft durch ideale harmonische Potentiale angenähert. Vernachlässigt werden dabei kleine störende Einflüsse, die sich experimentell nicht beseitigen lassen, beispielsweise erzeugen Unebenheiten in den

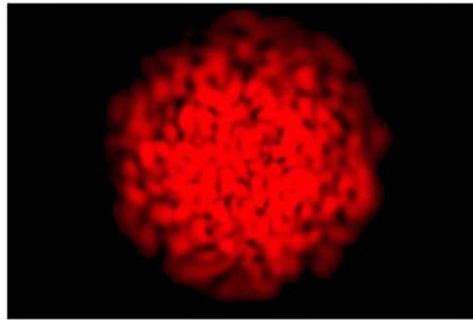


Abbildung 1.1: Fotoaufnahme eines Laser-Speckle-Musters [10].

Bauteilen von Atomfallen mikroskopische Störungen im Fallenpotential. Einige solcher Störungen können durch Zufalls- bzw. Unordnungspotentiale modelliert werden. Hierbei betrachtet man ein Ensemble von Zufallspotentialen, die zwar mikroskopisch verschieden sind, sich aber makroskopisch durch die gleichen Eigenschaften charakterisieren lassen. Anhand dieses Ensembles kann man analytisch einen Mittelwert über das Ensemble definieren und entsprechend gemittelte physikalische Größen des Systems berechnen. Eine andere Möglichkeit besteht darin, den Einfluss verschiedener Zufallspotentiale auf das System jeweils einzeln numerisch zu berechnen und anschließend den Mittelwert zu bilden.

Eine Besonderheit stellt die Unordnung in Bose-Einstein-Kondensaten dar, da man an diesem System den Einfluss der Unordnung an einem makroskopischen quantenmechanischen Objekt studieren kann. Da man natürliche Zufallspotentiale nicht experimentell kontrollieren kann, ist es notwendig, künstliche veränderbare Zufallspotentiale zu erzeugen. Hierfür gibt es mehrere Möglichkeiten, von denen im Folgenden einige vorgestellt werden.

Eine dieser Möglichkeiten stellen Laser-Speckle dar, wie sie in den Arbeitsgruppen von A. Aspect und M. Inguscio an Bose-Einstein-Kondensaten angewandt werden [11, 12]. Laser-Speckle entstehen, wenn ein Strahl monochromatischen Lichtes durch eine transparente Scheibe geführt wird, die auf der der Lichtquelle abgewandten Seite eine raue Oberfläche besitzt [13]. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass das Licht vollständig polarisiert ist. Das durch die Scheibe dringende Licht erzeugt in zur Scheibe parallelen Ebenen zufällige Intensitätsverteilungen, wie sie beispielsweise in Abbildung 1.1 zu sehen sind. Man kann zeigen, dass die potentielle Energie von Atomen im elektrischen Feld in der Regel quadratisch vom elektrischen Feld abhängt. Das Potential, welches durch das Licht erzeugt wird, ist also direkt proportional zur Intensität I . Bezeichnet $\overline{\bullet}$ die Mittelung über verschiedene diffuse Scheiben, so besitzt die Intensität an einem Raumpunkt die Wahrscheinlichkeitsdichte [13, (2.16)]

$$P[I] = \frac{1}{\overline{I}} e^{-I/\overline{I}}, \quad I \geq 0. \quad (1.1)$$

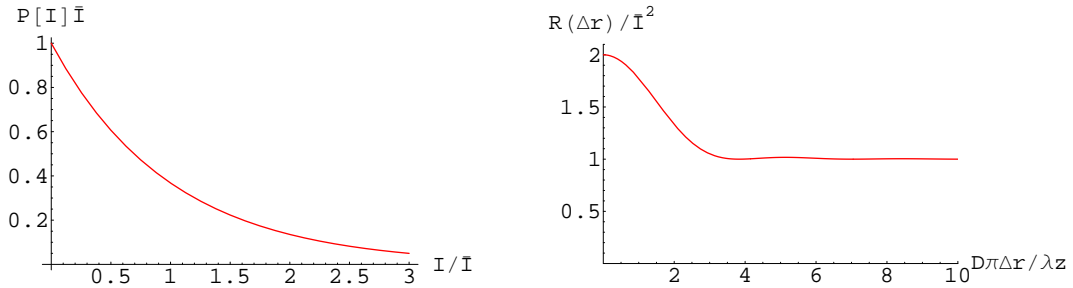


Abbildung 1.2: Links: Wahrscheinlichkeitsdichte (1.1) aufgetragen gegen die Intensität I/\bar{I} . Rechts: Korrelationsfunktion zweier Intensitäten (1.2) aufgetragen gegen $D\pi\Delta r/\lambda z$.

Hierbei wird der im Experiment betrachtete Teil des Speckle-Musters als so klein gewählt, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte (1.1) für alle Orte als identisch angenommen werden kann. Die räumliche Verteilung der Speckle wird durch die Korrelation der Intensität an zwei Orten beschrieben. Man nimmt an, dass ein kreisrunder Teil der diffusen Scheibe mit dem Durchmesser D ausgeleuchtet wird, da dies meist durch einen durch ein Linsensystem aufgeweiteten Laserstrahl erfolgt. Für diesen Fall erhält man die in Abbildung 1.2 dargestellte Korrelationsfunktion [13, (2.81)]

$$R(\Delta r) = \bar{I}^2 \left[1 + \frac{4J_1(D\pi\Delta r/\lambda z)^2}{(D\pi\Delta r/\lambda z)^2} \right] \quad (1.2)$$

mit dem Abstand Δr der betrachteten Orte in der Speckle-Ebene, dem Abstand z der Speckle-Ebene von der diffusen Scheibe und der Wellenlänge λ des Lichtes. Die Größe eines Speckles Δr entspricht dem Wert, bei dem die Bessel-Funktion in (1.2) die erste Nullstelle besitzt. Dies bedeutet, dass die Speckle für sichtbares Licht in der Regel einen Durchmesser von einigen Mikrometern besitzen. Der Einfluss der Laser-Speckle auf ein Quantengas lässt sich also durch ein zweidimensionales Zufallspotential modellieren, das eine Wahrscheinlichkeitsverteilung wie (1.1) sowie eine Korrelationsfunktion wie (1.2) besitzt, wobei jeweils die Intensität durch das Zufallspotential zu ersetzen ist. Analog ist es möglich, auch ein dreidimensionales Zufallspotential zu erzeugen, indem man zwei aus verschiedenen Richtungen kommende Speckle-Muster überlagert.

Eine experimentelle Realisierung findet sich beispielsweise in Florenz in der Gruppe von M. Inguscio. Wie in der linken Grafik von Abbildung 1.3 dargestellt, wird dort ein Laserstrahl der Wellenlänge $\lambda=822$ nm durch eine diffuse Scheibe geführt und anschließend in ein zuvor erzeugtes Bose-Einstein-Kondensat von ^{85}Rb Atomen reflektiert, das sich in einer anisotropen zigarrenförmigen harmonischen Falle befindet. Der Einschaltvorgang des Speckle-Potentiales soll dabei adiabatisch durchgeführt werden. Die Falle besitzt eine Ausdehnung von $11 \mu\text{m}$ in radialer und $110 \mu\text{m}$ in axialer Richtung, letztere ist horizontal und senkrecht zum einfallenden Laser-Licht ausgerichtet. Die Speckle besitzen eine Größe

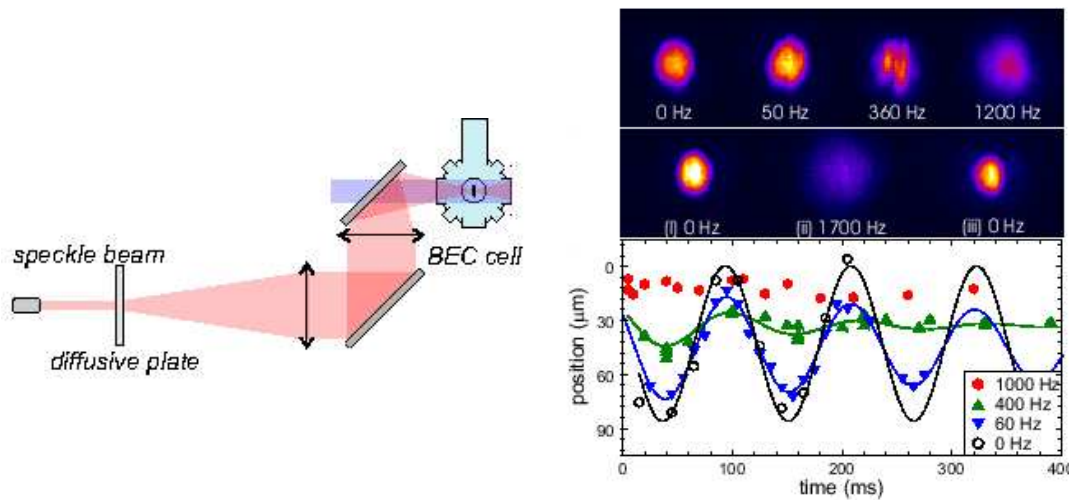


Abbildung 1.3: Links: Experimenteller Aufbau zur Messung des Einflusses von Laser-Speckle auf ein Bose-Einstein-Kondensat in der Arbeitsgruppe von M. Inguscio [12]. Rechts oben: Dichteprofile von Bose-Einstein-Kondensaten für verschiedene Speckle-Intensitäten nach einer Expansion von 28 ms. Rechts unten: Dipol-Oszillationen von Bose-Einstein-Kondensaten für verschieden starke Speckle-Intensitäten.

von ungefähr $10 \mu\text{m}$. Um den Einfluss des Zufallspotentials auf das Kondensat messen zu können, werden das Fallen- und das Zufallspotential abgeschaltet, die freigesetzten Atome expandieren abhängig vom Anfangszustand verschieden schnell. Nach 28 ms wird ein zweiter Laserstrahl durch das Kondensat gesandt, dessen Intensität anschließend ortsaufgelöst mithilfe einer CCD-Kamera gemessen wird. Dieses Absorptionsverfahren erlaubt einen Rückschluss auf die Teilchendichte in der Atomfalle, allerdings wird das Kondensat dabei zerstört. In der rechten oberen Grafik von Abbildung 1.3 sind solche Dichteprofile für verschiedene Stärken des durch die Speckle erzeugten Zufallspotentials dargestellt. Im Experiment von M. Inguscio wird diese Speckle-Intensität in Einheiten von Hz gemessen. Ohne Laser-Speckle wird ein für Bose-Einstein-Kondensate normales Absorptionssbild erzeugt, das in der Mitte ein ausgeprägtes Maximum aufweist. Bei einer Stärke von 50 Hz zeigt das Dichteprofil leichte Deformationen, während sich das Kondensat für 360 Hz in mehrere lokale Potentialminima zu verteilen scheint. Für 1200 Hz schließlich ist nur noch eine breite Verteilung zu sehen, die darauf schließen lässt, dass die Atome jetzt in lokalen Potentialminima eingeschlossen sind. In der mittleren rechten Grafik von Abbildung 1.3 sind zwei Absorptionssbilder für 0 Hz und 1700 Hz zu sehen. Das dritte Bild zeigt das Dichteprofil, nachdem das Zufallspotential von 0 Hz auf eine Stärke von 1700 Hz erhöht und anschließend adiabatisch wieder heruntergefahren wurde. In der Mitte der Aufnahme ist wieder deutlich das Maximum zu erkennen, dass die Existenz eines Bose-Einstein-Kondensates anzeigt. Hieraus schließt M. Inguscio, dass das Dichteprofil für 1200 Hz in der oberen rechten Grafik nicht durch Erhitzen der Atomwolke zustande kommt.

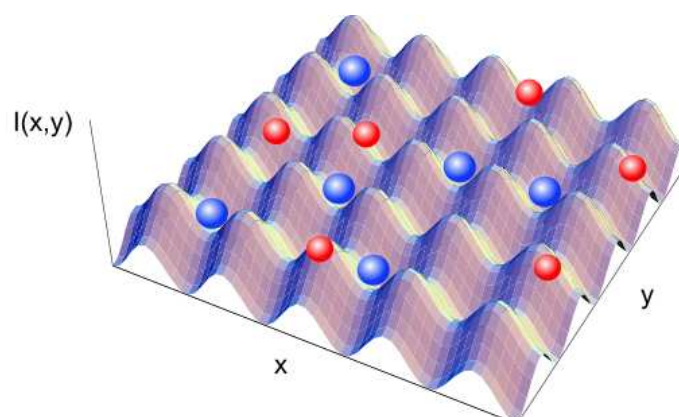


Abbildung 1.4: In einem zweidimensionalen optischen Gitter befinden sich zwei verschiedene Atomarten, die „blauen“ Atome sitzen in den Gittermulden, während sich die „roten“ frei bewegen können.

Die untere rechte Grafik von Abbildung 1.3 zeigt den Verlauf von Dipolschwingungen des Kondesates für verschiedene Stärken des Zufallspotentials, nachdem die Atomfalle entlang seiner Achse um $25 \mu\text{m}$ ausgelenkt wurde. Zu erkennen ist, dass die Schwingung mit größer werdendem Zufallspotential eine zunehmende Dämpfung erfährt. Ab 1000 Hz findet keine Schwingung mehr statt, alle Atome sind in lokalen Potentialminima gefangen.

Eine weitere Möglichkeit, Zufallspotentiale kontrolliert zu erzeugen, wurde von U. Gavish und Y. Castin vorgeschlagen [14]. Dabei werden zwei verschiedene Atomarten in einer Atomfalle platziert, die durch ein optisches Gitter überlagert wird. Ein optisches Gitter wird dadurch erzeugt, dass zwei gegenläufige Laserstrahlen gleicher Frequenz miteinander interferieren und eine stehende Welle ausbilden. Die Wellenlänge der Laserstrahlen und die Zustände der Atome werden so gewählt, dass eine der Atomarten in den einzelnen Atommulden des optischen Gitters gefangen ist, während die andere Atomart durch das optische Gitter nicht beeinflusst wird. Dies kann dadurch geschehen, dass sich die Atome in Zuständen befinden, deren Energie nicht oder kaum durch das elektrische Feld verändert wird, so dass sie sich frei bewegen können. Dies hat zur Folge, dass die fixierten Atome als feste Streuzentren für die beweglichen Atome dienen. Sind nur einige Mulden des Gitters durch Atome der fixierten Atomart besetzt, so kann deren Verteilung als zufällig angenommen werden. Wie in Abbildung 1.4 dargestellt, bewegen sich die freien Atome effektiv durch ein Zufallspotential, das durch die andere Atomart erzeugt wird.

Ein Experiment, das diesem Vorschlag nahe kommt, wurde von K. Sengstock und K. Bongs in Hamburg realisiert [15]. Ein verdünntes Gas, das größtenteils aus einer bosonischen Atomart besteht und mit einer geringeren Anzahl weiterer Atome einer fermionischen Atomart verunreinigt ist, wird in eine Atomfalle eingebracht und so weit abgekühlt, bis aus den Bosonen ein Bose-Einstein-Kondensat entsteht. Nachdem dieses

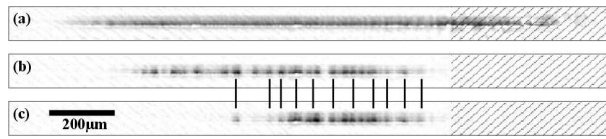


Abbildung 1.5: Dichteprofilaufnahmen für (a) ein noch nicht kondensiertes Gas von Bosonen, (b) und (c) ein Bose-Einstein-Kondensat ca. $5 \mu\text{m}$ über einem $100 \mu\text{m}$ breiten Draht in einem Atomchip aus der Gruppe von J. Schmiedmayer [18]. In (c) wurde das Fallenminimum etwas entlang des Drahtes verschoben.

Stadium erreicht ist, wird das optische Gitter aktiviert und so eingestellt, dass die Bosonen die Potentialbarrieren durchtunneln können und die Fermionen als Streuzentren fungieren. Der Unterschied zu Y. Castins Vorschlag besteht darin, dass auch die Bosonen durch das optische Gitter beeinflusst werden. Außerdem ist nicht klar, ob die Fermionen tatsächlich beim Einschaltvorgang in den Gittermulden fixiert werden oder sich noch bewegen können. Dies würde eine andere Unordnungsart erzeugen, als in der vorliegenden Arbeit behandelt wird, da sich die Streuzentren dann so anordnen, dass die Energie des Gesamtsystems minimiert wird.

Eine andere Situation, in der sich die zu Beginn bereits angesprochenen Unordnungseffekte durch Materialfehler bemerkbar machen, ist die Erzeugung von Bose-Einstein-Kondensaten in Atomchips. Atomchips bieten viele Möglichkeiten, Bose-Einstein-Kondensate in verschiedenen Geometrien zu fangen und zu manipulieren [16]. Anwendung finden Atomchips beispielweise in der Erstellung von Quantendots oder in der Quanteninformatik. Die Atomchips befinden sich im Inneren von Atomfallen ähnlich denen der zuvor vorgestellten Experimente. Nachdem die in die Atomfalle eingebrachten Bosonen mittels Laser- und evaporativer Kühlung stark genug abgekühlt wurden, werden sie in den Atomchip transferiert. Dort sind stromdurchflossene Leiter so plaziert, dass ein von außen angelegtes Magnetfeld zusammen mit den durch die Ströme entstehenden Feldern effektiv ein Potential erzeugt, das die Atome einfängt. Die Gruppen von C. Zimmermann und J. Schmiedmayer berichten von nicht vernachlässigbaren Oberflächeneffekten [17, 18]. Unebenheiten an den Oberflächen der Drähte in den Atomchips führen zu Fluktuationen im Magnetfeld, die durch Unordnung beschrieben werden können. In Abbildung 1.5 sind Dichteprofilaufnahmen von Atomgasen zu sehen, die über einem Draht in einem Magnetfeld gefangen sind. In Grafik (a) wird ein noch nicht kondensiertes bosonisches Quantengas gezeigt. In Grafik (b) hingegen sieht man ein Bose-Einstein-Kondensat in dem gleichen experimentellen Aufbau mit Dichteschwankungen entlang des Drahtes. Grafik (c) zeigt ebenfalls das Dichteprofil eines Bose-Einstein-Kondensates, bei dem das Fallenminimum etwas entlang des Drahtes verschoben wurde. Man erkennt im Vergleich, dass die Dichteschwankungen in (c) nicht mitverschoben werden und schließt daraus, dass diese durch lokale Magnetfeldveränderungen entstehen, die durch Unebenheiten des Drahtes verursacht werden.

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die Beschreibung von ungeordneten Bosonen. Hierbei wird ein ideales bosonisches Quantengas bei tiefen Temperaturen betrachtet, das sich in einer harmonischen Falle befindet und durch ein schwaches Zufallspotential gestört wird. Die Falle wird als isotrop angenommen, da dies einerseits die Rechnungen vereinfacht, andererseits aber auch den Vorteil besitzt, dass das Quantengas ohne Unordnung in einer isotropen Falle invariant unter einer Drehung um eine beliebige Achse ist. Diese Vereinfachung macht es möglich, prinzipiell auch den Einfluss der Unordnung auf die superfluide Dichte der Bosonen berechnen zu können. Untersucht wird der Effekt der Unordnung aber auf die kritische Temperatur, bei der die Bose-Einstein-Kondensation einsetzt. Das Zufallspotential wird als räumlich Gauß-korreliert angenommen, da dies eine gute Näherung für viele Arten von Unordnung wie zum Beispiel Laser-Speckles darstellt, siehe Abbildung 1.2. Berechnet wird neben der mittleren Verschiebung der kritischen Temperatur, die bereits zuvor in der Arbeit [19] behandelt wurde, auch die Standardabweichung. Das Ziel dieser Berechnung ist ein besseres Verständnis davon, wie der Einfluss der Unordnung zu charakterisieren ist. Die Berechnung der Standardabweichung macht es notwendig, die Verschiebung der kritischen Temperatur allgemein als ein Funktional des Zufallspotentials zu berechnen und die Unordnungsmittelung erst zum Schluss durchzuführen. Es stellt sich heraus, dass dies zu einem von der Literatur abweichenden Ergebnis für die Verschiebung der kritischen Temperatur führt. Zur Vereinfachung der Ergebnisse soll der Limes großer Teilchenzahlen betrachtet werden, eine Situation, die im Experiment in der Regel vorliegt. Man stellt fest, dass hierfür zunächst eine verbesserte semiklassische Näherung für Bosonen in einer harmonischen Falle hergeleitet werden muss, die es erlaubt, die Finite-Size-Korrekturen vollständig beschreiben zu können. Als Anwendungsbeispiele dieser Theorie werden die Finite-Size-Korrekturen der kritischen Temperatur, des Kondensatanteils und der Wärmekapazität für $D=3$ Dimensionen mithilfe dieser Theorie bis zu derjenigen niedrigsten Ordnung berechnet, die bisher nicht analytisch zugänglich war.

In Kapitel 2 werden zu Beginn in Abschnitt 2.1 einige thermodynamische Größen eines idealen Bose-Gases in einer harmonischen Falle exakt berechnet. In Abschnitt 2.2 wird das großkanonische Potential vorläufig durch ein sogenanntes effektives Potential genähert, das es erlaubt, die makroskopische Besetzung des Grundzustandes als Ordnungsparameter anzusehen. Außerdem wird die in diesem Rahmen berechnete Teilchenzahlgleichung semiklassisch genähert, um das Versagen dieser Theorie anhand unphysikalischer Divergenzen aufzuzeigen. In Abschnitt 2.3 wird das effektive Potential so korrigiert, dass keine Divergenzen mehr auftreten und in Abschnitt 2.4 wird schließlich eine angepasste semiklassische Näherung für das korrigierte effektive Potential eingeführt und auf die kritische Temperatur, den Kondensatanteil und die Wärmekapazität für $D=3$ Dimensionen angewandt. Anschließend wird ein semiklassisch genäherter Vielteilchen-Propagator eingeführt, der die beiden führenden Ordnungen der zuvor bestimmten Teilchenzahlgleichung reproduziert.

In Kapitel 3 wird zunächst in Abschnitt 3.1 die Theorie zur Unordnung vorgestellt. Danach wird in den Abschnitten 3.2 bis 3.5 das Bose-Gas durch ein effektives Potenti-

al beschrieben und die Unordnung störungstheoretisch behandelt. In Abschnitt 3.6 erhält man einen quantenmechanisch exakten Ausdruck für die Verschiebung der kritischen Temperatur als Funktional des Zufallspotentials für schwache Unordnung. Anschließend wird in Abschnitt 3.7 das Unordnungsmittel durchgeführt und die mittlere Verschiebung der kritischen Temperatur und die Standardabweichung zu diesem Mittelwert berechnet. Die Ergebnisse werden diskutiert und mit der Literatur verglichen.

Abschließend werden in Kapitel 4 die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf noch offene Fragestellungen gegeben.

Kapitel 2

Ideales Bose-Gas in harmonischer Falle

Ziel dieses Kapitels ist die Herleitung einiger Eigenschaften des idealen Bose-Gases in einer isotropen harmonischen Falle $V(\mathbf{x}) = M\omega^2\mathbf{x}^2/2$. Diese ist von besonderem Interesse, da die meisten experimentell realisierten Atomfallen durch ein harmonisches Potential angenähert werden können. Zwar sind diese Potentiale im Allgemeinen anisotrop, aber im Rahmen der in diesem Kapitel vorgestellten Theorien soll ein isotropes harmonisches Potential betrachtet werden, da diese Annahme zu starken Vereinfachungen führt. Prinzipiell müsste man zur statistischen Beschreibung solcher Bose-Gase das mikrokanonische Ensemble verwenden, da die Teilchen in der Atomfalle isoliert vorliegen und weder Energie noch Teilchen mit ihrer Umgebung austauschen können. Da es aber bisher nicht möglich ist, entsprechende mikrokanonische Rechnungen durchzuführen, weicht man auf das kanonische oder aber das großkanonische Ensemble aus und muss dabei in Kauf nehmen, einen systematischen Fehler zu machen [20]. Dieser Fehler verschwindet allerdings im thermodynamischen Limes unendlich vieler Bosonen, da hier alle drei Ensembletheorien die gleichen Ergebnisse liefern. In der vorliegenden Arbeit wird das großkanonische Ensemble verwendet, da dieses die effizientesten Möglichkeiten bietet, ein Vielteilchensystem zu beschreiben. Es werden im weiteren Verlauf die kritische Temperatur, unterhalb derer die Bose-Einstein-Kondensation eintritt und die Temperaturabhängigkeit der Besetzung des Grundzustandes sowie der Wärmekapazität berechnet. Dabei ist es möglich, mehrere Ansätze zu verfolgen, die in diesem Kapitel einzeln diskutiert und dann miteinander verglichen werden. Sie unterscheiden sich darin, wie der Grundzustand des Systems behandelt wird. Dieser spielt bei der Beschreibung eines bosonischen Quantengases eine besondere Rolle, da die Bosonen unterhalb einer kritischen Temperatur beginnen, diesen makroskopisch zu besetzen.

In Abschnitt 2.1 wird ein Ansatz ausgearbeitet, bei dem die Zustandssumme eines idealen bosonischen Quantengases so berechnet wird, dass der Grundzustand wie die anderen Zustände auch thermisch über einen Boltzmann-Faktor besetzt wird. Der Vorteil

dieser Theorie ist die Einfachheit ihrer Annahmen, von Nachteil ist allerdings, dass man in dieser Theorie eine kritische Temperatur nicht dadurch definieren kann, dass bei dieser die makroskopische Besetzung des Grundzustandes gerade verschwindet. Außerdem können die erlangten Ergebnisse nur numerisch ausgewertet werden, da die thermodynamischen Relationen bei fester Teilchenzahl sowohl eine explizite Abhängigkeit von der Temperatur als auch eine implizite Abhängigkeit von der Temperatur durch das chemische Potential μ besitzen. Dies macht es nötig, immer zuerst das chemische Potential aus der Teilchenzahlgleichung für eine bestimmte Temperatur zu bestimmen. Somit können der Kondensatanteil, also der Anteil der Teilchen, die in den Grundzustand kondensiert sind, die kritische Temperatur sowie die Wärmekapazität nur auf numerischem Wege berechnet werden.

Der zweite Ansatz, der in Abschnitt 2.2 ausgearbeitet wird, beruht auf dem feldtheoretischen Konzept des effektiven Potentials und berücksichtigt das Bose-Einstein-Kondensat gesondert. Zunächst wird das effektive Potential vorläufig auf bekannte Weise berechnet, indem alle möglichen Fluktuationen der Schrödinger-Felder aufsummiert werden und der Grundzustand mit dem Ensemblemittelwert der Felder identifiziert wird. Anschließend wird gezeigt, dass dieses effektive Potential auf Divergenzen am kritischen Punkt führt, die dadurch vermieden werden können, dass bei der Berechnung des effektiven Potentials berücksichtigt wird, dass der Feldmittelwert senkrecht auf den Fluktuationen steht. Die Theorie des effektiven Potentials hat den Vorteil, dass der Kondensatanteil als Ordnungsparameter betrachtet werden kann, da die makroskopische Besetzung des Grundzustandes erst unterhalb einer kritischen Temperatur von null verschieden ist. Deshalb bezeichnen wir diesen Ansatz als Theorie mit Ordnungsparameter, während der zuvor beschriebene erste Ansatz hingegen eine Theorie ohne Ordnungsparameter darstellt. Eine weitere wichtige Eigenschaft des zweiten Ansatzes besteht darin, dass das chemische Potential für Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur T_c auf die Grundzustandsenergie festgelegt ist. Deshalb besitzen die thermodynamischen Größen bei fester Teilchenzahl für diesen Temperaturbereich nur eine explizite Temperaturabhängigkeit. Diese Ergebnisse lassen sich mithilfe einer sogenannten semiklassischen Näherung auswerten, die für große Teilchenzahlen bzw. hohe Temperaturen gute analytische Näherungen an die exakten Werte liefert. Die Resultate der Näherungen lassen sich in verschiedene Ordnungen bezüglich der jeweiligen Potenz der Teilchenzahl anordnen. Die führende Ordnung bleibt im thermodynamischen Limes bestehen, während die restlichen Ordnungen verschwinden. Bei dem vorläufigen effektiven Potential treten in dieser systematischen Entwicklung allerdings immer Terme auf, die am kritischen Punkt divergieren. Dies liegt daran, dass der Grundzustand in diesem sowohl im Ensemblemittelwert als auch in den Fluktuationen der Schrödinger-Felder berücksichtigt wird, und veranschaulicht, dass bei der Berechnung des effektiven Potentials der Mittelwert senkrecht auf den Fluktuationen stehen muss.

In Abschnitt 2.3 wird das effektive Potential korrekt berechnet, indem die Fluktuationen der Schrödinger-Felder im Grundzustand nicht berücksichtigt werden. Dieser Ansatz erlaubt es im Prinzip, systematisch alle Ordnungen der semiklassischen Näherung für

thermodynamisch relevante Größen zu berechnen. Wir zeigen anhand des Kondensatanteils, der kritischen Temperatur und der Wärmekapazität, wie sie sich in semiklassischer Näherung bis zu der Ordnung berechnen lassen, die zuvor mit dem vorläufigen effektiven Potential nicht zugänglich war.

2.1 Theorie ohne Ordnungsparameter

Man berechnet zunächst das großkanonische Potential des idealen bosonischen Quantengases exakt, ohne den Grundzustand gesondert zu behandeln und leitet aus diesem dann die Teilchenzahlgleichung und die Wärmekapazität her. Von Nachteil ist dabei, dass diese Ergebnisse nur auf numerischem Wege berechenbar sind.

2.1.1 Großkanonisches Potential

Der allgemeine Ausdruck der großkanonischen Zustandssumme lautet [21, (2.7.33)]

$$Z = \text{Sp} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right) = \sum_{\nu} e^{-\beta(E_{\nu} - \mu N_{\nu})}, \quad (2.1)$$

wobei \hat{H} und \hat{N} den Hamiltonoperator und den Teilchenzahloperator des Systems sowie E_{ν} und N_{ν} die Energie und die Teilchenzahl zum Mikrozustand ν beschreiben. Außerdem gilt $\beta = 1/k_B T$. Dabei nummeriert ν die verschiedenen Zustände, die sich durch die Besetzungszahlen der Einteilchenzustände ausdrücken als $\nu = \{n_1, n_2, \dots\} = \{n_{\mathbf{n}}\}$. Da wir zunächst ein System ohne Wechselwirkung betrachten wollen, gilt

$$N_{\nu} = \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n}}, \quad E_{\nu} = \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}}. \quad (2.2)$$

Hierbei bezeichnen die $E_{\mathbf{n}}$ die Energieeigenwerte der Einteilchenzustände. In dieser Besetzungszahldarstellung erhält man für die Zustandssumme

$$Z = \prod_{\mathbf{n}} \sum_{n_{\mathbf{n}}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)n_{\mathbf{n}}} \quad (2.3)$$

mit $n_{\mathbf{n}} = 0, 1, \dots, \infty$. Unter der Bedingung, dass das chemische Potential μ stets kleiner bleibt als der niedrigste Energieeigenwert E_0 , das heisst

$$\mu < E_{\mathbf{n}} \quad \text{für alle } \mathbf{n}, \quad (2.4)$$

lässt sich die geometrische Reihe in (2.3) ausführen und man erhält

$$Z = \prod_{\mathbf{n}} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}}. \quad (2.5)$$

Diese Zustandssumme ist eine statistische Größe, aus der man gemäß

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \log Z$$

das dazugehörige großkanonische Potential berechnen kann:

$$\Omega = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \log [1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}] . \quad (2.6)$$

2.1.2 Teilchenzahlgleichung

Das großkanonische Potential ist in der Thermodynamik der Ausgangspunkt, um weitere thermodynamisch relevante Größen zu berechnen. Hierzu ist es notwendig, sich an die Grundrelation der Thermodynamik für reversible Prozesse zu erinnern, bei der das Differential der inneren Energie U eingeführt wird [21, (3.6.1)]:

$$dU = TdS - pdV + \mu dN . \quad (2.7)$$

Dieses geht durch die doppelte Legendre-Transformation

$$\Omega = U - TS - \mu N \quad (2.8)$$

über in das Differential des großkanonischen Potentials Ω :

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu . \quad (2.9)$$

Aus dieser Relation erhält man unmittelbar die thermodynamischen Identitäten

$$S = -\left. \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right|_{V, \mu}, \quad p = -\left. \frac{\partial \Omega}{\partial V} \right|_{T, \mu}, \quad N = -\left. \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right|_{T, V} . \quad (2.10)$$

Für die Teilchenzahl folgt dann mit (2.6) und (2.10) entsprechend

$$N = \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)} - 1} . \quad (2.11)$$

Dabei wird in der Teilchenzahlgleichung über die sogenannten Bose-Einstein-Verteilungen summiert, welche die Wahrscheinlichkeit der Besetzung eines Zustandes mit den Quantenzahlen

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ \vdots \\ n_D \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

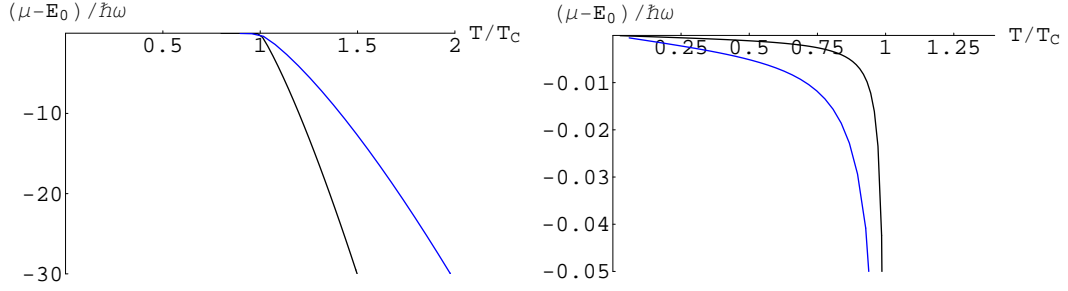


Abbildung 2.1: Renormiertes chemisches Potential $(\mu - E_0)/\hbar\omega$ aufgetragen gegen T/T_c für $N=10^3$ Teilchen (blaue Kurve) bzw. $N=10^4$ (schwarze Kurve) für die Fallenfrequenz $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz.

angeben. Im nächsten Schritt spezialisieren wir das großkanonische Potential und die Teilchenzahl auf die harmonische Falle. Dazu verwendet man die Reihenentwicklung des Logarithmus in (2.6) bzw. die geometrische Reihe in (2.11) und setzt die Eigenwerte $E_{\mathbf{n}} = \hbar\omega(n_1 + \dots + n_D + D/2)$ des harmonischen Oszillators in D Dimensionen in (2.6) ein. Danach können die Summen über die Quantenzahlen ausgeführt werden, die sich mit Hilfe der geometrischen Reihe vereinfachen lassen. Man erhält

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu - E_0)k}}{k} \frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^D}, \quad (2.13)$$

$$N = \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu - E_0)k} \frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^D} \quad (2.14)$$

mit der Grundzustandsenergie $E_0 = D\hbar\omega/2$. Die Teilchenzahl N ist eine Funktion der Temperatur sowie des chemischen Potentials. Deshalb ist es möglich, durch numerische Auswertung von (2.14) das chemische Potential μ als Funktion von T und N zu erhalten. In Abbildung 2.1 kann man feststellen, dass das chemische Potential gemäß (2.4) für alle Temperaturen kleiner als die Grundzustandsenergie bleibt und für $T \downarrow 0$ gegen null strebt. Die in der Abbildung verwendete kritische Temperatur T_c charakterisiert die Entstehung eines Bose-Einstein-Kondensates und wird im nächsten Abschnitt definiert. Man erkennt außerdem in Abbildung 2.1, dass das dimensionslose chemische Potential $(\mu - E_0)/\hbar\omega$ bei steigender Teilchenzahl N im Bereich $T \leq T_c$ kleiner wird, während es für $T > T_c$ gegen größere negative Werte strebt.

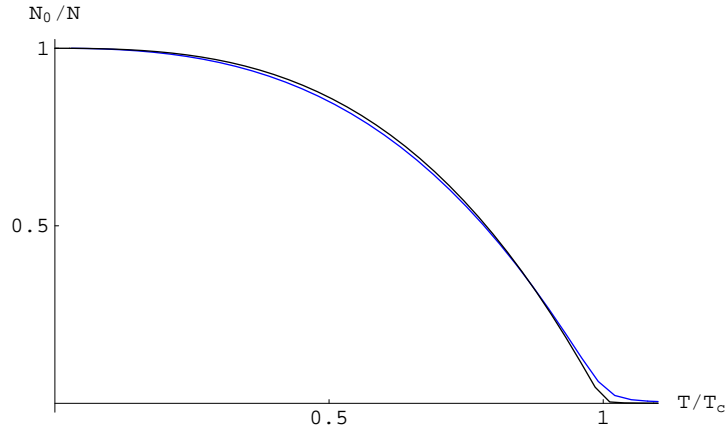


Abbildung 2.2: Kondensatanteil N_0/N aufgetragen gegen T/T_c für $N = 10^3$ Teilchen (blaue Kurve) bzw. $N = 10^4$ (schwarze Kurve) für die Fallenfrequenz $\omega = 2\pi \cdot 40$ Hz. Die kritischen Temperaturen betragen $T_c = 16,65$ nK für $N = 10^3$ Teilchen und $T_c = 37,55$ nK für $N = 10^4$.

2.1.3 Besetzung des Grundzustandes

Im Hinblick auf die Bose-Einstein-Kondensation ist die Besetzung des Grundzustandes von besonderem Interesse. Dazu betrachtet man in (2.11) den Beitrag des Grundzustandes

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(E_0 - \mu)} - 1} \quad (2.15)$$

zur Gesamtteilchenzahl. Hierbei ist (2.15) dadurch numerisch auszuwerten, dass man die aus (2.14) bestimmte Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials einsetzt. Es zeigt sich dabei, dass man bei stetiger Verringerung der Temperatur ab einem bestimmten Wert eine plötzliche Vergrößerung des Kondensatanteils erhält. Diesem Übergang soll im Folgenden eine kritische Temperatur T_c zugeordnet werden. Hierzu sucht man sich diejenige Temperatur T , bei der die Funktion (2.15) in Abhängigkeit von T die größte Krümmung aufweist. Wie man an Abbildung 2.2 erkennen kann, nimmt die Krümmung an T_c mit steigender Teilchenzahl zu. Dies führt dazu, dass der Kondensatanteil bei $T = T_c$ mit steigender Teilchenzahl gegen null strebt. Für $T \downarrow 0$ hingegen gehen immer mehr Teilchen in den Grundzustand über, so dass am absoluten Nullpunkt alle Teilchen in das Kondensat übergegangen sind.

2.1.4 Wärmekapazität

In diesem Abschnitt wird die Wärmekapazität C_V des idealen Bose-Gases in einer harmonischen Falle für $D=3$ Dimensionen berechnet. Die Wärmekapazität erhält man über

die Beziehung [21, (3.2.2a)]

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{V,N}. \quad (2.16)$$

Die innere Energie U muss dazu noch aus dem großkanonischen Potential mittels der doppelten Legendre-Transformation (2.8) gewonnen werden. Zur weiteren numerischen Auswertung von (2.16) ist es aber günstig, das großkanonische Potential (2.13) in eine andere Darstellung zu überführen. Hierzu leitet man die Identität der geometrischen Reihe

$$\sum_{m=0}^{\infty} z^m = \frac{1}{1-z} \quad (2.17)$$

zweimal bezüglich des Argumentes z ab und erhält

$$\frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)z^m = \frac{1}{(1-z)^3}. \quad (2.18)$$

Dieses Ergebnis ermöglicht es nun, das großkanonische Potential (2.13) in $D=3$ Dimensionen umzuschreiben zu

$$\Omega = -\frac{1}{2\beta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu-E_0)k}}{k} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2) e^{-m\hbar\omega\beta k}. \quad (2.19)$$

Verwendet man die Darstellung der polylogarithmischen Funktion

$$\zeta_{\nu}(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^{\nu}}, \quad (2.20)$$

so reduziert sich (2.19) auf [20]

$$\Omega = -\frac{1}{2\beta} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2) \zeta_1(e^{\beta(\mu-E_0-m\hbar\omega)}). \quad (2.21)$$

Diese Form des großkanonischen Potentials wird nun verwendet, um die Wärmekapazität C_V zu berechnen. Für die Entropie und die Teilchenzahl erhält man gemäß (2.10) zunächst

$$S = -\frac{k_B}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2) \left[\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega) \zeta_0(e^{\beta(\mu-E_0-m\hbar\omega)}) - \zeta_1(e^{\beta(\mu-E_0-m\hbar\omega)}) \right], \quad (2.22)$$

$$N = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2) \zeta_0(e^{\beta(\mu-E_0-m\hbar\omega)}). \quad (2.23)$$

Nach Einsetzen von (2.19), (2.22) und (2.23) in (2.8) ergibt sich dann die innere Energie U zu

$$U = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)(E_0 + m\hbar\omega) \zeta_0(e^{\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega)}) . \quad (2.24)$$

Für die Wärmekapazität (2.16) folgt dann zunächst

$$\begin{aligned} C_V &= -\frac{\beta}{2T} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)(\mu - E_0 - m\hbar\omega)(E_0 + m\hbar\omega) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega)}) \\ &\quad + \frac{\beta}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2)(E_0 + m\hbar\omega) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega)}) \left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_{V,N} . \end{aligned} \quad (2.25)$$

Die dabei auftretende innere Ableitung entnimmt man der Teilchenzahlgleichung (2.23), indem man diese bei festem N nach T differenziert,

$$\begin{aligned} 0 = \left. \frac{\partial N}{\partial T} \right|_{V,N} &= \frac{\beta}{2} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)(m+2) \left[-\frac{1}{T}(\mu - E_0 - m\hbar\omega) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega)}) \right. \\ &\quad \left. + \left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_{V,N} \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega)}) \right] . \end{aligned} \quad (2.26)$$

Hieraus erhält man

$$\left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_{V,N} = \frac{1}{T} \frac{\sum_{m'=0}^{\infty} (m'+1)(m'+2)(\mu - E_0 - m'\hbar\omega) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m'\hbar\omega)})}{\sum_{m''=0}^{\infty} (m''+1)(m''+2) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m''\hbar\omega)})} . \quad (2.27)$$

Setzt man dieses Ergebnis in (2.25) ein, so folgt schließlich für die Wärmekapazität

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{k_B(\hbar\omega\beta)^2}{2} \sum_{m=0}^{\infty} m(m+1)(m+2) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m\hbar\omega)}) \\ &\quad \times \left[m - \frac{\sum_{m'=0}^{\infty} m'(m'+1)(m'+2) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m'\hbar\omega)})}{\sum_{m''=0}^{\infty} (m''+1)(m''+2) \zeta_{-1}(e^{\beta(\mu - E_0 - m''\hbar\omega)})} \right] . \end{aligned} \quad (2.28)$$

Man kann anhand von Abbildung 2.3 erkennen, dass sich die Wärmekapazität an der kritischen Temperatur stark vergrößert und dabei stetig bleibt. Für $T \downarrow 0$ läuft die Wärmekapazität gegen null, wie man aufgrund des dritten Hauptsatzes der Thermodynamik erwarten würde [21, (A.5)]. Als Vergleich ist das Gesetz von Dulong-Petit eingezeichnet,

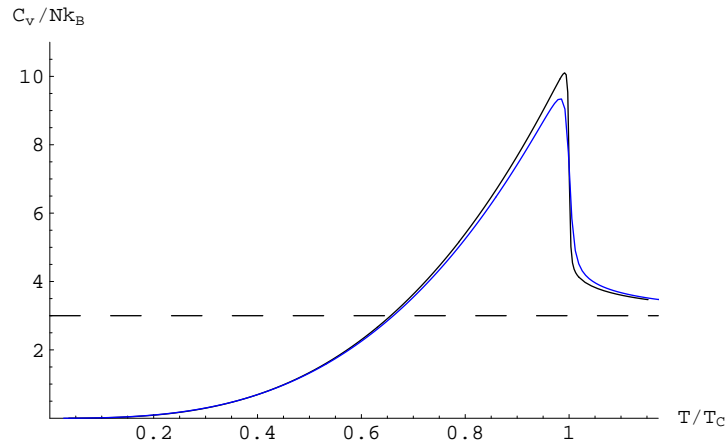


Abbildung 2.3: Wärmekapazität (2.28) aufgetragen gegen T/T_c für $N=10^4$ (blaue Kurve) bzw. $N=10^5$ (schwarze Kurve) für die Fallenfrequenz $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz. Die gestrichelte Linie entspricht dem Gesetz von Dulong-Petit für N dreidimensionale harmonische Oszillatoren. Die kritischen Temperaturen lauten $T_c = 37,55$ nK für $N=10^4$ und $T_c = 82,45$ nK für $N=10^5$.

das man aufgrund einer klassischen Betrachtung im Hochtemperaturlimes $T\rightarrow\infty$ erwarten würde. Außerdem kann man der Abbildung entnehmen, dass die Wärmekapazität unterhalb von T_c mit steigender Teilchenzahl anwächst, während sie oberhalb von T_c mit zunehmender Teilchenzahl abfällt. Auffällig ist auch, dass die Steigung der Wärmekapazität mit steigender Teilchenzahl am Sprung zunimmt und dass der Schnittpunkt beider Kurven bei $T=T_c$ zu finden ist. Das jeweilige Maximum liegt bei beiden Kurven jedoch bei einer Temperatur $T<T_c$.

2.2 Theorie mit Ordnungsparameter

Das nun folgende Modell für das Bose-Gas verfolgt einen anderen Ansatz und wird es möglich machen, analytische Näherungen für thermodynamische Größen zu gewinnen. Zunächst definiert man vorläufig das effektive Potential über ein Funktionalintegral, bei dem über alle möglichen bosonischen Schrödinger-Felder (kurz: Bose-Felder) aufsummiert wird und das Bose-Einstein-Kondensat als deren Ensemblemittelwert definiert wird. Hierbei treten Probleme auf, die durch ein darauf folgendes korrigiertes effektives Potential vermieden werden. Um den Ansatz des effektiven Potentials zu motivieren, wird zuerst die Quantenstatistik eines Teilchens behandelt, das an ein äußeres Wärmebad angekoppelt ist.

2.2.1 Kanonische Zustandssumme für ein Teilchen

Zunächst beginnt man mit der Betrachtung der quantenmechanischen Zeitentwicklungsamplitude $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ eines Teilchens, das sich vom Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}_a, t_a) zum Raum-Zeit-Punkt (\mathbf{x}_b, t_b) bewegt. Diese Zeitentwicklungsamplitude genügt dem Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_b} \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle &= \hat{H}_E(\mathbf{x}_b) \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle \\ \lim_{t_b \rightarrow t_a} \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle &= \delta(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a), \end{aligned} \quad (2.29)$$

wobei \hat{H}_E den Hamiltonoperator eines einzelnen Teilchens bezeichnet, dessen Eigenwertproblem

$$\hat{H}_E(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{n}}\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \quad (2.30)$$

lautet. Die Zeitentwicklungsamplitude ist invariant unter einer gemeinsamen Zeittranslation

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b + t_0 | \mathbf{x}_a, t_a + t_0 \rangle = \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle, \quad (2.31)$$

woraus unmittelbar

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \langle \mathbf{x}_b, t_b - t_a | \mathbf{x}_a, 0 \rangle \quad (2.32)$$

folgt. Außerdem wird in diesem Fall das Anfangswertproblem gelöst durch

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \langle \mathbf{x}_b | e^{-i\hat{H}_E(t_b-t_a)/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (2.33)$$

Formt man diese Darstellung noch mittels der Vollständigkeitsrelation der Energieeigenzustände $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ um, so führt dies auf die Spektraldarstellung der Zeitentwicklungsamplitude

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_b) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_a) e^{-iE_{\mathbf{n}}(t_b-t_a)/\hbar}. \quad (2.34)$$

Eine wichtige andere Darstellung der Zeitentwicklungsamplitude ist die Pfadintegraldarstellung. Dabei erhält man die Amplitude $\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle$ durch Aufsummieren aller möglichen Wege vom ersten zum zweiten Raum-Zeit-Punkt:

$$\langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle = \int_{\mathbf{x}(t_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(t_b)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}\mathbf{x} e^{i\mathcal{A}[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (2.35)$$

Integriert wird dabei über eine oszillierende Exponentialfunktion, welche die klassische Wirkung

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t) - V(\mathbf{x}(t)) \right\} \quad (2.36)$$

im Argument beinhaltet. Mit diesen Vorbereitungen ist es möglich, nun die Einteilchen-Zustandssumme

$$Z_E = \text{Sp} \left(e^{-\beta \hat{H}_E} \right) \quad (2.37)$$

zu berechnen. Hierzu ist die Spur in der Basis der Ortseigenzustände auszuwerten:

$$Z_E = \int d^D x \langle \mathbf{x} | e^{-\beta \hat{H}_E} | \mathbf{x} \rangle. \quad (2.38)$$

Diese Gleichung lässt sich mithilfe von (2.33) umschreiben zu

$$Z_E = \int d^D x \langle \mathbf{x}, -i\hbar\beta | \mathbf{x}, 0 \rangle. \quad (2.39)$$

Die Überführung der Zeit zu einer imaginären Zeit $t_b - t_a = -i\hbar\beta$ wird als Wick-Rotation bezeichnet. Man definiert dazu die Imaginärzeitentwicklungsamplitude

$$\langle \mathbf{x}_b, \hbar\beta | \mathbf{x}_a, 0 \rangle_e = \langle \mathbf{x}_b, t_b | \mathbf{x}_a, t_a \rangle \Big|_{t_a=0}^{t_b=-i\hbar\beta}, \quad (2.40)$$

wobei der Index e im Folgenden weggelassen wird. Die klassische Wirkung wird unter der Transformation $\tau = it$ zu $\mathcal{A}[\mathbf{x}] = i\mathcal{A}_e[\mathbf{x}]$, wobei

$$\mathcal{A}_e[\mathbf{x}] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left\{ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V(\mathbf{x}(\tau)) \right\}, \quad (2.41)$$

die sogenannte euklidische Wirkung bezeichnet. Setzt man (2.35), (2.40) und (2.41) in (2.39) ein, so erhält man für die Einteilchen-Zustandssumme

$$Z_E = \int d^D x \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\hbar\beta)=\mathbf{x}} \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-\mathcal{A}_e[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (2.42)$$

Die Integration in (2.42) ergibt insgesamt eine Integration über alle in der Imaginärzeit periodischen Pfade $\mathbf{x}(\tau)$ mit der Bedingung $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\hbar\beta)$, was durch die Notation

$$Z_E = \oint \mathcal{D}\mathbf{x} e^{-\mathcal{A}_e[\mathbf{x}]/\hbar} \quad (2.43)$$

zum Ausdruck gebracht wird.

2.2.2 Funktionalintegral für großkanonische Zustandssumme

In diesem Abschnitt wird die großkanonische Zustandssumme Z über ein Funktionalintegral definiert. Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, dass man die Einteilchenzustandssumme (2.43) erhält, indem man Exponentialfunktionen mit der euklidischen

Wirkung (2.41) als Argument über alle möglichen Pfade aufsummiert. Dieses Ergebnis verallgemeinert man und definiert die großkanonische Zustandssumme zu [22]

$$Z = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}_e[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (2.44)$$

Das Integral beschreibt ein Funktionalintegral über alle möglichen bosonischen Schrödinger-Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi(\mathbf{x}, \tau)$, die periodisch in der Imaginärzeit sind. Was genau das bedeutet, wird später noch festgelegt werden müssen. Zur Herleitung der Periodizität betrachtet man den Mittelwert des Feldoperators $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ [23]:

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right). \quad (2.45)$$

Diesen Heisenberg-Operator kann man über die Beziehung

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) = e^{i(\hat{H} - \mu\hat{N})t/\hbar} \hat{\psi}(\mathbf{x}, 0) e^{-i(\hat{H} - \mu\hat{N})t/\hbar} \quad (2.46)$$

aus dem dazugehörigen Schrödinger-Operator gewinnen. Benutzt wurde hierbei der für das großkanonische Ensemble modifizierte Hamilton-Operator $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$. Setzt man die Beziehung (2.46) in den Mittelwert des Feldoperators (2.45) ein, so erhält man

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{i(\hat{H} - \mu\hat{N})t/\hbar} \hat{\psi}(\mathbf{x}, 0) e^{-i(\hat{H} - \mu\hat{N})t/\hbar} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right), \quad (2.47)$$

was sich wie folgt umschreiben lässt:

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} e^{i(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)/\hbar} \hat{\psi}(\mathbf{x}, 0) e^{-i(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)/\hbar} \right). \quad (2.48)$$

Außerdem kann man ausnutzen, dass man die Operatoren innerhalb der Spur zyklisch vertauschen kann:

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{i(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)/\hbar} \hat{\psi}(\mathbf{x}, 0) e^{-i(\hat{H} - \mu\hat{N})(t - i\hbar\beta)/\hbar} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right). \quad (2.49)$$

Aus diesem Ergebnis folgt mit (2.46) wiederum

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(\hat{\psi}(\mathbf{x}, t - i\hbar\beta) e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right) = \langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, t - i\hbar\beta) \rangle. \quad (2.50)$$

Führt man an dieser Gleichung eine Wick-Rotation $t = -i\tau$ durch, so ergibt sich

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \langle \hat{\psi}(\mathbf{x}, \tau + \hbar\beta) \rangle, \quad (2.51)$$

woraus folgt, dass die Bosefelder $\psi(\mathbf{x}, \tau)$, $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$ periodisch in der Imaginärzeit sind.

Um zu bestimmen, welche euklidische Wirkung hier zu verwenden ist, wendet man sich der klassischen Feldtheorie der nichtrelativistischen Quantenmechanik für Bosonen zu. Man betrachtet die Schrödinger-Felder $\psi(\mathbf{x}, t)$ und $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ als unabhängige Felder und leitet aus deren Bewegungsgleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.52a)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (2.52b)$$

das zugrunde liegende Variationsverfahren ab. Zunächst multipliziert man (2.52a) mit der Variation $\delta\psi^*(\mathbf{x}, t)$, (2.52b) mit $\delta\psi(\mathbf{x}, t)$ und addiert beide Gleichungen. Anschließend führt man eine Integration über Raum und Zeit aus und erhält

$$0 = \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^D x \left[i\hbar \left(\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \delta\psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) \right) \right. \\ \left. + \frac{\hbar^2}{2M} \left(\delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \Delta \psi(\mathbf{x}, t) + \delta\psi(\mathbf{x}, t) \Delta \psi^*(\mathbf{x}, t) \right) - V(\mathbf{x}) \delta \left(\psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \right) \right]. \quad (2.53)$$

Der zweite Term mit zeitlicher Ableitung wird einmal partiell integriert, danach werden Variation und partielle Ableitung des Feldes vertauscht. Die Randterme, die durch die partielle Integration entstehen, fallen weg, da die Variationen an den Integrationsgrenzen verschwinden sollen. Auf gleiche Weise verfährt man mit dem zweiten Term, der eine räumliche Ableitung besitzt. Bei diesem wird der Laplace-Operator durch zweifache partielle Integration auf die Variation des Feldes übertragen. Dadurch wird (2.53) zu

$$0 = \delta \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.54)$$

Das so erhaltene Variationsverfahren der Form

$$\delta \mathcal{A}[\psi^*, \psi] = 0 \quad (2.55)$$

stellt das Hamiltonsche Prinzip in der Lagrangeschen Formulierung der klassischen Feldtheorie dar. Die Wirkung lautet entsprechend

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_{t_a}^{t_b} dt \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta - V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.56)$$

Als nächstes transformiert man die Wirkung durch eine Wick-Rotation zur Imaginärzeit und erhält die euklidische Wirkung

$$\tilde{\mathcal{A}}_e[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}_E(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.57)$$

Außerdem soll die Teilchenzahl N durch Einführung des chemischen Potentials μ fixiert werden. Man zieht also in (2.57) das chemische Potential μ multipliziert mit der mittleren Teilchenzahl ab:

$$\mathcal{A}_e[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}_E(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.58)$$

Dies ist die gesuchte euklidische Wirkung für die großkanonische Zustandssumme. Eine andere wichtige Darstellung von (2.58) lautet

$$\mathcal{A}_e[\psi^*, \psi] = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \psi^*(\mathbf{x}, \tau) G_0^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \psi(\mathbf{x}', \tau') \quad (2.59)$$

mit dem Integralkern

$$G_0^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{\hbar} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau') \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau'} + \hat{H}_E(\mathbf{x}') - \mu \right\}. \quad (2.60)$$

Wichtig ist außerdem, auf die Zeitordnung im Funktionalintegral zu achten, d. h. dass bei gleichen Zeiten im Funktionalintegral die Zeit im Feld $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$ immer um eine infinitesimale Größe η gegenüber der Zeit im Feld $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ erhöht werden muss, um Probleme mit der Gleichzeitigkeit zu umgehen [23].

2.2.3 Definition des Effektiven Potentials

Man definiert ein sogenanntes effektives Potential, welches die Teilchen im Grundzustand und die angeregten Teilchen getrennt behandelt. Zuerst führt man an die Felder gekoppelte Ströme j^*, j in die euklidische Wirkung ein:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j] = \mathcal{A}_e[\psi^*, \psi] - \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \{ \psi^*(\mathbf{x}, \tau) j(\mathbf{x}, \tau) + \psi(\mathbf{x}, \tau) j^*(\mathbf{x}, \tau) \}. \quad (2.61)$$

Die resultierende Zustandssumme lautet

$$Z[j^*, j] = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j]/\hbar} = e^{-\beta\Omega[j^*, j]} \quad (2.62)$$

und wird als erzeugendes Funktional bezeichnet. An dieser Stelle ist es wichtig anzumerken, dass die Ströme am Ende der Rechnung wieder gleich null gesetzt werden müssen, da man nur dann physikalisch sinnvolle Aussagen erhält. Der Ensemblemittelwert über ein Feld $\psi(\mathbf{x}, \tau), \psi^*(\mathbf{x}, \tau)$ soll später mit dem Bose-Einstein-Kondensat identifiziert werden. Daher definiert man

$$\langle \psi(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \frac{1}{Z[j^*, j]} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi(\mathbf{x}, \tau) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j]/\hbar} = \Psi[j^*, j](\mathbf{x}, \tau), \quad (2.63a)$$

$$\langle \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \rangle = \frac{1}{Z[j^*, j]} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi^*(\mathbf{x}, \tau) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j]/\hbar} = \Psi^*[j^*, j](\mathbf{x}, \tau). \quad (2.63b)$$

Außerdem kann man die Mittelwerte auch durch Funktionalableitungen nach den Strömen darstellen

$$\Psi[j^*, j](\mathbf{x}, \tau) = \frac{\hbar}{Z[j^*, j]} \frac{\delta Z[j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}, \tau)} = -\hbar\beta \frac{\delta \Omega[j^*, j]}{\delta j^*(\mathbf{x}, \tau)}, \quad (2.64a)$$

$$\Psi^*[j^*, j](\mathbf{x}, \tau) = \frac{\hbar}{Z[j^*, j]} \frac{\delta Z[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}, \tau)} = -\hbar\beta \frac{\delta \Omega[j^*, j]}{\delta j(\mathbf{x}, \tau)}. \quad (2.64b)$$

Man fasst die Mittelwerte als neue Variablen auf und führt eine Legendre-Transformation von den künstlichen Stömen j^*, j zu den physikalisch interpretierbaren Ensemblemittelwerten Ψ^*, Ψ durch. Das effektive Potential $\Gamma[\Psi^*, \Psi]$ wird definiert als

$$\begin{aligned} \Gamma[\Psi^*, \Psi] &= \Omega[j^*[\Psi^*, \Psi], j[\Psi^*, \Psi]] \\ &+ \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \{ \Psi^*(\mathbf{x}', \tau') j[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}', \tau') + \Psi(\mathbf{x}', \tau') j^*[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}', \tau') \}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Eine Funktionalableitung des effektiven Potentials nach den Mittelwerten $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau), \Psi(\mathbf{x}, \tau)$ führt auf die Legendre-Identitäten

$$\frac{\delta \Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta \Psi(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\hbar\beta} j^*(\mathbf{x}, \tau), \quad \frac{\delta \Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta \Psi^*(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{1}{\hbar\beta} j(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.66)$$

Setzt man $j = j^* = 0$, so sieht man an (2.65), dass das effektive Potential in das großkanonische Potential übergeht:

$$\Omega = \Gamma[\Psi_e^*, \Psi_e]. \quad (2.67)$$

Hierbei bezeichnen Ψ_e^*, Ψ_e gemäß (2.66) diejenigen Ensemblemittelwerte, die das effektive Potential extremalisieren:

$$\frac{\delta \Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau)} = \frac{\delta \Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta \Psi_e(\mathbf{x}, \tau)} = 0. \quad (2.68)$$

2.2.4 Berechnung des Erzeugenden Funktionals

An dieser Stelle wird jetzt das Funktionalintegral (2.62) berechnet. Dazu entwickelt man die Bose-Felder nach den Eigenfunktionen des Ein-Teilchen-Hamiltonoperators

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}}(\tau) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}). \quad (2.69)$$

Bei diesem Ansatz ist noch nicht berücksichtigt, dass $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ senkrecht auf dem Feldmittelwert $\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ stehen muss. In den folgenden Abschnitten wird gezeigt, dass dieser Ansatz zu einem vorläufigen effektiven Potential führt, dass Divergenzen am kritischen Punkt erzeugt. In Abschnitt 2.3 wird ein effektives Potential vorgestellt, dass dieses unphysikalische Verhalten vermeidet.

Da die Felder periodisch in der Imaginärzeit sind, kann man die Felder ferner einer Matsubara-Zerlegung unterziehen

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\mathbf{n},m} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau}, \quad (2.70)$$

wobei $\omega_m = 2\pi m/\hbar\beta$ mit $m \in \mathbb{Z}$ die Matsubara-Frequenzen bezeichnen. Die Funktionalintegration wird durch diese Entwicklung zu einer gewöhnlichen Integration über alle Entwicklungskoeffizienten $c_{\mathbf{n},m}^*, c_{\mathbf{n},m}$

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi = \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \int dc_{\mathbf{n},m}^* \int dc_{\mathbf{n},m} N_{\mathbf{n},m}, \quad (2.71)$$

die Normierungskonstante $N_{\mathbf{n},m}$ wird dabei gewählt zu $N_{\mathbf{n},m} = \beta/2\pi$. Setzt man (2.70) und (2.71) in das erzeugende Funktional (2.62) ein, so bekommt man nach Ausführen der Integrale im Exponenten

$$\begin{aligned} Z[j^*, j] &= \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \int dc_{\mathbf{n},m}^* \int dc_{\mathbf{n},m} N_{\mathbf{n},m} e^{-\beta \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\mathbf{n},m}^* c_{\mathbf{n},m} (-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu)} \\ &\quad \times e^{\sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \{ j^*(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau} c_{\mathbf{n},m} + j(\mathbf{x}, \tau) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}) e^{i\omega_m \tau} c_{\mathbf{n},m} \} / \hbar}. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Die Integrale über die Entwicklungskoeffizienten stellen komplexe Gauß-Integrale der Form

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dc^* \int_{-\infty}^{\infty} dc e^{-c^* A c - c^* \eta - c \eta^*} \quad (2.73)$$

dar. Durch die Substitutionen $c = c_1 + i c_2$, $c^* = c_1 - i c_2$ und $\eta = \eta_1 + i \eta_2$, $\eta^* = \eta_1 - i \eta_2$ lässt sich ein solches Integral in ein Produkt von zwei Gauß-Integralen zerlegen:

$$I = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dc_1 e^{-A c_1^2 - 2c_1 \eta_1} \int_{-\infty}^{\infty} dc_2 e^{-A c_2^2 - 2c_2 \eta_2} = \frac{2\pi}{A} e^{\eta^* A^{-1} \eta}. \quad (2.74)$$

Das erzeugende Funktional (2.72) wird dadurch zu

$$Z[j^*, j] = \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' \right. \\ \left. \times \frac{j^*(\mathbf{x}, \tau) j(\mathbf{x}', \tau') \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau} \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') e^{i\omega_m \tau'}}{\beta(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu)} \right\}. \quad (2.75)$$

Eine verkürzte Darstellung kann man durch die Einführung der Vielteilchen-Green-Funktion erreichen, das erzeugende Funktional wird dann zu

$$Z[j^*, j] = Z_0 \exp \left\{ \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' j^*(\mathbf{x}, \tau) G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') j(\mathbf{x}', \tau') \right\}, \quad (2.76)$$

mit den Abkürzungen

$$Z_0 = \prod_{\mathbf{n}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu} \quad (2.77)$$

und

$$G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') e^{-i\omega_m(\tau - \tau')}}{-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu}. \quad (2.78)$$

Die letzte Gleichung stellt dabei die Spektraldarstellung der Vielteilchen-Green-Funktion dar, die offenbar das funktionale Inverse des Integralkernes (2.60) ist:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau'' \int d^D x'' G_0^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'') G_0(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}', \tau') = \hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta^{(p)}(\tau - \tau'). \quad (2.79)$$

Benutzt wird hierbei die periodisch repetierte Deltafunktion $\delta^{(p)}(\tau - \tau')$:

$$\delta^{(p)}(\tau - \tau') = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(\tau - \tau' + m\hbar\beta). \quad (2.80)$$

Eine weitere wichtige Größe ist der sogenannte Tracelog des Integralkernes (2.60), diesen definiert man als die Summe über die Logarithmen seiner Eigenwerte. Wendet man (2.60) auf (2.70) an, so erhält man als Eigenwerte

$$\lambda_{\mathbf{n}, m} = -i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu. \quad (2.81)$$

Der Tracelog wird mit diesen Eigenwerten zu

$$\text{Tr} \ln G_0^{-1} = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu). \quad (2.82)$$

Mit dieser Definition ist es möglich, (2.77) durch den $\text{Trln} G_0^{-1}$ auszudrücken und man erhält

$$Z_0 = e^{-\text{Trln} G_0^{-1}}. \quad (2.83)$$

2.2.5 Berechnung des Effektiven Potentials

Die Gleichungen (2.76) und (2.83) erlauben es nun, aus (2.62) das großkanonische Potential in Abhängigkeit von den Strömen zu entnehmen als

$$\Omega[j^*, j] = \frac{1}{\beta} \text{Trln} G_0^{-1} - \frac{1}{\hbar^2 \beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x \int d^D x' j^*(\mathbf{x}, \tau) G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') j(\mathbf{x}', \tau'). \quad (2.84)$$

Hiermit ist es jetzt möglich, das effektive Potential (2.65) zu berechnen. Dazu benötigt man noch die Mittelwerte (2.64), für die man mit (2.84) die Beziehungen

$$\begin{aligned} \Psi^*[j^*, j](\mathbf{x}, \tau) &= \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' j^*(\mathbf{x}', \tau') G_0(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}, \tau), \\ \Psi[j^*, j](\mathbf{x}, \tau) &= \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') j(\mathbf{x}', \tau') \end{aligned} \quad (2.85)$$

erhält. Diese werden nun invertiert, da man an den Strömen in Abhängigkeit von den Mittelwerten interessiert ist. Die erste Gleichung in (2.85) wird von rechts mit $G_0^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}'', \tau'')$ multipliziert, die zweite von links mit $G_0^{-1}(\mathbf{x}'', \tau''; \mathbf{x}, \tau)$. Danach wird jeweils eine Integration über \mathbf{x} und τ ausgeführt. Zusammen mit (2.79) ergibt sich dann

$$\begin{aligned} j^*[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau) &= \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' \Psi^*(\mathbf{x}', \tau') G_0^{-1}(\mathbf{x}', \tau'; \mathbf{x}, \tau), \\ j[\Psi^*, \Psi](\mathbf{x}, \tau) &= \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d^D x' G_0^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \Psi(\mathbf{x}', \tau'). \end{aligned} \quad (2.86)$$

Setzt man (2.84) und (2.86) in (2.65) ein, so erhält man für das effektive Potential unter Beachtung von (2.59) schließlich

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = \frac{1}{\beta} \text{Trln} G_0^{-1} + \frac{1}{\hbar\beta} \mathcal{A}_e[\Psi^*, \Psi]. \quad (2.87)$$

Um aus dem effektiven Potential (2.87) das großkanonische Potential zu erhalten, müssen wir noch denjenigen Ensemblemittelwert finden, der das effektive Potential gemäß (2.68) extremalisiert. Dies führt auf die Bedingungen

$$\begin{cases} \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}_E(\mathbf{x}) - \mu \right\} \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = 0, \\ \left\{ -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}_E(\mathbf{x}) - \mu \right\} \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) = 0. \end{cases} \quad (2.88)$$

Die Gleichungen besitzen die trivialen Lösungen $\Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) = 0$. Sie gelten für die Hochtemperaturphase, bei der die Bosonen nicht im Grundzustand kondensiert sind. Die nichttrivialen Lösungen $\Psi_e(\mathbf{x}, \tau) \neq 0$, $\Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) \neq 0$ werden mit der Tieftemperaturphase identifiziert, bei der eine von null verschiedene makroskopische Besetzung des Grundzustandes vorliegt. Die Temperatur, bei welcher der Übergang von der Gas- zur Kondensatphase stattfindet, soll als die kritische Temperatur T_c bezeichnet werden. Die allgemeine Lösung von (2.88) lässt sich über einen Separationsansatz berechnen, dies ergibt

$$\begin{aligned} \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) &= \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)\tau/\hbar}, \\ \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) &= \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}) e^{(E_{\mathbf{n}} - \mu)\tau/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Die Funktionen $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ beschreiben gemäß (2.30) die Eigenfunktionen des Einteilchen-Hamiltonoperators $\hat{H}_E(\mathbf{x})$. Die Koeffizienten $c_{\mathbf{n}}$ und das chemische Potential μ müssen so gewählt werden, dass die Funktionen $\Psi_e(\mathbf{x}, \tau)$, $\Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau)$ periodisch in der Imaginärzeit sind und gleichzeitig die Energie minimieren. Außerdem sollen die so bestimmten extremalisierten Ensemblemittelwerte auf die Anzahl der im Grundzustand sitzenden Teilchen N_0 normiert werden:

$$\int d^D x \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = N_0. \quad (2.90)$$

All diese Annahmen führen zusammen auf die eindeutigen Lösungen

$$\Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{N_0} \psi_0(\mathbf{x}), \quad \Psi_e^*(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{N_0} \psi_0^*(\mathbf{x}), \quad (2.91)$$

mit $\mu = E_0$. Eine von null verschiedene Besetzung des Grundzustandes impliziert in dieser Theorie also auch, dass das chemische Potential gleich der Grundzustandsenergie sein muß. In dieser Theorie kann N_0 als Ordnungsparameter verstanden werden. Von diesen Ergebnissen ausgehend kann auch die Art der Näherung verstanden werden, die durch die Einführung des effektiven Potentials entsteht. Die Näherung des Grundzustandes durch seinen Ensemblemittelwert im Rahmen des effektiven Potentials kann als eine semiklassische Näherung verstanden werden, da durch diese Näherung die Fluktuationen des Grundzustandes nicht im effektiven Potential berücksichtigt werden und das chemische Potential

denjenigen Wert annimmt, den es eigentlich erst im thermodynamischen Limes bekommen würde.

Im speziellen Fall des harmonischen Potentials $V(\mathbf{x}) = M\omega^2\mathbf{x}^2/2$ erhält man dann als Lösungen von (2.88)

$$\Psi_e(\mathbf{x}) = \Psi_e^*(\mathbf{x}) = \sqrt{N_0} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{D}{4}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}\mathbf{x}^2} \quad (2.92)$$

und für das chemische Potential unterhalb des Phasenübergangs gilt $\mu = D\hbar\omega/2$.

2.2.6 Berechnung der Vielteilchen-Green-Funktion

Im Folgenden wird die Spektraldarstellung (2.78) der Green-Funktion mithilfe der Poissonschen Summenformel

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-2\pi i n x} \quad (2.93)$$

weiter vereinfacht, die eine Reihe in eine Reihe mit Integral transformiert [24, (2.324)]. Eine Anwendung von (2.93) auf die Reihe über die Matsubara-Frequenzen in (2.78) führt auf

$$G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega(\tau-\tau'+n\hbar\beta)}}{-i\hbar(\omega + i\frac{E_{\mathbf{n}}-\mu}{\hbar})}. \quad (2.94)$$

Dies kann umgeschrieben werden zu

$$G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau - \tau' + n\hbar\beta), \quad (2.95)$$

wobei für die Funktionen $g(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)$ dann entsprechend gilt:

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega\tau}}{-i\hbar(\omega + i\frac{E_{\mathbf{n}}-\mu}{\hbar})}. \quad (2.96)$$

Das ω -Integral kann mithilfe des Residuensatzes und der Lemma von Jordan ausgeführt werden. Für $\tau > 0$ kann man das Integral über einen Halbkreis über die negative komplexe Ebene berechnen, wofür man das Residuum

$$\text{Res} \left[\frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\frac{E_{\mathbf{n}}-\mu}{\hbar}} \right]_{\omega = -i\frac{E_{\mathbf{n}}-\mu}{\hbar}} = e^{-(E_{\mathbf{n}}-\mu)\tau/\hbar} \quad (2.97)$$

des Integranden benötigt. Für $\tau < 0$ ist entsprechend ein Halbkreis über die positive komplexe Ebene zu benutzen, wo der Integrand keinen Pol besitzt. Die Ergebnisse lassen sich zusammenfassen zu

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \theta(\tau) \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}') e^{-(E_{\mathbf{n}} - \mu)\tau/\hbar}. \quad (2.98)$$

Ein Vergleich mit (2.34) und (2.40) zeigt, dass man die Funktionen $g(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau)$ auch durch Imaginärzeitentwicklungsamplituden darstellen kann, wenn man die Energieeigenwerte um das chemische Potential verringert:

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \theta(\tau) \langle \mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', 0 \rangle \Big|_{E_{\mathbf{n}} \rightarrow E_{\mathbf{n}} - \mu}. \quad (2.99)$$

Wir erhalten also das äußerst wichtige Ergebnis, dass man die Vielteilchen-Green-Funktion mithilfe der Ein-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude bestimmen kann:

$$G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(\tau - \tau' + n\hbar\beta) \langle \mathbf{x}, \tau - \tau' + n\hbar\beta | \mathbf{x}', 0 \rangle \Big|_{E_{\mathbf{n}} \rightarrow E_{\mathbf{n}} - \mu}. \quad (2.100)$$

Ihren Namen trägt die Green-Funktion $G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ deshalb, weil sie die Schrödinger-Gleichung mit Deltafunktion in Raum und Imaginärzeit als Inhomogenität löst, wie man durch Einsetzen von (2.60) in (2.79) nachprüfen kann. Hinzu kommt noch die Eigenschaft, dass die Green-Funktion gleichzeitig auch die Korrelationsfunktion zweier Felder bzw. der zeitgeordnete Erwartungswert zweier Feldoperatoren ist. Zunächst drückt man den Erwartungswert zweier Felder durch das erzeugende Funktional (2.62) aus:

$$\begin{aligned} \langle \psi(\mathbf{x}, \tau) \psi^*(\mathbf{x}', \tau') \rangle &= \left\langle T_{\tau} \left[\hat{\psi}(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}^*(\mathbf{x}', \tau') \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{Z[j^*, j]} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi(\mathbf{x}, \tau) \psi^*(\mathbf{x}', \tau') e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j]/\hbar} \Big|_{j^*=j=0}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Das Symbol T_{τ} ordnet die Operatoren nach ihrer Zeit τ rechts mit dem kleinsten Wert beginnend. Der Ausdruck (2.101) kann mithilfe von Funktionalableitungen auch dargestellt werden als

$$\langle \psi(\mathbf{x}, \tau) \psi^*(\mathbf{x}', \tau') \rangle = \frac{\hbar^2}{Z[j^*, j]} \frac{\delta}{\delta j^*(\mathbf{x}, \tau)} \frac{\delta}{\delta j(\mathbf{x}', \tau')} Z[j^*, j] \Big|_{j^*=j=0}. \quad (2.102)$$

Setzt man die Gleichung (2.76) in (2.102) ein, so erhält man schließlich

$$\langle \psi(\mathbf{x}, \tau) \psi^*(\mathbf{x}', \tau') \rangle = G_0(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau'). \quad (2.103)$$

2.2.7 Berechnung des $\text{Trln} G_0^{-1}$

Ziel dieses Abschnitts ist die Berechnung von (2.82). Zuerst muss man die bisher vernachlässigte Zeitordnung berücksichtigen. Dazu führt man in der Matsubara-Summe einen sogenannten Konvergenzfaktor $e^{i\omega_m \eta}$ mit einem infinitesimalen $\eta > 0$ ein. Der Grund dafür ist, dass der $\text{Trln} G_0^{-1}$ im Rahmen der Feynmanschen Störungstheorie als ein 1-Loop-Diagramm verstanden wird. Bei Diagrammen, die in Matsubara-Zerlegung vorliegen, muss für jede in sich selbst geschlossene Linie ein Konvergenzfaktor berücksichtigt werden, um die Zeitordnung zu gewährleisten [23]. Dies ergibt entsprechend [25]

$$\text{Trln} G_0^{-1} = \lim_{\eta \downarrow 0} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu) e^{i\omega_m \eta}. \quad (2.104)$$

Die Anwendung der Poisson-Formel (2.93) auf diese Matsubara-Summe führt auf

$$\text{Trln} G_0^{-1} = \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ln(-i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{n}} - \mu) e^{i\omega(\eta - n\hbar\beta)}. \quad (2.105)$$

Um das ω -Integral ausführen zu können, schreibt man den Logarithmus um als

$$\ln a = - \left. \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{a^x} \right|_{x=0} \quad (2.106)$$

und verwendet die Schwinger-Formel

$$\frac{1}{a^x} = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} dt e^{-ta} t^{x-1} \quad \text{mit } x > 0, \Re(a) > 0. \quad (2.107)$$

Mit diesem Ausdruck ist es möglich, den Logarithmus durch die Gammafunktion darstellen. Der $\text{Trln} G_0^{-1}$ wird damit zu

$$\text{Trln} G_0^{-1} = - \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} dt e^{-t(E_{\mathbf{n}} - \mu)} t^{x-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(\eta - n\hbar\beta + \hbar t)} \right\} \Big|_{x=0}. \quad (2.108)$$

Das ω -Integral kann man mithilfe einer Integraldarstellung der Deltafunktion umschreiben:

$$\text{Trln} G_0^{-1} = - \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{\hbar\beta}{2\pi} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} dt e^{-t(E_{\mathbf{n}} - \mu)} t^{x-1} 2\pi \delta(\hbar t + \eta - n\hbar\beta) \right\} \Big|_{x=0}. \quad (2.109)$$

Die Gammafunktion divergiert für kleine x in führender Ordnung mit $1/x$, das verbliebene Integral ist nach Taylor entwickelbar in x . Man kann also die Ableitung nach x ausführen,

dabei bleibt nur der führende Term der Ordnung $\mathcal{O}(x^0)$ erhalten, wenn $x = 0$ gesetzt wird. Man erhält als Ergebnis

$$\text{Trln } G_0^{-1} = -\lim_{\eta \downarrow 0} \beta \sum_{\mathbf{n}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dt e^{-t(E_{\mathbf{n}}-\mu)} t^{-1} \delta(t + \eta/\hbar - n\beta). \quad (2.110)$$

Es tragen aufgrund der Deltafunktion nur diejenigen Integrale zur Summe bei, bei denen $n > 0$ ist. Ohne die Einführung des Konvergenzfaktors hätte auch das Integral mit $n=0$ dazu beigetragen. Die Summe wird also nach Ausführen der Integrale zu

$$\text{Trln } G_0^{-1} = -\lim_{\eta \downarrow 0} \beta \sum_{\mathbf{n}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta n - \eta/\hbar} e^{-(\beta n - \eta/\hbar)(E_{\mathbf{n}} - \mu)}. \quad (2.111)$$

Führt man schließlich den Limes $\eta \downarrow 0$ durch und verwendet die Reihendarstellung des Logarithmus, so ergibt sich

$$\text{Trln } G_0^{-1} = \sum_{\mathbf{n}} \ln [1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}]. \quad (2.112)$$

Demnach stimmt $\text{Trln } G_0^{-1}/\beta$ mit dem großkanonischen Potential der Theorie ohne Ordnungsparameter (2.6) überein.

2.2.8 Semiklassische Näherung

Für das großkanonische Potential der Theorie mit Ordnungsparameter gilt nach (2.67), (2.87), (2.91) und (2.112)

$$\Omega = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n}} \ln [1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}] + (E_0 - \mu)N_0, \quad (2.113)$$

wobei hier vorläufig der Grundzustand noch doppelt berücksichtigt ist. Der erste Beitrag zum großkanonischen Potential wurde bereits in (2.13) für den Fall eines isotropen harmonischen Potentials in D Dimensionen berechnet. Leitet man das großkanonische Potential für festes T und V nach dem chemischen Potential ab, so erhält man die vorläufige Teilchenzahlgleichung

$$N = N_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu - E_0)k}}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^D}. \quad (2.114)$$

Diese Gleichung lässt sich exakt nur für Temperaturen oberhalb von T_c auswerten, da die Reihe auf der rechten Seite für $\mu = E_0$ divergiert.

Die folgende semiklassische Näherung gilt für $b = \hbar\omega\beta \ll 1$, d. h. der Abstand der einzelnen Energieniveaus ist viel kleiner als die mittlere thermische Energie. Die Exponentialfunktion im Nenner der Summe wird in der semiklassischen Näherung für kleine

$b = \hbar\omega\beta$ bis zur ersten Ordnung entwickelt, d. h. $e^{-bk} \approx 1 - bk$, die Teilchenzahlgleichung wird dann zu [24]

$$N = N_0 + \frac{\zeta_D(e^{\beta(\mu-E_0)})}{(\hbar\beta\omega)^D} + \frac{D \zeta_{D-1}(e^{\beta(\mu-E_0)})}{2(\hbar\beta\omega)^{D-1}} + \frac{D(3D-1) \zeta_{D-2}(e^{\beta(\mu-E_0)})}{24(\hbar\beta\omega)^{D-2}} + \dots \quad (2.115)$$

Hier wurde wieder die Definition (2.20) der polylogarithmischen Funktion benutzt. Betrachtet man die Teilchenzahlgleichung für $T \leq T_c$ in $D=3$ Dimensionen, so bekommt man mit $\mu=E_0$

$$N = N_0 + \frac{\zeta(3)}{(\hbar\beta\omega)^3} + \frac{3\zeta(2)}{2(\hbar\beta\omega)^2} + \frac{\zeta(1)}{\hbar\beta\omega} + \dots, \quad (2.116)$$

wobei die Riemannsche Zetafunktion definiert ist als

$$\zeta(\nu) = \zeta_\nu(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\nu}. \quad (2.117)$$

Die in (2.116) auftretende Zeta-Funktion $\zeta(1)$ ist allerdings unendlich, da $\zeta_1(e^{-z})$ für $z \uparrow 0$ divergiert. Alle thermodynamischen Größen besitzen in höheren Ordnungen der semiklassischen Näherung solche divergenten Terme. So divergieren die Teilchenzahlgleichung und die kritische Temperatur ab der zweiten Korrektur, die Wärmekapazität aber bereits ab der ersten Ordnung. Eine Vorgehensweise besteht darin, nur die endlichen Terme zu berücksichtigen und alle divergenten Terme zu vernachlässigen. Die so erhaltenen Werte stimmen relativ gut mit den Ergebnissen aus Abschnitt 2.1 überein. Allerdings kann man nicht begründen, warum die divergenten Korrekturen einfach weggelassen werden können. Um die kritische Temperatur $T_c^{(0)}$ zu berechnen, bei welcher es in der semiklassischen Näherung in der führenden Ordnung zum Phasenübergang kommt, vernachlässigt man in Gleichung (2.116) den dritten und den vierten Term auf der rechten Seite und setzt $N_0=0$ sowie $T=T_c^{(0)}$. Löst man danach nach $T_c^{(0)}$ auf, so erhält man als Bestimmungsgleichung für die kritische Temperatur

$$T_c^{(0)} = \frac{\hbar\omega}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(D)} \right)^{\frac{1}{D}}, \quad (2.118)$$

Den Kondensatanteil erhält man, indem man (2.116) unter Vernachlässigung des dritten und vierten Termes auf der rechten Seite und unter Benutzung von (2.118) zu N_0/N umformt:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^D. \quad (2.119)$$

Der thermodynamische Limes für das betrachtete System wird so definiert, dass die kritische Temperatur $T_c^{(0)}$ konstant bleibt, d. h. man lässt unter der Bedingung $\omega^D N = \text{const.}$ die Teilchenzahl gegen unendlich laufen und die Fallenfrequenz gleichzeitig gegen null. Dies rechtfertigt im Nachhinein die Verwendung der semiklassischen Näherung, da $b_c^{(0)} = \hbar\omega\beta_c^{(0)}$ im thermodynamischen Limes verschwindet.

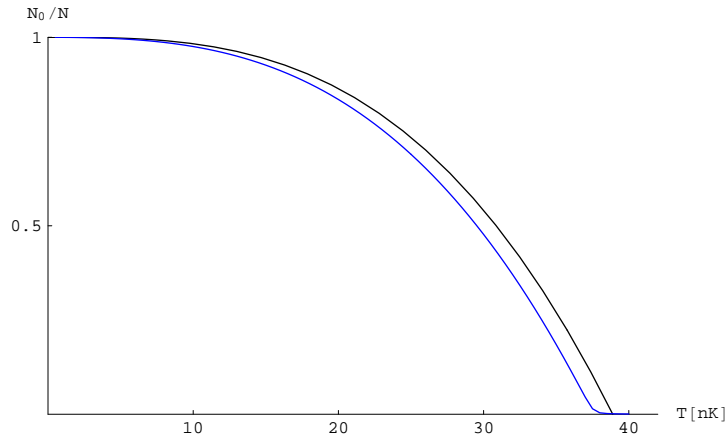


Abbildung 2.4: Kondensatanteil N_0/N aufgetragen gegen die Temperatur T für $N=10^4$ Teilchen und $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz. Die blaue Kurve entstammt (2.15) aus der Theorie ohne Ordnungsparameter, die schwarze entspricht der semiklassischen Näherung (2.119).

Vergleicht man wie in Abbildung 2.4 die semiklassische Näherung mit den Ergebnissen aus Abschnitt 2.1 für experimentell relevante Parameterbereiche, so stellt man für $N = 10^4$ Teilchen fest, dass sich Abweichungen von bis zu 10% ergeben. Wünschenswert ist deshalb eine Theorie, die es erlaubt, systematisch alle höheren Ordnungen der semiklassischen Näherung zu berechnen. Eine solche Theorie wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

2.3 Korrigiertes großkanonisches Potential

Um die Ursache der divergierenden Korrekturen am Phasenübergang zu finden, betrachtet man noch einmal die Teilchenzahlgleichung (2.114). In der Theorie des effektiven Potentials, das den Grundzustand gesondert in Form des Ensemblemittelwertes der Felder behandelt, ist das chemische Potential für $T \leq T_c$ gleich der Grundzustandsenergie zu setzen. Dies führt allerdings dazu, dass die Reihe in (2.114) divergiert. Die Ursache dafür liegt in der Doppelzählung des Grundzustandes begründet, da dieser sowohl im expliziten Ausdruck N_0 als auch in der Reihe berücksichtigt wird. Diese entstammt dem $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$, bei dem über alle Quantenzahlen einschließlich des Grundzustandes summiert wird. Der $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$ ist aber nach (2.112) identisch mit dem großkanonischen Potential (2.6) aus der Theorie ohne Ordnungsparameter von Abschnitt 2.1, bei der das chemische Potential immer kleiner als der niedrigste Energieeigenwert bleibt. Dieser Widerspruch führt auf ein divergentes großkanonisches Potential der Theorie mit Ordnungsparameter für $T \leq T_c$.

2.3.1 Korrigierter Ansatz für Bose-Felder

Im Folgenden wird ein korrigiertes großkanonisches Potential eingeführt, das eine Doppelzählung des Grundzustandes vermeidet. Man beginnt dafür mit der Berechnung der großkanonischen Zustandssumme mit Strömen (2.62), wobei jetzt für die Bose-Felder statt (2.70) der Ansatz

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\mathbf{n},m} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) e^{-i\omega_m \tau} \quad (2.120)$$

gewählt wird, bei welchem bei der Summation über alle Quantenzahlen der Grundzustand weggelassen wird. Dieser Ansatz berücksichtigt explizit, dass der Grundzustand $\psi_0(\mathbf{x})$ senkrecht auf den Fluktuationen $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ ist [26]:

$$\int d^D x \psi_0^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, \tau) = 0. \quad (2.121)$$

Für die Funktionalintegration erhält man dann statt (2.71) entsprechend

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi = \prod_{\mathbf{n} \neq 0} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \int dc_{\mathbf{n},m}^* \int dc_{\mathbf{n},m} N_{\mathbf{n},m}. \quad (2.122)$$

Die Berechnung des Funktionalintegrals lässt sich nun analog zu Abschnitt 2.2.3 durchführen, mit dem Unterschied, dass immer der Grundzustand weggelassen werden muss, um eine Doppelzählung zu vermeiden. So erhält man für den $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$ statt (2.112)

$$\text{Tr} \ln G_{\text{kor.}}^{-1} = \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \ln [1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}]. \quad (2.123)$$

Statt des großkanonischen Potentials (2.113) erhalten wir daher

$$\Omega_{\text{kor.}} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \ln [1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu)}] + (E_0 - \mu) N_0. \quad (2.124)$$

Der erste Term von (2.124) beschreibt die thermisch angeregten Teilchen, während der zweite Beitrag die makroskopische Besetzung des Grundzustandes beschreibt.

2.3.2 Bose-Gas in isotroper harmonischer Falle

Im Folgenden sollen die Teilchenzahl, die kritische Temperatur und die Wärmekapazität für ein Bose-Gas in einer isotropen harmonischen Falle berechnet werden, welche sich durch das korrigierte großkanonische Potential ergeben. Um den korrigierten TraceLog zu erhalten, wird der Beitrag der Grundzustandes

$$\text{Tr} \ln G_{0,0}^{-1} = \ln [1 - e^{-\beta(E_0 - \mu)}] \quad (2.125)$$

vom unkorrigierten Tracelog $\text{Trln}G_0^{-1}$ abgezogen. Setzt man die Reihendarstellung des Logarithmus in (2.125) ein, so erhält man

$$\text{Trln}G_{0,0}^{-1} = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-\beta(E_0-\mu)k}}{k}. \quad (2.126)$$

Insgesamt führt dies mit (2.112) und (2.123) auf

$$\text{Trln}G_{\text{kor.}}^{-1} = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu-E_0)k}}{k} \left[\frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right]. \quad (2.127)$$

Für das großkanonische Potential (2.124) eines Bose-Gases in einer isotropen harmonischen Falle folgt damit konkret

$$\Omega_{\text{kor.}} = -\frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu-E_0)k}}{k} \left[\frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right] + (E_0 - \mu)N_0. \quad (2.128)$$

Analog zu (2.124) beschreibt der erste Beitrag die thermisch angeregten Teilchen und der zweite die makroskopische Besetzung des Grundzustandes.

2.3.3 Teilchenzahlgleichung

Durch die Ableitung nach dem chemischen Potential ergibt sich aus (2.128) die Teilchenzahlgleichung

$$N = N_0 + \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)k} \left[\frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right]. \quad (2.129)$$

Man stellt fest, dass die Reihe im Unterschied zu (2.114) nicht mehr für $\mu = E_0$ divergiert. Anhand von Abbildung 2.5 kann man erkennen, dass die Theorien ohne und mit Ordnungsparameter gut übereinstimmende Ergebnisse liefern. Lediglich im Temperaturbereich um T_c ergibt sich eine Abweichung, die daraus resultiert, dass die Fluktuationen des Grundzustandes im effektiven Potential vernachlässigt werden. Im Gegensatz zur Theorie ohne Ordnungsparameter aus Abschnitt 2.1 gibt es nun eine wohldefinierte Temperatur, bei welcher der Kondensatanteil N_0/N verschwindet. Diese soll im Folgenden als kritische Temperatur T_c bezeichnet werden.

2.3.4 Wärmekapazität

Um die Wärmekapazität C_V aus (2.16) zu bestimmen, muss man erst das großkanonische Potential durch die Legendre-Transformation (2.8) in die innere Energie überführen.

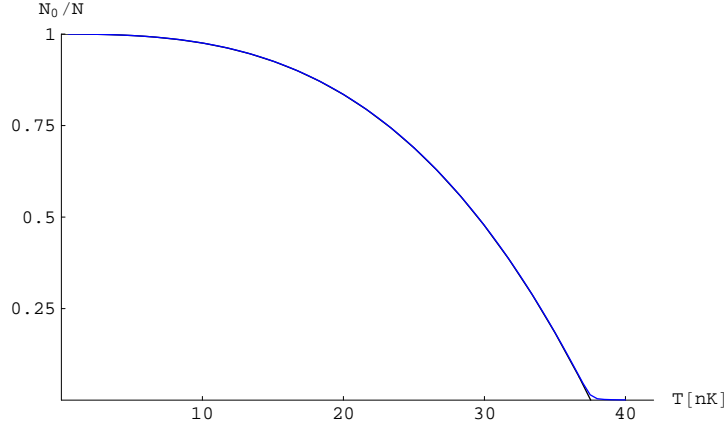


Abbildung 2.5: Kondensatanteil N_0/N aufgetragen gegen die Temperatur T für (2.15) aus der Theorie ohne Ordnungsparameter (blaue Kurve) bzw. (2.129) (schwarze Kurve) für $N=10^4$ Teilchen und $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz. Beide Kurven liegen fast den gesamten Temperaturbereich entlang sehr eng beieinander.

Hierzu wird die Entropie benötigt, die man mit (2.10) und (2.128) bestimmen kann:

$$S = \frac{1}{T} \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)k} \left\{ \frac{1}{bk} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right] - (\mu - E_0) \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right] + \frac{D\hbar\omega e^{-bk}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} \right\}. \quad (2.130)$$

Nun kann man (2.128)–(2.130) in (2.8) einsetzen und erhält für die innere Energie

$$U = E_0 N_0 + D\hbar\omega \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)k} \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right] + \frac{e^{-bk}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} \right\}, \quad (2.131)$$

wobei die Grundzustandsenergie $E_0 = D\hbar\omega/2$ benutzt wurde. Der erste Beitrag beschreibt den Anteil der Teilchen, die im Grundzustand sitzen, während der zweite Term den Anteil der thermisch angeregten Teilchen zur inneren Energie darstellt.

Bei der Berechnung der Wärmekapazität müssen Hoch- und Tieftemperaturbereich getrennt behandelt werden, da für $T > T_c$ die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials und für $T \leq T_c$ die Temperaturabhängigkeit der kondensierten Teilchen berücksichtigt werden müssen. Für $T \leq T_c$ folgt aus (2.16), (2.129), (2.131) und $\mu = E_0$ für die Wärmekapazität

$$C_{V,T \leq T_c} = Dk_B(\hbar\omega\beta)^2 \sum_{k=1}^{\infty} k \left[\frac{e^{-\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} + \frac{(D+1)e^{-2\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+2}} \right] \quad (2.132)$$

und für $T > T_c$ erhält man zunächst

$$C_{V,T>T_c} = Dk_B(\hbar\omega\beta)^2 \sum_{k=1}^{\infty} k e^{\beta(\mu-E_0)} \left(\frac{\left(\frac{D}{2} + 1\right) e^{-\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} + \frac{(D+1)e^{-2\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+2}} \right. \\ \left. + \frac{T}{\hbar\omega\beta} \frac{\partial\beta(\mu-E_0)}{\partial T} \Big|_{V,N} \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right] + \frac{e^{-bk}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} \right\} \right). \quad (2.133)$$

Die innere Ableitung kann analog zu Abschnitt 2.1.4 durch Differentiation der Teilchengleichung (2.129) nach der Temperatur bestimmt werden:

$$0 = \sum_{k=1}^{\infty} k e^{\beta(\mu-E_0)k} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^D} - 1 \right] \frac{\partial\beta(\mu-E_0)}{\partial T} \Big|_{V,N} \\ + \sum_{k=1}^{\infty} k e^{\beta(\mu-E_0)k} \frac{e^{-\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} \frac{D\hbar\omega\beta}{T}. \quad (2.134)$$

Aufgelöst erhält man

$$\frac{\partial\beta(\mu-E_0)}{\partial T} \Big|_{V,N} = - \frac{\sum_{k=1}^{\infty} k e^{\beta(\mu-E_0)k} \frac{e^{-\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} \frac{D\hbar\omega\beta}{T}}{\sum_{k'=1}^{\infty} k' e^{\beta(\mu-E_0)k'} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k'})^D} - 1 \right]}. \quad (2.135)$$

Für die Wärmekapazität folgt nach Einsetzen von (2.135) in (2.133)

$$C_{V,T>T_c} = Dk_B(\hbar\omega\beta)^2 \left\{ -D \frac{\left[\sum_{k=1}^{\infty} k e^{\beta(\mu-E_0)k} \frac{e^{-\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} \right]^2}{\sum_{k'=1}^{\infty} k' e^{\beta(\mu-E_0)k'} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k'})^D} - 1 \right]} \right. \\ \left. + \sum_{k=1}^{\infty} k e^{\beta(\mu-E_0)k} \left[\frac{e^{-\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+1}} + \frac{(D+1)e^{-2\hbar\omega\beta k}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^{D+2}} \right] \right\}. \quad (2.136)$$

Anhand von Abbildung 2.6 kann man wie schon beim Kondensatanteil in Abbildung (2.5) eine große Übereinstimmung zwischen den Theorien mit und ohne Ordnungsparameter erkennen. Die Theorie mit Ordnungsparameter erzeugt allerdings eine Unstetigkeit in der Wärmekapazität für $T=T_c$, während diese in der exakten Theorie stetig bleibt.

Zur Untersuchung der Wärmekapazität bei großen Temperaturen entwickelt man die Nenner der Summen in Gleichung (2.136) bis zur führenden Ordnung:

$$C_{V,T>T_c} = 3k_B b^2 \left[- \frac{3 \left(\frac{1}{b^4} \zeta_3(e^{b(\mu'-1)}) \right)^2}{\frac{1}{b^3} (3\zeta_2(e^{b(\mu'-1)}) - 3\zeta_2(e^{b(\mu'-2)}) + \zeta_2(e^{b(\mu'-3)}))} \right. \\ \left. + \frac{4\zeta_4(e^{b(\mu'-2)})}{b^5} \right] + \mathcal{O}(b^{-2}). \quad (2.137)$$

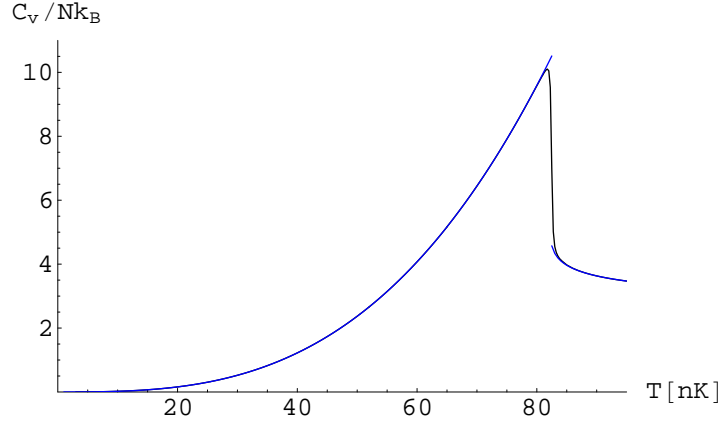


Abbildung 2.6: Wärmekapazität C_V aufgetragen gegen die Temperatur T für $N=10^5$ Teilchen und $\omega=2\pi \cdot 40$ Hz. Die schwarze Kurve entspricht (2.28) aus der Theorie ohne Ordnungsparameter, die blaue Kurve (2.132) und (2.136).

Dabei wurden die Abkürzungen $b = \hbar\omega\beta$ und $\mu' = (\mu - E_0)/\hbar\omega$ benutzt. Das chemische Potential hat für hohe Temperaturen einen sehr großen negativen Wert, deshalb kann man die Näherung $\zeta_\nu(e^{b(\mu'-a)}) \approx e^{b\mu'} \ll 1$ durchführen und die Wärmekapazität schreiben als

$$C_{V,T>T_c} \approx \frac{3k_B}{b^3} e^{b\mu'} + \mathcal{O}(b^{-2}). \quad (2.138)$$

Die Teilchenzahl (2.144) wird in der gleichen Näherung und in führender Ordnung in b zu

$$N \approx \frac{e^{b\mu'}}{b^3} + \mathcal{O}(b^{-2}). \quad (2.139)$$

Diese Näherung setzt man in (2.138) ein und erhält schließlich im Limes $T \rightarrow \infty$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C_{V,T>T_c} = 3Nk_B. \quad (2.140)$$

Die Wärmekapazität geht also für sehr große Temperaturen in das Gesetz von Dulong-Petit für den dreidimensionalen harmonischen Oszillator über.

2.4 Korrigierte semiklassische Näherung

Ziel dieses Abschnittes ist es, die aus dem korrigierten großkanonischen Potential entstammenden thermodynamischen Größen einer systematischen semiklassischen Näherung zu unterziehen. Dazu wird ein von H. Kleinert entwickeltes Verfahren für den Spezialfall $T=T_c$ auf alle Temperaturen erweitert [24, Appendix 7A]. Betrachtet werden soll wieder das ideale Bose-Gas in einer isotropen harmonischen Falle. Die dabei entstehende

Entwicklung lässt sich nach Potenzen der Teilchenzahl N ordnen. Die führende Ordnung der Entwicklung stellt den thermodynamischen Limes dar, während die höheren Ordnungen durch die Endlichkeit des Systems hervorgerufen werden. Die thermodynamischen Größen werden jeweils bis zu der führenden Ordnung berechnet, die mit dem vorläufigen großkanonischen Potential (2.113) nicht zugänglich ist.

2.4.1 Teilchenzahlgleichung

Im Folgenden soll die korrigierte Teilchenzahlgleichung (2.129) für $D=3$ Dimensionen in der semiklassischen Näherung berechnet werden. Zuerst wird die Teilchenzahl auf die Form

$$N = N_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=1}^D \frac{(-1)^{l+1} \binom{D}{l} e^{-bk(l-\mu')}}{(1 - e^{-bk})^D} \quad (2.141)$$

gebracht mit den Abkürzungen $b=\hbar\omega\beta$ und $\mu'=(\mu-E_0)/\hbar\omega$. Wir nehmen an, dass

$$0 < b \ll 1 \quad (2.142)$$

gilt, also die mittlere thermische Energie viel größer ist als der Abstand der Energieniveaus. In diesem Falle ist es möglich, die in (2.141) auftretenden Reihen mit dem zuvor erwähnten Verfahren semiklassisch zu nähern, das im Anhang A ausgearbeitet ist. Dazu wird (2.141) durch die Funktion (A.1) ausgedrückt:

$$N = N_0 + \sum_{l=1}^D (-1)^{l+1} \binom{D}{l} I(l - \mu', b, D). \quad (2.143)$$

Spezifiziert man auf $D=3$ Dimensionen und verwendet man für die semiklassische Näherung (A.23), so ergibt dies für die Teilchenzahl

$$\begin{aligned} N = & N_0 + \frac{1}{b^3} \left[3\zeta_3(e^{-b(1-\mu')}) - 3\zeta_3(e^{-b(2-\mu')}) + \zeta_3(e^{-b(3-\mu')}) \right] \\ & + \frac{1}{b^2} \left[\frac{9}{2}\zeta_2(e^{-b(1-\mu')}) - \frac{9}{2}\zeta_2(e^{-b(2-\mu')}) + \frac{3}{2}\zeta_2(e^{-b(3-\mu')}) \right] \\ & + \frac{1}{b} \left\{ 3\zeta_1(e^{-b(1-\mu')}) - 3\zeta_1(e^{-b(2-\mu')}) + \zeta_1(e^{-b(3-\mu')}) + \frac{53}{24} + \frac{5}{4}\mu' \right. \\ & \quad + \frac{1}{2}(1-\mu')(\mu'-2)\psi_0(1-\mu') + \frac{1}{2}(1-\mu')(2-\mu') \ln(3-\mu') \\ & \quad + \frac{3}{2}\mu'(\mu'+1) \ln(1-\mu') + \frac{3}{2}\mu'(1-\mu') \ln(2-\mu') \\ & \quad \left. + \frac{3}{2}[\mu'(-1-\mu')\psi_0(-1-\mu') - \mu'(1-\mu')\psi_0(-\mu')] \right\} + \mathcal{O}(b^0). \quad (2.144) \end{aligned}$$

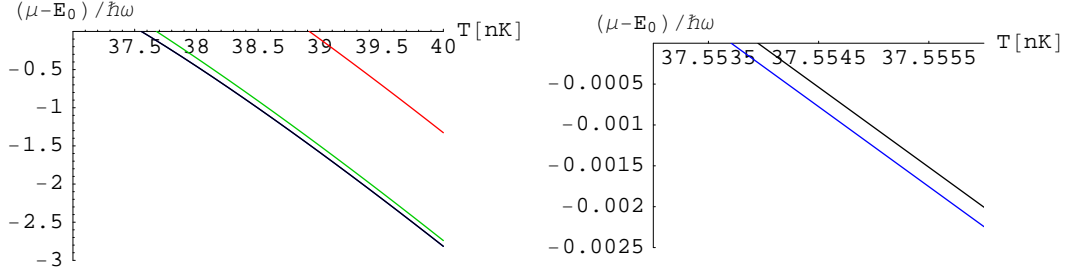


Abbildung 2.7: Renormiertes chemisches Potential aufgetragen gegen die Temperatur für $N=10^4$ Teilchen und $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz. Die schwarze Kurve entstammt (2.129), die rote, grüne und blaue Kurve entsprechen deren semiklassischer Näherung bis zur nullten, ersten bzw. zweiten Ordnung und sind (2.144) entnommen. In der linken Grafik liegen die schwarze und blaue Kurve so eng beieinander, dass sie nicht mehr unterschieden werden können.

Diese Gleichung stellt eine für $D=3$ gegenüber (2.115) verbesserte Version dar, die nicht mehr am Phasenübergang divergiert. Die polylogarithmischen Funktionen können im Allgemeinen nicht mithilfe der Robinson-Formel [27] für kleine b entwickelt werden, da das chemische Potential und der Parameter b nicht unabhängig voneinander sind. Das Produkt $-b\mu' = -\beta(\mu - E_0)$ wächst mit der Temperatur an und kann deshalb in der Hochtemperaturphase nicht als klein angesehen werden. In den folgenden Abschnitten wird (2.144) für die Fälle $T > T_c$, $T = T_c$ und $T < T_c$ betrachtet.

2.4.2 Chemisches Potential

Aus den Gleichungen (2.129) und (2.144) kann man für $T > T_c$ numerisch das chemische Potential bestimmen und miteinander vergleichen. Man erkennt anhand von Abbildung 2.7, dass die semiklassische Näherung eine gute Übereinstimmung mit dem exakten Ausdruck liefert. Das renormierte chemische Potential beginnt bei der jeweiligen kritischen Temperatur bei einem Wert von 0 und wird negativ bei größeren Temperaturen. Auffällig ist im Vergleich zu Abbildung 2.1, dass das chemische Potential in der Theorie mit Ordnungsparameter bei $T = T_c$ nicht stetig differenzierbar ist.

2.4.3 Kritische Temperatur

Bildet man in (2.144) den Limes $\mu' \uparrow 0$, so erhält man unter Benutzung von (A.16), (A.17) die Teilchenzahlgleichung für $T \leq T_c$:

$$\begin{aligned}
N &= N_0 + \frac{1}{b^3} \left[3\zeta_3(e^{-b}) - 3\zeta_3(e^{-2b}) + \zeta_3(e^{-3b}) \right] \\
&\quad + \frac{1}{b^2} \left[\frac{9}{2}\zeta_2(e^{-b}) - \frac{9}{2}\zeta_2(e^{-2b}) + \frac{3}{2}\zeta_2(e^{-3b}) \right] \\
&\quad + \frac{1}{b} \left[3\zeta_1(e^{-b}) - 3\zeta_1(e^{-2b}) + \zeta_1(e^{-3b}) + \frac{53}{24} + \gamma + \ln 3 - 3 \right] + \mathcal{O}(b^0). \quad (2.145)
\end{aligned}$$

Diese korrigierte Teilchenzahl ist auch am kritischen Punkt bis zur zweiten Ordnung endlich, während die vorläufige Teilchenzahl (2.116) eine Divergenz in der zweiten Ordnung aufweist. Man kann (2.145) noch weiter vereinfachen, indem man die polylogarithmischen Funktionen mithilfe der Robinson-Formel für kleine b entwickelt [28, (4.293)]:

$$\zeta_4(e^{-b}) = \zeta(4) - b\zeta(3) + \frac{b^2}{2}\zeta(2) - \frac{b^3}{6} \left[\frac{11}{6} - \ln b \right] + \mathcal{O}(b^4), \quad (2.146)$$

$$\zeta_3(e^{-b}) = \zeta(3) - b\zeta(2) + \frac{b^2}{2} \left[\frac{3}{2} - \ln b \right] + \mathcal{O}(b^3), \quad (2.147)$$

$$\zeta_2(e^{-b}) = \zeta(2) + b[\ln b - 1] + \mathcal{O}(b^2), \quad (2.148)$$

$$\zeta_1(e^{-b}) = -\ln b + \mathcal{O}(b), \quad (2.149)$$

$$\zeta_0(e^{-b}) = \frac{1}{b} - \frac{1}{2} + \mathcal{O}(b). \quad (2.150)$$

Setzt man die Gleichungen (2.147)–(2.149) in (2.145) ein, so erhält man mit $b = \hbar\omega\beta$:

$$N = N_0 + \frac{1}{(\hbar\omega\beta)^3} \zeta(3) + \frac{1}{(\hbar\omega\beta)^2} \frac{3}{2} \zeta(2) + \frac{1}{\hbar\omega\beta} \left[-\ln(\hbar\omega\beta) + \gamma - \frac{19}{24} \right] + \dots \quad (2.151)$$

Die kritische Temperatur T_c kann man nun dadurch berechnen, dass man in (2.151) $T = T_c$ und $N_0 = 0$ setzt und dann nach T_c auflöst. Man erhält die kritische Temperatur bis zur Ordnung $\mathcal{O}(N^{-2/3})$:

$$\begin{aligned}
T_c &= \frac{\hbar\omega}{k_B} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{\frac{1}{3}} \left\{ 1 - \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)} \right. \\
&\quad \left. - \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{3\zeta(3)} \left[-\frac{1}{3} \ln \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right) + \gamma - \frac{19}{24} - \frac{3\zeta(2)^2}{4\zeta(3)} \right] \right\} + \dots \quad (2.152)
\end{aligned}$$

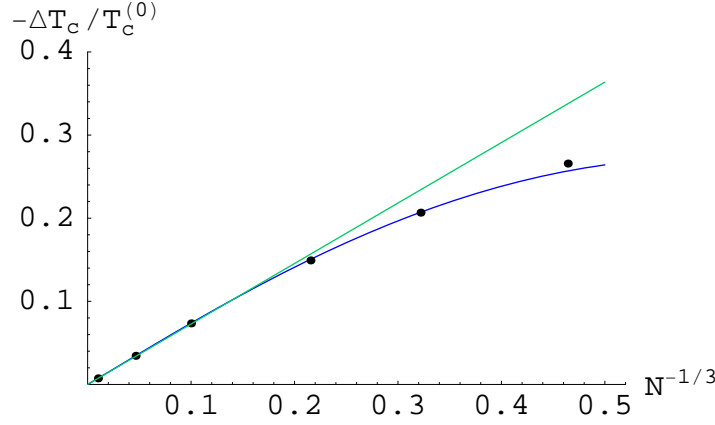


Abbildung 2.8: Negative relative Verschiebung der kritischen Temperatur aufgetragen gegen $N^{-1/3}$ für $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz. Die grüne und die blaue Kurve entsprechen (2.153) bis zur ersten bzw. zweiten Ordnung, die Punkte wurden numerisch aus Gleichung (2.129) bestimmt.

Bezogen auf die kritische Temperatur (2.118) erhält man

$$\begin{aligned} \frac{T_c}{T_c^{(0)}} = & 1 - \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)} \\ & - \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{3\zeta(3)} \left[-\frac{1}{3} \ln\left(\frac{\zeta(3)}{N}\right) + \gamma - \frac{19}{24} - \frac{3\zeta(2)^2}{4\zeta(3)} \right] + \dots \quad (2.153) \end{aligned}$$

Die führende Ordnung entspricht dem thermodynamischen Limes, der schon in Abschnitt 2.2.8 berechnet wurde. Die erste Korrektur wurde bereits von S. Grossmann und M. Holt haus gefunden [5], die zweite kann auch aus einer Arbeit von H. Kleinert hergeleitet werden [24, (7.167)]. Auffällig sind bei diesem Ergebnis der Logarithmus und die Eulersche Zahl γ , die in der zweiten Ordnung auftreten. In Abbildung 2.8 kann man erkennen, dass (2.153) gut mit der numerisch aus (2.129) gewonnenen kritischen Temperatur übereinstimmt.

2.4.4 Kondensatanteil

Im vorigen Abschnitt zur kritischen Temperatur wurde die Teilchenzahlgleichung (2.151) für $T=T_c$ ausgewertet. Jetzt betrachtet man die Gleichung auch für $T<T_c$. Um den Kondensatanteil zu erhalten, löst man (2.151) nach N_0/N auf und erhält:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{1}{N} \frac{1}{(\hbar\omega\beta)^3} \left\{ \zeta(3) + \frac{3}{2}(\hbar\omega\beta)\zeta(2) + (\hbar\omega\beta)^2 \left[-\ln(\hbar\omega\beta) + \gamma - \frac{19}{24} \right] \right\} + \dots \quad (2.154)$$

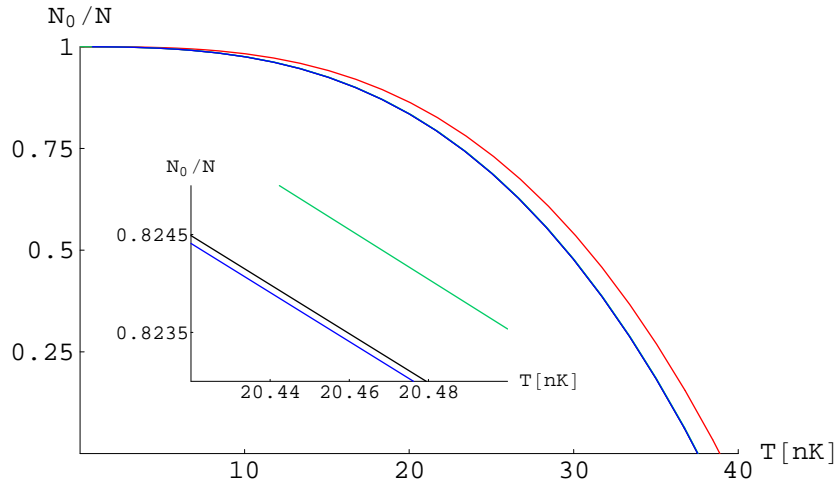


Abbildung 2.9: Der Kondensatanteil N_0/N aufgetragen gegen T/T_c . Die schwarze Kurve stellt die korrigierte Teilchenzahlgleichung (2.129) dar, die rote, die grüne und die blaue Kurve entsprechen deren semiklassischer Näherung nach (2.158) bis zur Ordnung $\mathcal{O}(N^0)$, $\mathcal{O}(N^{-1/3})$ sowie $\mathcal{O}(N^{-2/3})$. Erzeugt wurden die Kurven für $N=10^4$ Teilchen, sie liegen so eng beieinander, dass sie nur noch in dem stark vergrößerten Ausschnitt unterschieden werden können.

Mit der Beziehung

$$\hbar\omega\beta = \hbar\omega\beta_c \frac{T_c}{T} \quad (2.155)$$

kann (2.151) auch durch die kritische Temperatur T_c ausgedrückt werden. Darüber hinaus kann man $\hbar\omega\beta_c$ mit der Teilchenzahl in Verbindung setzen, denn für (2.151) gilt bei $T = T_c$

$$N = \frac{1}{(\hbar\omega\beta_c)^3} \zeta(3) + \frac{1}{(\hbar\omega\beta_c)^2} \frac{3}{2} \zeta(2) + \frac{1}{\hbar\omega\beta_c} \left[-\ln(\hbar\omega\beta_c) + \gamma - \frac{19}{24} \right] + \dots \quad (2.156)$$

Diesen Ausdruck kann man dann zu einer impliziten Gleichung für $\hbar\omega\beta_c$ umformen:

$$\hbar\omega\beta_c = N^{-\frac{1}{3}} \left\{ \zeta(3) + \hbar\omega\beta_c \frac{3}{2} \zeta(2) + (\hbar\omega\beta_c)^2 \left[-\ln(\hbar\omega\beta_c) + \gamma - \frac{19}{24} \right] \right\}^{\frac{1}{3}} + \dots \quad (2.157)$$

Zusammen mit (2.155) und (2.157) wird die Gleichung für den Kondensatanteil nach Entwicklung der Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}(N^{-2/3})$ zu

$$\begin{aligned} \frac{N_0}{N} = & 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 - \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)} \left[\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \right] \\ & - \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{\zeta(3)} \left\{ \left[\frac{T}{T_c} - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \right] \left[-\frac{1}{3} \ln \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right) + \gamma - \frac{19}{24} \right] \right. \\ & \left. + \frac{T}{T_c} \ln \left(\frac{T}{T_c}\right) - \frac{3\zeta(2)^2}{2\zeta(3)} \left[\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \right] \right\} + \dots \end{aligned} \quad (2.158)$$

In Abbildung 2.9 werden die semiklassischen Näherungen verschiedener Ordnung aus Gleichung (2.158) mit (2.129) verglichen. Erkennbar ist, dass (2.158) einschließlich der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-2/3})$ eine verbesserte Näherung für den Kondensatanteil aus (2.129) liefert. Es sei angemerkt, dass die Gleichung (2.158) für $N \rightarrow \infty$ in das Ergebnis (2.119) aus Abschnitt 2.2.8 übergeht.

2.4.5 Wärmekapazität

Berechnet man ausgehend vom vorläufigen großkanonischen Potential (2.113) die Wärmekapazität C_V in semiklassischer Näherung für den Fall des idealen Bose-Gases in einer harmonischen Falle für $D=3$ Dimensionen, so stellt man fest, dass bereits die erste durch die Endlichkeit des Systems hervorgerufene Korrektur der Wärmekapazität für $\mu \uparrow E_0$ divergiert [28, (4.254)]. Diese tritt also auf, wenn man sich von größeren Temperaturen kommend der kritischen Temperatur nähert. Im Folgenden wird gezeigt, dass diese Divergenz mit dem korrigierten großkanonischen Potential (2.128) nicht mehr auftritt. Zunächst beginnt man mit der inneren Energie (2.131), die durch die Funktion (A.1) ausgedrückt wird:

$$U = E_0 N_0 + D\hbar\omega \left[\frac{1}{2} \sum_{l=1}^D (-1)^{l+1} \binom{D}{l} I(l-\mu', b, D) + I(1-\mu', b, D+1) \right]. \quad (2.159)$$

Eine Entwicklung für kleine b führt in $D=3$ Dimensionen mit (A.23) auf die semiklassische Näherung:

$$\begin{aligned}
U = E_0 N_0 + \frac{3\hbar\omega}{b^4} & \left(\zeta_4(e^{-b(1-\mu')}) + b \left[\frac{7}{2}\zeta_3(e^{-b(1-\mu')}) - \frac{3}{2}\zeta_3(e^{-b(2-\mu')}) + \frac{1}{2}\zeta_3(e^{-b(3-\mu')}) \right] \right. \\
& + b^2 \left[\frac{39}{12}\zeta_2(e^{-b(1-\mu')}) - \frac{9}{4}\zeta_2(e^{-b(2-\mu')}) + \frac{3}{4}\zeta_2(e^{-b(3-\mu')}) \right] \\
& + b^3 \left\{ \frac{5}{2}\zeta_1(e^{-b(1-\mu')}) - \frac{3}{2}\zeta_1(e^{-b(2-\mu')}) + \frac{1}{2}\zeta_1(e^{-b(3-\mu')}) \right. \\
& \quad + \frac{1}{4}(\mu'-1)(\mu'-2) [\ln(1-\mu') - \psi_0(1-\mu')] + \frac{3}{4}\mu'(1-\mu') [\ln(2-\mu') - \psi_0(-\mu')] \\
& \quad + \frac{3}{4}\mu'(\mu'+1) [\ln(1-\mu') - \psi_0(-1-\mu')] + \frac{7}{12}\mu'^2 + \frac{35}{18}\mu' + \frac{269}{144} \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{6}\mu'(\mu'+1)(\mu'+2) [\ln(1-\mu') - \psi_0(-2-\mu')] \right\} \right) + \mathcal{O}(b^0). \tag{2.160}
\end{aligned}$$

Im Folgenden soll die Wärmekapazität bis zur ersten Ordnung berechnet werden. Dazu leitet man die innere Energie gemäß (2.16) nach der Temperatur ab und erhält für die Wärmekapazität bis zur ersten Ordnung

$$\begin{aligned}
C_V = E_0 \frac{\partial N_0}{\partial T} \Big|_{V,N} + \frac{3k_B}{b^3} & \left\{ 4\zeta_{4,1} + 3b \left(\frac{7}{2}\zeta_{3,1} - \frac{3}{2}\zeta_{3,2} + \frac{1}{2}\zeta_{3,3} \right) + b\zeta_{3,1}(1-\mu') \right. \\
& \left. + b \left[\zeta_{3,1} + b \left(\frac{7}{2}\zeta_{2,1} - \frac{3}{2}\zeta_{2,2} + \frac{1}{2}\zeta_{2,3} \right) \right] T \frac{\partial \mu'}{\partial T} \Big|_{V,N} \right\} + \dots, \tag{2.161}
\end{aligned}$$

wobei zur Abkürzung die speziellen polylogarithmischen Funktionen

$$\zeta_{\nu,a} = \zeta_{\nu}(e^{-b(a-\mu')}) \tag{2.162}$$

eingeführt worden sind. Zur weiteren Berechnung müssen die Hoch- und die Tieftemperaturphase unterschiedlich behandelt werden. Für $T \leq T_c$ ist das chemische Potential nicht von der Temperatur abhängig, so dass dann die zweite partielle Ableitung in (2.161) verschwindet. Die erste partielle Ableitung wird der Teilchenzahlgleichung (2.144) entnommen. Da das renormierte chemische Potential μ' für diesen Temperaturbereich ebenfalls gleich null ist, lassen sich die speziellen polylogarithmischen Funktionen für kleine b mithilfe der Robinson-Entwicklungen (2.146) und (2.147) weiter vereinfachen und man erhält

$$C_{V,T \leq T_c} = \frac{3k_B}{b^3} [4\zeta(4) + 3b\zeta(3)] + \dots \tag{2.163}$$

Verwendet man (2.155) und (2.157), so kann man die Wärmekapazität auf die kritische Temperatur beziehen. Dies ergibt bis zur Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1/3})$

$$C_{V,T \leq T_c} = 3Nk_B \left\{ \frac{4\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 + \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \left[3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 - \frac{6\zeta(4)\zeta(2)}{\zeta(3)^2} \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right] \right\} + \dots \quad (2.164)$$

Am Phasenübergang von tieferen Temperaturen kommend besitzt die Wärmekapazität den Wert

$$\lim_{T \uparrow T_c} C_{V,T \leq T_c} = 3Nk_B \left[\frac{4\zeta(4)}{\zeta(3)} + \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \left(3 - \frac{6\zeta(4)\zeta(2)}{\zeta(3)^2} \right) \right] + \dots, \quad (2.165)$$

während sie für $T \downarrow 0$ verschwindet. Im Hochtemperaturbereich ist die zweite innere Ableitung in (2.161) von null verschieden und kann berechnet werden, indem man die Teilchenzahlgleichung (2.144) nach der Temperatur ableitet. Dies ergibt aufgelöst

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu'}{\partial T} = & -\frac{1}{Tb} \left\{ 9\zeta_{3,1} - 9\zeta_{3,2} + 3\zeta_{3,3} + \left[\frac{9}{2}\zeta_{2,1} - \frac{9}{2}\zeta_{2,2} + \frac{3}{2}\zeta_{2,3} \right] + b \left[3\zeta_{2,1}(1-\mu') \right. \right. \\ & \left. \left. - 3\zeta_{2,2}(2-\mu') + \zeta_{2,3}(3-\mu') \right] \right\} \left\{ 3\zeta_{2,1} - 3\zeta_{2,2} + \zeta_{2,3} \right. \\ & \left. + b \left[\frac{9}{2}\zeta_{1,1} - \frac{9}{2}\zeta_{1,2} + \frac{3}{2}\zeta_{1,3} + f(\mu') \right] + b^2 (3\zeta_{0,1} - 3\zeta_{0,2} + \zeta_{0,3}) \right\}^{-1} + \mathcal{O}(b) \quad (2.166) \end{aligned}$$

mit der Abkürzung

$$\begin{aligned} f(\mu') = & \frac{5}{4} + \left(\frac{3}{2} - \mu' \right) \psi_0(1-\mu') + \frac{1}{2}(1-\mu')(2-\mu')\psi'_0(1-\mu') + \frac{3}{2} \left[-\psi_0(-1-\mu')(2\mu'+1) \right. \\ & \left. + \psi_0(-\mu')(2\mu'-1) + \mu'(1+\mu')\psi'_0(-1-\mu') + \mu'(1-\mu')\psi'_0(-\mu') \right] \\ & - \frac{1}{2} \ln(3-\mu')(3-2\mu') - \frac{(1-\mu')(2-\mu')}{2(3-\mu')} + \frac{3}{2} \left[\ln(1-\mu')(2\mu'+1) - \mu' \frac{1+\mu'}{1-\mu'} \right. \\ & \left. + \ln(2-\mu')(1-2\mu') - \mu' \frac{1-\mu'}{2-\mu'} \right]. \quad (2.167) \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Ordnung $\mathcal{O}(b^2)$ in der zweiten Klammer von (2.166) noch nicht vernachlässigt, da die Funktionen $\zeta_{0,a}$ im Limes $\mu' \uparrow 0$ proportional zu $1/b$ sind und deshalb im Allgemeinen nicht weggelassen werden können. Setzt man (2.166) in die Wärmekapazität (2.161), entwickelt die zweite Klammer in (2.166) und berücksichtigt, dass die erste partielle Ableitung in der Hochtemperaturphase verschwindet, so erhält man für die

Wärmekapazität schließlich:

$$\begin{aligned}
C_{V,T>T_c} = & \frac{3k_B}{b^3} \left(4\zeta_{4,1} + b \left[\frac{21}{2}\zeta_{3,1} - \frac{9}{2}\zeta_{3,2} + \frac{3}{2}\zeta_{3,3} + \zeta_{3,1}(1-\mu') \right] \right. \\
& - \frac{3\zeta_{3,1}}{3\zeta_{2,1} - 3\zeta_{2,2} + \zeta_{2,3}} \left\{ 3\zeta_{3,1} - 3\zeta_{3,2} + \zeta_{3,3} + b(3\zeta_{2,1} - 3\zeta_{2,2} + \zeta_{2,3}) \right. \\
& \left. \left. + b \left[\zeta_{2,1}(1-\mu') - \zeta_{2,2}(2-\mu') + \zeta_{2,3} \left(1 - \frac{\mu'}{3} \right) \right] \right. \right. \\
& \left. - \frac{3\zeta_{3,1} - 3\zeta_{3,2} + \zeta_{3,3}}{3\zeta_{2,1} - 3\zeta_{2,2} + \zeta_{2,3}} b \left[\frac{9}{2}\zeta_{1,1} - \frac{9}{2}\zeta_{1,2} + \frac{3}{2}\zeta_{1,3} + f(\mu') + b(3\zeta_{0,1} - 3\zeta_{0,2} + \zeta_{0,3}) \right] \right. \\
& \left. \left. + \frac{3\zeta_{3,1} - 3\zeta_{3,2} + \zeta_{3,3}}{\zeta_{3,1}} b \left(\frac{7}{2}\zeta_{2,1} - \frac{3}{2}\zeta_{2,2} + \frac{1}{2}\zeta_{2,3} \right) \right\} \right) + \mathcal{O}(b^{-1}). \quad (2.168)
\end{aligned}$$

Diese semiklassische Näherung der Wärmekapazität ist bis zur Ordnung $\mathcal{O}(b^{-2})$ exakt. Allerdings befinden sich in der Gleichung noch höhere Potenzen von b , da die speziellen polylogarithmischen Funktionen nicht für große chemische Potentiale entwickelt werden können. Im Folgenden wird gezeigt, dass die Wärmekapazität (2.168) nicht am Phasenübergang divergiert im Gegensatz zu der entsprechenden semiklassischen Näherung des unkorrigierten Potentials. Benötigt wird dazu die Rekursionsrelation für die Ableitung der Digammafunktion $\psi'_0(z)$, die in $f(\mu')$ auftritt [29, (8D.8)]:

$$\psi'_0(z) = \frac{-1}{(z-1)^2} + \psi'_0(z-1), \quad \psi'_0(1) = \zeta(2). \quad (2.169)$$

Führt man in (2.168) den Limes $\mu' \uparrow 0$ durch, so erhält man mit (2.146)–(2.150), (A.16), (A.17), (2.169) und $b=b_c$ schließlich

$$\begin{aligned}
\lim_{T \downarrow T_c} C_{V,T>T_c} = & \frac{3k_B}{b_c^3} \left(4\zeta(4) - 3\frac{\zeta(3)^2}{\zeta(2)} + b_c \left\{ -3\zeta(3) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{3\zeta(3)^2}{\zeta(2)^2} \left[-\frac{3}{2} \ln b_c + \zeta(2) + \frac{5}{4} + \frac{3}{2}\gamma \right] \right\} \right) + \dots \quad (2.170)
\end{aligned}$$

Diesen Ausdruck kann man mithilfe von (2.157) umschreiben, dies ergibt

$$\begin{aligned}
\lim_{T \downarrow T_c} C_{V,T>T_c} = & 3Nk_B \left(4\frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} - 3\frac{\zeta(3)}{\zeta(2)} + \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \left\{ \frac{3}{2} - 6\frac{\zeta(4)\zeta(2)}{\zeta(3)^2} \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{3\zeta(3)}{\zeta(2)^2} \left[-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right) + \frac{5}{4} + \zeta(2) + \frac{3}{2}\gamma \right] \right\} \right) + \dots \quad (2.171)
\end{aligned}$$

Es stellt sich heraus, dass auch die Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1/3})$ endlich ist, auffällig sind die logarithmische Abhängigkeit und die Eulersche Zahl γ , die in der ersten Ordnung auftreten.

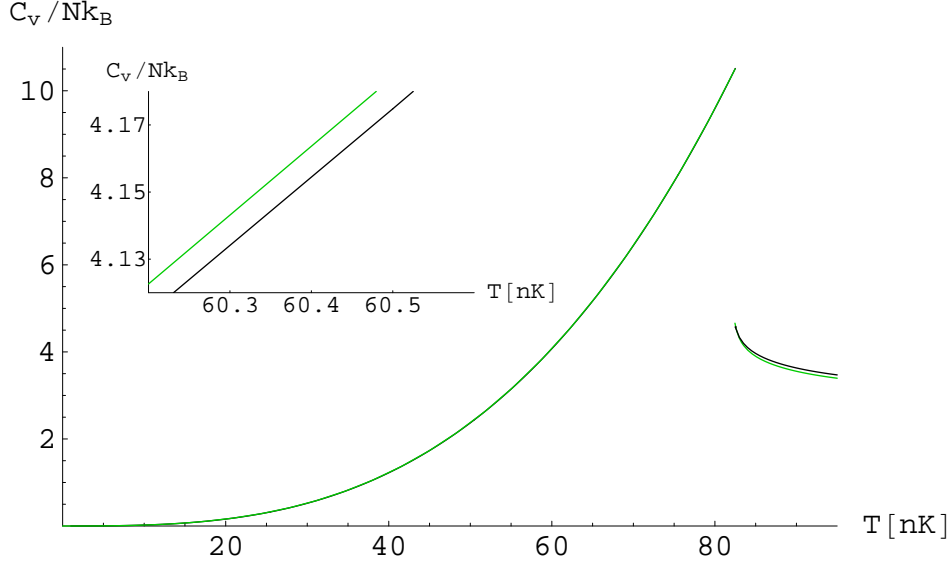


Abbildung 2.10: Wärmekapazität aufgetragen gegen die Temperatur für $N=10^5$ Teilchen und $\omega=2\pi\cdot 40$ Hz. Die schwarze Kurve stellt die korrigierte Wärmekapazität nach (2.132) und (2.136) dar, die grüne Kurve entspricht deren semiklassischer Näherung nach (2.164) und (2.168).

Aus den vorangegangenen Berechnungen zur Wärmekapazität lässt sich direkt die Größe des Sprunges der Wärmekapazität am Phasenübergang in semiklassischer Näherung bestimmen. Dazu bildet man die Differenz von (2.165) und (2.171):

$$\begin{aligned} & \lim_{T \uparrow T_c} C_{V, T < T_c} - \lim_{T \downarrow T_c} C_{V, T > T_c} \quad (2.172) \\ &= 3Nk_B \left[\frac{3\zeta(3)}{\zeta(2)} - \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{3\zeta(3)}{\zeta(2)^2} \left(-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right) + \frac{5}{4} + \zeta(2) + \frac{3}{2} \gamma - \frac{\zeta(2)^2}{2\zeta(3)} \right) \right] + \dots \end{aligned}$$

In Abbildung 2.10 wird die korrigierte Wärmekapazität mit deren semiklassischer Näherung verglichen. Unterhalb des kritischen Punktes liegt die semiklassische Näherung oberhalb der exakten Kurve und oberhalb des kritischen Punktes unterhalb der exakten Kurve. Man stellt fest, dass die Diskrepanz oberhalb von T_c größer ist als unterhalb. Dies liegt daran, dass Gleichung (2.168) zwar alle Beiträge bis zur ersten Ordnung enthält, allerdings auch Teile höherer Ordnungen.

2.4.6 Vergleich mit der Literatur

In diesem Kapitel wurde eine Theorie vorgestellt, die es prinzipiell erlaubt, analytische Näherungen der thermodynamischen Größen eines idealen Bose-Gases in einer harmoni-

schen Falle beliebig genau zu berechnen. Durchgeführt wurde dies für $D=3$ Dimensionen für die kritische Temperatur, die Temperaturabhängigkeit des Kondensatanteils sowie der Wärmekapazität. In den Arbeiten von S. Grossmann und M. Holthaus [5] sowie von W. Ketterle und N. J. van Druten [6] werden die Teilchengleichung und die kritische Temperatur für diesen Fall jeweils bis zur ersten Ordnung semiklassisch entwickelt, während H. Kleinert letztere bis zur zweiten Ordnung bestimmt [24]. Die Gleichungen (2.144) und (2.158) stellen insofern Verbesserungen dar, als dass diese auch die zweite Ordnung beinhalten, während die kritische Temperatur (2.152) dem Ergebnis von H. Kleinert entspricht. In Abschnitt 2.4.5 wird die Wärmekapazität korrekt bis zur ersten Ordnung semiklassisch entwickelt und es wird insbesondere gezeigt, dass diese am kritischen Punkt nicht divergiert. V. I. Yukalov stellt in der Arbeit [30] eine Theorie vor, die es erlaubt, Bose-Gase in harmonischen Potentialen auch für $D \leq 3$ Dimensionen semiklassisch beschreiben zu können, dieser Ansatz ist allerdings auf die führende Ordnung bezüglich der Teilchenzahl beschränkt. Prinzipiell ist die hier vorgestellte Theorie auch für $D=1, 2$ Dimensionen anwendbar, es müsste also möglich sein, die Ergebnisse von V. I. Yukalov mit dieser Theorie zu vergleichen.

2.4.7 Vielteilchen-Green-Funktion des harmonischen Oszillators

In Analogie zu Abschnitt 2.3 soll auch die Vielteilchen-Green-Funktion (2.100) für das dreidimensionale harmonische Potential korrigiert werden. Dies geschieht dadurch, dass man den Beitrag des Grundzustandes zu den Funktionen (2.98) in der unkorrigierten Vielteilchen-Green-Funktion (2.100) abzieht:

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta(\tau_1 - \tau_2 + n\hbar\beta) \left[\langle \mathbf{x}_1, \tau_1 - \tau_2 + n\hbar\beta | \mathbf{x}_2, 0 \rangle \Big|_{E_n \rightarrow E_n - \mu} - \psi_0(\mathbf{x}_1) \psi_0^*(\mathbf{x}_2) e^{-(E_0 - \mu)(\tau_1 - \tau_2 + n\hbar\beta)/\hbar} \right]. \quad (2.173)$$

Die Zeitentwicklungsamplitude für den harmonischen Oszillator in drei Dimensionen lautet [24, (2.156)]

$$\langle \mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2 \rangle = \left[\frac{M\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t_1 - t_2)} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{M\omega}{2i\hbar \sin \omega(t_1 - t_2)} [(\mathbf{x}_1^2 + \mathbf{x}_2^2) \cos \omega(t_1 - t_2) - 2\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2]}. \quad (2.174)$$

Durch eine Wick-Rotation $t = -i\tau$ geht diese über in die Imaginärzeitentwicklungsamplitude

$$\langle \mathbf{x}_1, \tau_1 | \mathbf{x}_2, \tau_2 \rangle = \left[\frac{M\omega}{2\pi\hbar \sinh \omega(\tau_1 - \tau_2)} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar \sinh \omega(\tau_1 - \tau_2)} [(\mathbf{x}_1^2 + \mathbf{x}_2^2) \cosh \omega(\tau_1 - \tau_2) - 2\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2]} . \quad (2.175)$$

Da $\tau = \tau_1 - \tau_2$ jeden Wert aus dem Intervall $[-\hbar\beta, \hbar\beta]$ annehmen kann, bleiben bei der Auswertung der Summe in (2.173) aufgrund der Thetafunktion für $\tau > 0$ alle Summanden mit $n \geq 0$ über, während für $\tau < 0$ nur die Summanden mit $n > 0$ beitragen. Aufgrund der Zeitordnung muss man für gleiche Zeiten folgenden Limes benutzen [23]:

$$\lim_{\tau \nearrow 0} G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, 0) = G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_1, 0; \mathbf{x}_2, 0) . \quad (2.176)$$

Als weitere wichtige Eigenschaft der Green-Funktion sei hier angemerkt, dass man aus dieser die Teilchenzahl bestimmen kann über die Gleichung

$$N = N_0 + \int d^D x \lim_{\tau \nearrow 0} G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, 0) . \quad (2.177)$$

Die Green-Funktion wird mit den vorangegangenen Überlegungen zu

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, 0) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] \left[\langle \mathbf{x}_1, \tau + n\hbar\beta | \mathbf{x}_2, 0 \rangle \Big|_{E_n \rightarrow E_n - \mu} - \psi_0(\mathbf{x}_1) \psi_0^*(\mathbf{x}_2) e^{-(E_0 - \mu)(\tau + n\hbar\beta)/\hbar} \right] . \quad (2.178)$$

Beachtet man noch die Wellenfunktion des Grundzustandes in $D=3$ Dimensionen

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} \mathbf{x}^2} , \quad (2.179)$$

so erhält man schließlich

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, 0) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\mu(\tau + n\hbar\beta)/\hbar} \times \left(\frac{e^{\left\{ -\frac{M\omega}{2\hbar \sinh \omega(\tau + n\hbar\beta)} [(\mathbf{x}_1^2 + \mathbf{x}_2^2) \cosh \omega(\tau + n\hbar\beta) - 2\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2] \right\}}}{[2 \sinh \omega(\tau + n\hbar\beta)]^{\frac{3}{2}}} - e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} (\mathbf{x}_1^2 + \mathbf{x}_2^2)} e^{-E_0(\tau + n\hbar\beta)/\hbar} \right) . \quad (2.180)$$

Als nächstes soll die semiklassische Näherung für die korrigierte Green-Funktion des isotropen harmonischen Oszillators berechnet werden. Da aber eine semiklassische Näherung

analog zu Anhang A bisher nicht durchgeführt werden konnte, können nur die beiden führenden Ordnungen der Green-Funktion bezüglich des Kleinheitsparameters $b=\hbar\omega\beta$ exakt angegeben werden. Man erhält dadurch eine Näherung, die die richtige Teilchenzahlgleichung (2.144) bis zur Ordnung $\mathcal{O}((\hbar\omega\beta)^{-2})$ liefert.

Die Koordinaten $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ der Green-Funktion sollen für die folgende Rechnung mithilfe der Transformation

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_s + \mathbf{x}_r/2, \quad \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_s - \mathbf{x}_r/2 \quad (2.181)$$

in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten überführt werden. Dies ergibt

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\mu(\tau+n\hbar\beta)/\hbar} \quad (2.182)$$

$$\times \left(\frac{e^{\left\{ -\frac{M\omega}{2\hbar} \frac{1}{\sinh \omega(\tau+n\hbar\beta)} [(2\mathbf{x}_s^2 + \mathbf{x}_r^2)/2] \cosh(\omega(\tau+n\hbar\beta)) - 2\mathbf{x}_s^2 + \mathbf{x}_r^2/2 \right\}}}{[2 \sinh \omega(\tau + n\hbar\beta)]^{\frac{3}{2}}} - e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}(2\mathbf{x}_s^2 + \mathbf{x}_r^2/2)} e^{-E_0(\tau+n\hbar\beta)/\hbar} \right).$$

Man kann diesen Ausdruck noch etwas vereinfachen, indem man die trigonometrischen Formeln

$$\tanh\left(\frac{z}{2}\right) = \frac{\cosh(z) - 1}{\sinh(z)}, \quad \coth\left(\frac{z}{2}\right) = \frac{\cosh(z) + 1}{\sinh(z)} \quad (2.183)$$

in $G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau)$ einsetzt:

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\mu(\tau+n\hbar\beta)/\hbar} \quad (2.184)$$

$$\times \left\{ \frac{e^{-\frac{M\omega}{\hbar} \mathbf{x}_s^2 \tanh \omega(\tau+n\hbar\beta)/2} e^{-\frac{M\omega}{4\hbar} \mathbf{x}_r^2 \coth \omega(\tau+n\hbar\beta)/2}}{[2 \sinh \omega(\tau + n\hbar\beta)]^{\frac{3}{2}}} - e^{-\frac{M\omega}{2\hbar}(2\mathbf{x}_s^2 + \mathbf{x}_r^2/2)} e^{-E_0(\tau+n\hbar\beta)/\hbar} \right\}.$$

Im nächsten Schritt führt man eine Fourier-Transformation bezüglich der Schwerpunktkoordinate durch,

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \int d^3x_s e^{-i\mathbf{p}_s \mathbf{x}_s/\hbar} G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau), \quad (2.185)$$

und erhält dadurch

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu(\tau+n\hbar\beta)/\hbar} \quad (2.186)$$

$$\times \left\{ \frac{e^{-\frac{1}{4M\hbar\omega} \mathbf{p}_s^2 \coth \omega(\tau+n\hbar\beta)/2} e^{-\frac{M\omega}{4\hbar} \mathbf{x}_r^2 \coth \omega(\tau+n\hbar\beta)/2}}{[2 \sinh \omega(\tau + n\hbar\beta)/2]^3} - e^{-\frac{M\omega}{4\hbar} \mathbf{x}_r^2} e^{-\frac{1}{4M\hbar\omega} \mathbf{p}_s^2} e^{-E_0(\tau+n\hbar\beta)/\hbar} \right\}.$$

Dieses Ergebnis kann mit den Abkürzungen $b=\hbar\omega\beta$, $\tau'=\tau/\hbar\beta$ und $\mu'=(\mu-E_0)/\hbar\omega$ vereinfacht werden:

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu' b(\tau'+n)} \times \left\{ \frac{e^{-\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 \coth b(\tau'+n)/2} e^{-\frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2 \coth b(\tau'+n)/2}}{[1 - e^{-b(\tau'+n)}]^3} - e^{-\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2} e^{-\frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2} \right\}. \quad (2.187)$$

Zur weiteren Berechnung wird die Green-Funktion umgeformt zu

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu' b(\tau'+n)} \left(\left\{ \frac{1}{[1 - e^{-b(\tau'+n)}]^3} - 1 \right\} \times e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right) \coth b(\tau'+n)/2} + e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right) \coth b(\tau'+n)/2} - e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right)} \right). \quad (2.188)$$

Die zwei Terme in der geschweiften Klammer werden auf einen Hauptnenner gebracht:

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu' b(\tau'+n)} \times \left(\left\{ \frac{3e^{-b(\tau'+n)} - 3e^{-2b(\tau'+n)} + e^{-3b(\tau'+n)}}{[1 - e^{-b(\tau'+n)}]^3} \right\} e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right) \coth b(\tau'+n)/2} + e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right) \coth b(\tau'+n)/2} - e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right)} \right). \quad (2.189)$$

Prinzipiell könnte man die Summe wie in Abschnitt 2.4.1 mit der Euler-MacLaurin-Formel berechnen. Das dabei entstehende Integral wäre von der Ordnung $\mathcal{O}(b^{-1})$. Da aber bisher für dieses Integral keine analytische Lösung gefunden wurde, soll die Green-Funktion nur bis zur Ordnung $\mathcal{O}(b^{-2})$ entwickelt werden:

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu' b(\tau'+n)} \times \left[3e^{-b(\tau'+n)} - 3e^{-2b(\tau'+n)} + e^{-3b(\tau'+n)} \right] \left[\frac{1}{b^3(\tau'+n)^3} + \frac{3}{2} \frac{1}{b^2(\tau'+n)^2} \right] \times e^{-\left(\frac{1}{4M\hbar\omega}\mathbf{p}_s^2 + \frac{M\omega}{4\hbar}\mathbf{x}_r^2\right) \coth b(\tau'+n)/2} + \mathcal{O}(b^{-1}). \quad (2.190)$$

Die letzten beiden Terme in (2.189) wurden vernachlässigt, da sie von der Ordnung $\mathcal{O}(b^0)$ und höher sind. Eine Fourier-Transformation auf die Schwerpunktskoordinate,

$$G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau) = \int \frac{d^3 p_s}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}_s \mathbf{x}_s / \hbar} G_{\text{kor.}}(\mathbf{p}_s, \mathbf{x}_r, \tau), \quad (2.191)$$

führt auf

$$\begin{aligned}
G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau) &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu' b(\tau'+n)} \left(\frac{M\omega \tanh(b(\tau'+n)/2)}{\pi \hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \\
&\times \left[3e^{-b(\tau'+n)} - 3e^{-2b(\tau'+n)} + e^{-3b(\tau'+n)} \right] \left[\frac{1}{b^3(\tau'+n)^3} + \frac{3}{2} \frac{1}{b^2(\tau'+n)^2} \right] \\
&\times e^{-\frac{M\omega}{\hbar} \mathbf{x}_s^2 \tanh b(\tau'+n)/2} e^{-\frac{M\omega}{4\hbar} \mathbf{x}_r^2 \coth b(\tau'+n)/2} + \mathcal{O}(b^{-1}). \quad (2.192)
\end{aligned}$$

Entwickelt man die Hyperbelfunktionen für kleine b bis zur führenden Ordnung, so erhält man schließlich für die Vielteilchen-Green-Funktion in semiklassischer Näherung

$$\begin{aligned}
G_{\text{kor.}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau) &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] e^{\mu' b(\tau'+n)} \left(\frac{M\omega}{2\pi \hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \\
&\times \left[3e^{-b(\tau'+n)} - 3e^{-2b(\tau'+n)} + e^{-3b(\tau'+n)} \right] \left[\frac{1}{b^{\frac{3}{2}}(\tau'+n)^{\frac{3}{2}}} + \frac{3}{2} \frac{1}{b^{\frac{1}{2}}(\tau'+n)^{\frac{1}{2}}} \right] \\
&\times e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} [\mathbf{x}_s^2 b(\tau'+n) + \frac{\mathbf{x}_r^2}{b(\tau'+n)}]} + \mathcal{O}(b^{-1}). \quad (2.193)
\end{aligned}$$

Die Teilchenzahl N ergibt sich dann mit (2.177) und (2.193) zu

$$\begin{aligned}
N &= N_0 + \frac{1}{b^3} \left[3\zeta_3(e^{b(\mu'-1)}) - 3\zeta_3(e^{b(\mu'-2)}) + \zeta_3(e^{b(\mu'-3)}) \right] \\
&+ \frac{1}{b^2} \left[\frac{9}{2}\zeta_2(e^{b(\mu'-1)}) - \frac{9}{2}\zeta_2(e^{b(\mu'-2)}) + \frac{3}{2}\zeta_2(e^{b(\mu'-3)}) \right] + \mathcal{O}(b^{-1}). \quad (2.194)
\end{aligned}$$

Vergleicht man dieses Ergebnis mit (2.144), so sieht man, dass die semiklassisch genäher-te korrigierte Green-Funktion die richtige semiklassische Näherung für die Teilchenzahl liefert.

Entwickelt man in (2.193) die zweite Zeile bezüglich b bis zur führenden Ordnung, so erhält man

$$\begin{aligned}
G_{\text{sc}}(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_r, \tau) &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \theta(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} \theta(-\tau) \right] \frac{e^{\mu' b(\tau'+n)}}{b^{\frac{3}{2}}(\tau'+n)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{M\omega}{2\pi \hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{M\omega}{2\hbar} [\mathbf{x}_s^2 b(\tau'+n) + \frac{\mathbf{x}_r^2}{b(\tau'+n)}]} \\
&+ \mathcal{O}(b^{-2}). \quad (2.195)
\end{aligned}$$

Dies ist die schon bekannte semiklassische Näherung des Vielteilchen-Propagators für den harmonischen Oszillator [28, 4.8]. Berechnet man mit diesem Propagator die Teilchenzahl über (2.177), so führt dies auf

$$N = N_0 + \frac{1}{b^3} \zeta_3(e^{b\mu'}) + \mathcal{O}(b^{-2}). \quad (2.196)$$

Dieses Ergebnis entspricht der führenden Ordnung von (2.115).

Kapitel 3

Ungeordnetes Bose-Gas in harmonischer Falle

In diesem Kapitel wird untersucht, wie sich die kritische Temperatur eines bosonischen Quantengases in einer isotropen dreidimensionalen harmonischen Falle im thermodynamischen Limes unter dem Einfluss eines schwachen Unordnungspotentials in führender Ordnung verschiebt. Beschrieben wird das Quantengas dabei durch ein effektives Potential, da dieses erlaubt, schwache Unordnungspotentiale störungstheoretisch zu behandeln. In Abschnitt 2.3 wurde bereits gezeigt, dass das effektive Potential für große Teilchenzahlen eine gute Näherung des exakten großkanonischen Potentials darstellt. Da das Bose-Gas verdünnt ist, kann auch der Einfluss der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung auf die kritische Temperatur störungstheoretisch behandelt und vernachlässigt werden, da beide Effekte additiv sind [7]. Die durch eine repulsive Wechselwirkung entstehende Verschiebung der kritischen Temperatur ist negativ, da eine abstoßende Wechselwirkung die Dichte im Zentrum der Falle verringert und somit eine niedrigere Temperatur benötigt wird, um ein Bose-Einstein-Kondensat zu erzeugen. Entsprechend erwartet man, dass die unordnungsgemittelte Verschiebung der kritischen Temperatur positiv ist, da Unordnung als eine attraktive effektive Wechselwirkung verstanden werden kann [19].

3.1 Zufallspotential

Die Unordnung wird im Folgenden durch das Zufalls- bzw. Unordnungspotential $U(\mathbf{x})$ beschrieben. Man betrachtet ein Ensemble von Realisierungen identischer Systeme, die jeweils durch ein Unordnungspotential gestört werden, und definiert dazu einen Ensemblemittelwert [28, Kapitel 9]. Mit diesem ist es möglich, einen gemittelten Effekt der Unordnung auf das System zu beschreiben, der aber bei jeder einzelnen Realisierung unterschiedlich ausfällt. Im Rahmen dieses Modells reicht es aus, das Zufallspotential durch einige wenige Eigenschaften zu charakterisieren. Zuerst nimmt man an, dass für das

Zufallspotential $U(\mathbf{x})$ eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[U]$ vorliegt, deren genaue Form für die Untersuchungen in dieser Arbeit irrelevant ist. Im Folgenden soll lediglich angenommen werden, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[U]$ von unten beschränkt und normierbar ist. Der Erwartungswert wird mithilfe der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[U]$ definiert:

$$\overline{\bullet} = \int \mathcal{D}U \bullet P[U]. \quad (3.1)$$

Das Funktionalintegral besteht aus einem unendlichen Produkt gewöhnlicher Integrale, bei denen an jedem Raumpunkt über alle möglichen Werte des Zufallspotentials $U(\mathbf{x})$ summiert wird:

$$\int \mathcal{D}U = \prod_{\mathbf{x}} \int_{-\infty}^{\infty} dU(\mathbf{x}). \quad (3.2)$$

Das Funktionalintegralmaß (3.2) wählt man dabei so, dass die Normierung $\bar{1} = 1$ gewährleistet ist. Der Erwartungswert des Unordnungspotentials kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit gleich null gewählt werden:

$$\overline{U(\mathbf{x})} = 0. \quad (3.3)$$

Falls der Ensemblemittelwert von null verschieden ist, kann dieser Fall durch eine Renormierung des chemischen Potentials auf (3.3) zurückgeführt werden. Die Korrelationsfunktion hängt nur von der Differenz der Raumpunkte ab, d. h.

$$\overline{U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)} = R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (3.4)$$

und fällt mit einer typischen Längenskala ϵ ab. Beispielsweise tritt eine Lorentz-Korrelation in Atom-Chips auf [31]. Verwendet werden soll in dieser Arbeit eine Gaußsche Korrelationsfunktion der Form

$$R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = R \frac{e^{-(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2 / 2\epsilon^2}}{(2\pi\epsilon^2)^{D/2}} \quad (3.5)$$

mit der Korrelationslänge ϵ , da eine solche Korrelation die folgenden Rechnungen wesentlich vereinfacht. Betrachtet man eine Realisierung mit der Korrelation (3.5) über ein größeres Raumgebiet, so entsteht durch die Zufallsverteilung eine aus Tälern und Hügeln bestehende Potentialverteilung (siehe Abb. 3.1). Die mittlere Ausdehnung eines solchen Tales kann mit der Korrelationslänge ϵ identifiziert werden. Der Parameter R hat die Dimension $[J^2 m^D]$ und kann als ein Maß für die Stärke der Unordnung angesehen werden.

3.2 Hintergrund-Methode

In diesem Abschnitt soll der Einfluss eines schwachen Unordnungspotentials auf das effektive Potential des vorliegenden Systems berechnet werden. Das effektive Potential

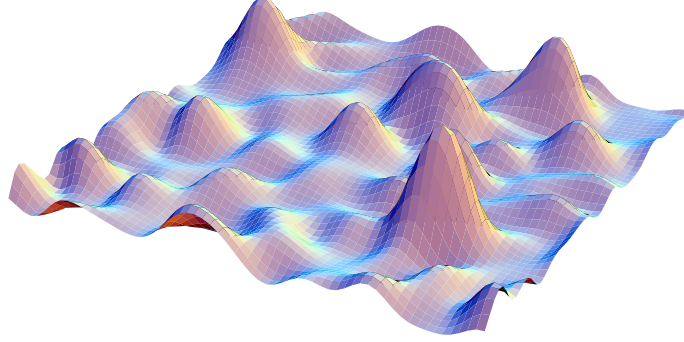


Abbildung 3.1: Beispiel für ein zweidimensionales Unordnungspotential, das durch Laser-Speckles erzeugt wird.

wird mithilfe der Hintergrund-Methode berechnet, das Unordnungspotential soll dabei störungstheoretisch behandelt werden. Zunächst wird die Zustandssumme entsprechend (2.44) als ein Funktionalintegral definiert:

$$Z = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (3.6)$$

Die dazugehörige Wirkung entspricht (2.58) mit dem Unterschied, dass zu dem Fallenpotential $V(\mathbf{x})=M\omega^2\mathbf{x}^2/2$ noch das Unordnungspotential $U(\mathbf{x})$ hinzuaddiert wird:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (3.7)$$

Normalerweise müsste man das effektive Potential wie in Abschnitt 2.2.3 mithilfe einer Legendre-Transformation bezüglich zusätzlicher Stromfelder bestimmen. Ein wesentlich effizienteres Mittel, das effektive Potential zu berechnen, stellt aber die Hintergrund-Methode dar. Im Rahmen dieses Ansatzes werden die Felder $\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \psi(\mathbf{x}, \tau)$ aufgeteilt in Hintergrund und Fluktuationen [28]:

$$\psi^*(\mathbf{x}, \tau) = \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \quad \psi(\mathbf{x}, \tau) = \Psi(\mathbf{x}, \tau) + \delta\psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (3.8)$$

Die Hintergrund-Felder werden dabei mit den Feldmittelwerten (2.63) identifiziert. Eingeführt wurde die Hintergrund-Methode zuerst von Cécile DeWitt-Morette im Kontext der Quantenmechanik zur Herleitung des semiklassischen Propagators, wo der Hintergrund den klassischen Pfad beschreibt [32]. Weiterentwickelt wurde die Theorie von Bryce DeWitt, um im Rahmen der Quantengravitation auch einen nichtklassischen Hintergrund

beschreiben zu können [33].

Die Zustandssumme (3.6) wird durch (3.8) zu einem Funktionalintegral über die Fluktuationen:

$$Z[\Psi^*, \Psi] = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi; \delta\psi^*, \delta\psi]/\hbar}. \quad (3.9)$$

Die Wirkung (3.7) zerfällt unter der Zerlegung (3.8) in einzelne Beiträge $\mathcal{A}^{(n)}[\delta\psi^*, \delta\psi]$, bei denen die Fluktuationen $\delta\psi^*(\mathbf{x}, \tau), \delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ zur n -ten Potenz auftreten:

$$\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] = \mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(1)}[\delta\psi^*, \delta\psi] + \mathcal{A}^{(2)}[\delta\psi^*, \delta\psi]. \quad (3.10)$$

Der erste Beitrag entspricht der Wirkung (3.7), ausgewertet an den Hintergrund-Feldern Ψ^*, Ψ ,

$$\mathcal{A}^{(0)}[\delta\psi^*, \delta\psi] = \mathcal{A}[\Psi^*, \Psi], \quad (3.11)$$

während im Rahmen der Hintergrund-Methode der zweite Beitrag, der linear in den Fluktuationen ist, nicht berücksichtigt wird, da der Hintergrund einem Extremum des Integranden entspricht [28]:

$$\mathcal{A}^{(1)}[\delta\psi^*, \delta\psi] = 0. \quad (3.12)$$

Zum Beweis von (3.11) und (3.12) verwenden wir nun die Abkürzungen

$$G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G_{12}, \quad G_0^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G_{12}^{-1}, \quad U(\mathbf{x}_1) = U_1, \\ \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int d^3x_1 = \int_1, \quad \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) = \psi_1, \quad \delta\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) = \delta\psi_1, \quad \Psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) = \Psi_1, \quad (3.13)$$

wobei $G_0^{-1}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2)$ den Integralkern (2.60) beschreibt. Man betrachtet dann das erzeugende Funktional

$$Z[j^*, j] = e^{-\beta\Omega[j^*, j]} = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j]/\hbar} \quad (3.14)$$

mit der Wirkung

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi, j^*, j] = \mathcal{A}[\psi^*, \psi] - \int_1 (\psi_1^* j_1 + \psi_1 j_1^*). \quad (3.15)$$

Setzt man hinter dem ersten Gleichheitszeichen von (3.14) den allgemeinen Ausdruck für das effektive Potential (2.65) ein, so erhält man

$$e^{-\beta\left\{\Gamma[\Psi^*, \Psi] - \int_1 (\Psi_1^* j_1 + \Psi_1 j_1^*)/\hbar\right\}} = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\left\{\mathcal{A}[\psi^*, \psi] - \int_1 (\psi_1^* j_1 + \psi_1 j_1^*)\right\}/\hbar}. \quad (3.16)$$

Diese Gleichung wird umgeformt, indem die Legendre-Identität (2.66) für die Ströme j^*, j eingesetzt wird:

$$e^{-\beta\left(\Gamma[\Psi^*, \Psi] - \int_1 \left\{\Psi_1^* \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} + \Psi_1 \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1}\right\}\right)} \\ = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\left(\mathcal{A}[\psi^*, \psi] - \hbar\beta \int_1 \left\{\psi_1^* \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} + \psi_1 \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1}\right\}\right)/\hbar}. \quad (3.17)$$

Die Bose-Felder werden jetzt nach (3.8) in Hintergrund und Fluktuationen zerlegt, so dass das Funktionalintegral über die Bose-Felder zu einem Funktionalintegral über die Fluktuationen wird:

$$e^{-\beta\left(\Gamma[\Psi^*, \Psi] - \int_1 \left\{ \Psi_1^* \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} + \Psi_1 \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1} \right\}\right)}$$

$$= \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\left(\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] - \hbar\beta \int_1 \left\{ (\Psi_1^* + \delta\psi_1^*) \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} + (\Psi_1 + \delta\psi_1) \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1} \right\}\right)}/\hbar}. \quad (3.18)$$

Einige Terme können gekürzt werden und man erhält so die folgende Bestimmungsgleichung für das effektive Potential:

$$e^{-\beta\Gamma[\Psi^*, \Psi]} = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\left(\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] - \hbar\beta \int_1 \left\{ \delta\psi_1^* \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} + \delta\psi_1 \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1} \right\}\right)}/\hbar}. \quad (3.19)$$

Diese Gleichung kann näherungsweise ausgewertet werden, indem die Wirkung in eine funktionale Taylor-Reihe bezüglich der Fluktuationen entwickelt wird:

$$\mathcal{A}[\Psi^* + \delta\psi^*, \Psi + \delta\psi] = \mathcal{A}[\Psi^*, \Psi] + \int_1 \frac{\delta\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} \delta\psi_1^* + \int_1 \frac{\delta\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1} \delta\psi_1 + \dots \quad (3.20)$$

Diese Entwicklung setzt man in (3.19) ein und erhält

$$e^{-\beta\Gamma[\Psi^*, \Psi]} = e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]/\hbar} \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi$$

$$\times e^{-\left(\int_1 \left\{ \frac{\delta\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} - \hbar\beta \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1^*} \right\} \delta\psi_1^* + \int_1 \left\{ \frac{\delta\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1} - \hbar\beta \frac{\delta\Gamma[\Psi^*, \Psi]}{\delta\Psi_1} \right\} \delta\psi_1 + \dots\right)}/\hbar}. \quad (3.21)$$

Dieser Gleichung kann $\Gamma[\Psi^*, \Psi]$ iterativ entnommen werden. Die führende Ordnung lautet

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = \frac{\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]}{\hbar\beta} + \dots \quad (3.22)$$

Setzt man dieses Ergebnis auf der rechten Seite von (3.21) ein, so erkennt man, dass die Terme linear bezüglich der Fluktuationen verschwinden. Damit sind die Aussagen (3.11) und (3.12) bewiesen. Es sei angemerkt, dass die in dieser Rechnung vernachlässigten Beiträge höherer Ordnung bezüglich der Fluktuationen gerade den 1-Teilchen-irreduziblen Vakuumdiagrammen entsprechen [24, 34].

3.3 Effektives Potential für schwache Unordnung

Für die großkanonische Zustandssumme (3.6) folgt mit der Zerlegung (3.8) sowie (2.60) und (3.12)

$$Z = e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]/\hbar} \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi e^{-\int_{12} \delta\psi_1^* G_{12}^{-1} \delta\psi_2 - \int_1 U_1 \delta\psi_1^* \delta\psi_1}/\hbar}. \quad (3.23)$$

Die Exponentialfunktion in (3.23) kann für schwache Unordnungspotentiale bis zur zweiten Ordnung entwickelt werden:

$$Z = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi \left(1 - \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \delta\psi_1^* \delta\psi_1 + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \delta\psi_1^* \delta\psi_1 \delta\psi_2^* \delta\psi_2 + \dots \right) \times e^{-\int_{12} \delta\psi_1^* G_{12}^{-1} \delta\psi_2} e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]/\hbar}. \quad (3.24)$$

Für die Funktionalableitung eines Integralkerns nach einem anderen Integralkern gilt [35]

$$\frac{\delta G_{12}^{-1}}{\delta G_{34}^{-1}} = \delta_{13} \delta_{24}. \quad (3.25)$$

Dies ermöglicht es, die Fluktuationen im Integranden des Funktionalintegrals (3.24) durch eine Funktionalableitung nach dem Integralkern auszudrücken:

$$Z = \oint \mathcal{D}\delta\psi^* \oint \mathcal{D}\delta\psi \left(1 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} \frac{\delta}{\delta G_{22}^{-1}} + \dots \right) \times e^{-\int_{12} \delta\psi_1^* G_{12}^{-1} \delta\psi_2} e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]/\hbar}. \quad (3.26)$$

Jetzt lässt sich das Funktionalintegral ausführen und man erhält mit (2.83)

$$Z = e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]/\hbar} \left(1 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} \frac{\delta}{\delta G_{22}^{-1}} + \dots \right) e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1}}. \quad (3.27)$$

Zuerst wendet man die Funktionalableitungen auf die Exponentialfunktion an und erhält aufgrund der Kettenregel

$$Z = \left[1 - \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \frac{\delta \text{Tr} \ln G_0^{-1}}{\delta G_{11}^{-1}} + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \left(\frac{\delta \text{Tr} \ln G_0^{-1}}{\delta G_{11}^{-1}} \frac{\delta \text{Tr} \ln G_0^{-1}}{\delta G_{22}^{-1}} - \frac{\delta^2 \text{Tr} \ln G_0^{-1}}{\delta G_{11}^{-1} \delta G_{22}^{-1}} \right) + \dots \right] \times e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1}} e^{-\mathcal{A}[\Psi^*, \Psi]/\hbar}. \quad (3.28)$$

Zur Durchführung der weiteren Rechnung wird die Funktionalableitung des $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$ nach dem Integralkern benötigt. Aufgrund von (2.83) gilt

$$\frac{\delta \text{Tr} \ln G_0^{-1}}{\delta G_{12}^{-1}} = -\frac{1}{Z_0} \frac{\delta Z_0}{\delta G_{12}^{-1}}. \quad (3.29)$$

Diesen Ausdruck kann man mithilfe von (2.62) für verschwindende Ströme wieder durch ein Funktionalintegral ausdrücken und die Funktionalableitung ausführen. Mit (3.25) ergibt sich

$$\frac{\delta \text{Trln} G_0^{-1}}{\delta G_{12}^{-1}} = \frac{1}{Z_0} \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \psi_1^* \psi_2 e^{-\int_{34} \psi_3^* G_{34}^{-1} \psi_4}. \quad (3.30)$$

Dieses Ergebnis lässt sich mit (2.103) direkt auf die Greensche Funktion zurückführen:

$$\frac{\delta \text{Trln} G_0^{-1}}{\delta G_{12}^{-1}} = G_{21}. \quad (3.31)$$

Hinzu kommt noch die funktionale Ableitung der Greenschen Funktion nach dem Integralkern. Dazu beginnt man zunächst mit der Identität

$$\int_2 G_{12} G_{23}^{-1} = \delta_{13}. \quad (3.32)$$

Eine Funktionalableitung nach G_{45}^{-1} führt dann mit (3.25) auf

$$0 = \int_2 \frac{\delta G_{12}}{\delta G_{45}^{-1}} G_{23}^{-1} + \int_2 G_{12} \delta_{24} \delta_{35}. \quad (3.33)$$

Multipliziert man (3.33) mit G_{36} und integriert über die Koordinaten 3, so erhält man

$$\int_{23} \frac{\delta G_{12}}{\delta G_{45}^{-1}} G_{23}^{-1} G_{36} = - \int_{23} G_{12} G_{36} \delta_{24} \delta_{35}. \quad (3.34)$$

Unter Benutzung von (3.32) führt dies direkt auf

$$\frac{\delta G_{12}}{\delta G_{34}^{-1}} = -G_{13} G_{42}. \quad (3.35)$$

Aus (3.28) lässt sich nun das effektive Potential über die Beziehung

$$\Gamma[\Psi^*, \Psi] = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (3.36)$$

bestimmen. Den Logarithmus entwickelt man bis zur zweiten Ordnung, um alle Beiträge des Zufallspotentials bis zur zweiten Ordnung zu berücksichtigen. Dies ergibt zusammen mit (3.12), (3.31) und (3.35) das effektive Potential eines idealen Bose-Gases in einer isotropen harmonischen Falle unter dem Einfluss schwacher Unordnung:

$$\begin{aligned} \Gamma[\Psi^*, \Psi] = & \frac{1}{\beta} \left(\text{Trln} G_0^{-1} + \int_{12} \Psi_1^* G_{12}^{-1} \Psi_2 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \Psi_1^* \Psi_1 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 G_{11} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 G_{12} G_{21} + \dots \right). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Für verschwindendes Zufallspotential geht das effektive Potential (3.37) in das frühere Resultat (2.87) über. Bei der Berechnung des $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$ muss berücksichtigt werden, dass der Grundzustand des ungestörten Systems $\psi_0(\mathbf{x})$ und die Fluktuationen $\delta\psi(\mathbf{x}, \tau)$ senkrecht aufeinander stehen:

$$\int d^D x \psi_0^*(\mathbf{x}) \delta\psi(\mathbf{x}, \tau) = 0. \quad (3.38)$$

Diese Bedingung stellt das Analogon der Hintergrund-Methode für (2.121) dar, das Ergebnis entspricht (2.127). Setzt man die Abkürzungen (3.13) sowie den $\text{Tr} \ln G_0^{-1}$ aus (2.127) in (3.37) ein, so ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} \Gamma[\Psi^*, \Psi] = & - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu-E_0)k}}{\beta k} \left[\frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta k})^3} - 1 \right] \\ & + \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3 x \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right] \Psi(\mathbf{x}, \tau) \\ & - \frac{1}{2\hbar^2\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int d^3 x_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^3 x_2 U(\mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_2) G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \\ & + \int d^3 x U(\mathbf{x}) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) + \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3 x U(\mathbf{x}) \Psi^*(\mathbf{x}, \tau) \Psi(\mathbf{x}, \tau) + \dots \end{aligned} \quad (3.39)$$

3.4 Chemisches Potential

Um aus dem effektiven Potential (3.39) das großkanonische Potential zu erhalten, muss dieses nach (2.68) für extremalisierte Hintergrund-Felder ausgewertet werden. Man erhält aus (3.39) durch Extremalisierung bezüglich $\Psi^*(\mathbf{x}, \tau)$

$$\left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \hat{H}_E(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) - \mu_c \right] \Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = 0. \quad (3.40)$$

Die Gleichung entspricht (2.88) mit dem Unterschied, dass zu dem Einteilchen-Hamilton-Operator $\hat{H}(\mathbf{x})$ noch das Unordnungspotential hinzugefügt wurde. Außerdem wurde $\mu = \mu_c$ gesetzt, da sich die folgenden Überlegungen auf die Tieftemperaturphase beschränken, bei welcher der Hintergrund $\Psi_e(\mathbf{x}, \tau)$ von null verschieden ist. Das Hintergrund-Feld und das chemische Potential werden jetzt bezüglich des Unordnungspotentials entwickelt. Dabei wird berücksichtigt, dass das Hintergrund-Feld nicht von der Imaginärzeit abhängt (siehe Abschnitt 2.2.5):

$$\mu_c = \mu_c^{(0)} + \mu_c^{(1)} + \mu_c^{(2)} + \dots, \quad (3.41)$$

$$\Psi_e(\mathbf{x}, \tau) = \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}) + \Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}) + \Psi_e^{(2)}(\mathbf{x}) + \dots \quad (3.42)$$

Setzt man diese Entwicklungen in (3.40) ein, so erhält man nach Potenzen des Zufallspotentials sortiert bis zur zweiten Ordnung die Bestimmungsgleichungen

$$\left[\hat{H}_E(\mathbf{x}) - \mu_c^{(0)} \right] \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.43)$$

$$\left[\hat{H}_E(\mathbf{x}) - \mu_c^{(0)} \right] \Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}) = [\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x})] \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}), \quad (3.44)$$

$$\left[\hat{H}_E(\mathbf{x}) - \mu_c^{(0)} \right] \Psi_e^{(2)}(\mathbf{x}) = [\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x})] \Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}) + \mu_c^{(2)} \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (3.45)$$

Der ersten Gleichung entnimmt man unmittelbar, dass der ungestörte Beitrag zum Background-Feld für ein isotropes harmonisches Potential gerade (2.92) entspricht mit $\mu_c^{(0)} = D\hbar\omega/2$:

$$\Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}) = \sqrt{N_0} \psi_0(\mathbf{x}). \quad (3.46)$$

$\psi_0(\mathbf{x})$ stellt hierbei die auf eins normierte Grundzustandswellenfunktion des dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators dar. Multipliziert man die Gleichungen (3.44), (3.45) von links mit $\Psi_e^{(0)*}(\mathbf{x})$, integriert über den gesamten Raum und beachtet die Normierung

$$N_0 = \int d^D x |\Psi_e^{(0)}(\mathbf{x})|^2, \quad (3.47)$$

so erhält man explizite Ausdrücke für die durch die Unordnung entstehenden Korrekturen des chemischen Potentials:

$$\mu_c^{(1)} = \frac{1}{N_0} \int d^D x U(\mathbf{x}) \Psi_e^{(0)*}(\mathbf{x}) \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}) \quad (3.48)$$

$$\mu_c^{(2)} = \frac{1}{N_0} \int d^D x [U(\mathbf{x}) - \mu_c^{(1)}] \Psi_e^{(0)*}(\mathbf{x}) \Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}). \quad (3.49)$$

Der Faktor $1/N_0$ stammt dabei von der Normierung des ungestörten Hintergrund-Feldes $\Psi_e^{(0)}$ in (3.46). Die erste Korrektur des chemischen Potentials kann also bestimmt werden, ohne die entsprechende Ordnung des Hintergrund-Feldes $\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x})$ zu kennen. Zur Berechnung der zweiten Korrektur des chemischen Potentials $\mu_c^{(2)}$ ist allerdings gemäß (3.49) die Kenntnis von $\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x})$ notwendig, welches sich aus Gleichung (3.44) bestimmen lässt. Hierzu verwenden wir die Greensche Funktion $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E)$ der inhomogenen Differentialgleichung

$$\left[\hat{H}_E(\mathbf{x}_1) - E \right] g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \quad (3.50)$$

so dass eine spezielle Lösung von (3.44) auf diese Greensche Funktion zurückgeführt werden kann:

$$\Psi_s^{(1)}(\mathbf{x}) = \int d^D x_2 g(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mu_c^{(0)}) [\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x}_2)] \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2). \quad (3.51)$$

Um die allgemeine Lösung von (3.44) zu erhalten, muss noch die homogene Lösung addiert werden:

$$\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}) = c \psi_0(\mathbf{x}) + \Psi_s^{(1)}(\mathbf{x}). \quad (3.52)$$

Zur Bestimmung der Konstante c wird die Normierungsbedingung des Background-Feldes betrachtet:

$$\int d^D x |\Psi_e(\mathbf{x}, \tau)|^2 = N_0. \quad (3.53)$$

Einsetzen von (3.42) führt unter Berücksichtigung von (3.47) direkt auf die Bedingung

$$\text{Re} \int d^D x \Psi_e^{(0)*}(\mathbf{x}) \Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}) = 0. \quad (3.54)$$

Setzt man (2.91), (3.51) und (3.52) in (3.54) ein, so erhält man für den Realteil der Konstante c schließlich

$$\text{Re } c = -\text{Re} \left\{ \int d^D x_1 \int d^D x_2 \psi_0^*(\mathbf{x}_1) g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mu_c^{(0)}) [\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x}_2)] \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2) \right\}. \quad (3.55)$$

3.5 Greensche Funktion

Die bisherigen Rechnungen gelten für eine allgemeine Dimension D , im Folgenden soll nun der Spezialfall $D=3$ behandelt werden. Zur Bestimmung der Greenschen Funktion zu Gleichung (3.44) soll zunächst das Anfangswertproblem (2.29) der Zeitentwicklungsamplitude betrachtet werden. Aus dieser lässt sich der kausale Propagator eines Teilchens bestimmen, indem man zusätzlich die Zeitordnung berücksichtigt:

$$G_c(\mathbf{x}_b, t; \mathbf{x}_a, 0) = \Theta(t) \langle \mathbf{x}_b, t | \mathbf{x}_a, 0 \rangle. \quad (3.56)$$

Leitet man diesen nach der Zeit ab, so erhält man

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_c(\mathbf{x}_b, t; \mathbf{x}_a, 0) = \hat{H}_E(\mathbf{x}_b) G_c(\mathbf{x}_b, t; \mathbf{x}_a, 0) + i\hbar \delta(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) \delta(t). \quad (3.57)$$

In diese Gleichung setzt man im nächsten Schritt die Fourier-Transformierte bezüglich der Zeit,

$$G_c(\mathbf{x}_b, t; \mathbf{x}_a, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} G_c(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a; E) \quad (3.58)$$

ein und erhält

$$\left[\hat{H}_E(\mathbf{x}_b) - E \right] G_c(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a; E) = -i\hbar \delta(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a). \quad (3.59)$$

Anhand eines Vergleiches mit (3.50) lässt sich erkennen, dass der Fourier-transformierte kausale Propagator bis auf eine Konstante gerade der gesuchten Greenschen Funktion entspricht:

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \frac{G_c(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E)}{-i\hbar}. \quad (3.60)$$

Der Propagator ist bekannt, für die gesuchte Greensche Funktion erhält man nach (B.27) für $D=3$ Dimensionen in Kugelkoordinaten

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta_1, \phi_1) Y_{lm}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{\Gamma(1/2+\nu-\lambda)}{\hbar\omega(r_1 r_2)^{3/2} \Gamma(1+2\nu)} \\ \times [\theta(r_1-r_2) M_{\lambda,\nu}(\alpha r_2^2) W_{\lambda,\nu}(\alpha r_1^2) + \theta(r_2-r_1) M_{\lambda,\nu}(\alpha r_1^2) W_{\lambda,\nu}(\alpha r_2^2)] \quad (3.61)$$

mit den Abkürzungen $\lambda = E/2\hbar\omega$, $\nu = l/2+1/4$ und $\alpha = M\omega/\hbar$. Hierbei beschreiben $Y_{lm}(\theta, \phi)$ die Kugelflächenfunktionen und $M_{\lambda,\mu}(r)$, $W_{\lambda,\mu}(r)$ bezeichnen die Whittaker-Funktionen [36].

Eine weitere wichtige Darstellung der Greenschen Funktion lässt sich ebenfalls dem kausalen Propagator entnehmen. Dazu betrachtet man zunächst die Fourier-Transformierung des kausalen Propagators bezüglich der Zeit, deren Konvergenz durch Einführung eines infinitesimalen η gewährleistet wird:

$$G_c(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \lim_{\eta \downarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E+i\eta)t/\hbar} G_c(\mathbf{x}_1, t; \mathbf{x}_2, 0). \quad (3.62)$$

Setzt man in diese Gleichung (2.34) und (3.56) ein und führt das Integral aus, so erhält man für den kausalen Propagator die Spektraldarstellung

$$G_c(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \lim_{\eta \downarrow 0} \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2) \frac{i\hbar}{E - E_{\mathbf{n}} + i\eta} \quad (3.63)$$

und entsprechend (3.60) für die gesuchte Greensche Funktion

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \lim_{\eta \downarrow 0} \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2) \frac{1}{E_{\mathbf{n}} - E - i\eta}. \quad (3.64)$$

Mithilfe dieser Darstellung wird nun die zweite Korrektur des chemischen Potentials (3.49) weiter berechnet. Zunächst reduziert sich Gleichung (3.55) mit (3.64) aufgrund der Orthonormalität der Eigenzustände $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ auf

$$\text{Re } c = - \lim_{\eta \downarrow 0} \text{Re} \int d^3x \psi_0^*(\mathbf{x}) \frac{\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x})}{E_0 - \mu_c^{(0)} - i\eta} \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (3.65)$$

Setzt man (3.51), (3.64) und (3.65) in (3.52) ein, so erhält man für die erste Korrektur des Hintergrund-Feldes bezüglich der Unordnung

$$\begin{aligned} \Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}_1) &= \lim_{\eta \downarrow 0} \int d^3 x_2 \left[\sum_{\mathbf{n}} \frac{(E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)} + i\eta) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2)}{(E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)})^2 + \eta^2} - \frac{(E_0 - \mu_c^{(0)}) \psi_0(\mathbf{x}_1) \psi_0^*(\mathbf{x}_2)}{(E_0 - \mu_c^{(0)})^2 + \eta^2} \right] \\ &\quad \times [\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x}_2)] \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2) + i\psi_0(\mathbf{x}_1) \operatorname{Im} c. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Der Term $\operatorname{Im} c$ in (3.66) wird so gewählt, dass $\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}_1)$ für $E_0 = \mu_c^{(0)}$ nicht im Limes $\eta \downarrow 0$ divergiert:

$$\operatorname{Im} c = \lim_{\eta \downarrow 0} \int d^3 x_2 \frac{-\eta \psi_0^*(\mathbf{x}_2)}{(E_0 - \mu_c^{(0)})^2 + \eta^2} [\mu_c^{(1)} - U(\mathbf{x}_2)] \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2). \quad (3.67)$$

Dies reduziert (3.66) auf

$$\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}_1) = - \lim_{\eta \downarrow 0} \int d^3 x_2 \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{(E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)} + i\eta) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2)}{(E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)})^2 + \eta^2} U(\mathbf{x}_2) \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2), \quad (3.68)$$

wobei bereits berücksichtigt ist, dass das Integral in (3.66) über den ersten Summanden in der zweiten Klammer aufgrund der Orthogonalität der Eigenzustände verschwindet. Führt man den Limes $\eta \downarrow 0$ durch, so erhält man mithilfe der Distributionen-Identität

$$\lim_{\eta \downarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \delta(x) \quad (3.69)$$

den Ausdruck

$$\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}_1) = - \int d^3 x_2 \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[\frac{1}{E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)}} + i\pi \delta(E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)}) \right] \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2) U(\mathbf{x}_2) \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2). \quad (3.70)$$

Da $E_{\mathbf{n}}$ mit $\mathbf{n} \neq 0$ stets verschieden ist von $\mu_c^{(0)} = E_0$, trägt die Delta-Funktion in (3.70) nicht bei und man erhält

$$\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}_1) = - \int d^3 x_2 \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2)}{E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)}} U(\mathbf{x}_2) \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2). \quad (3.71)$$

Man erkennt in (3.71), dass der Beitrag des Grundzustandes zur Greenschen Funktion entfernt worden ist. Im Folgenden soll dieser Beitrag auch in der ersten Darstellung (3.61) identifiziert und entfernt werden, um $\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x})$ auch in dieser Form zu erhalten. Dazu soll zunächst der erste Summand in (3.61) mit $l=0, m=0$ betrachtet werden. Man erhält mithilfe von [36, 7.2.4]

$$g_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; E) = \frac{\Gamma(3/4 - E/2\hbar\omega)}{2\hbar\omega} \psi_0(\mathbf{x}_1) \psi_0^*(\mathbf{x}_2). \quad (3.72)$$

Dieser Beitrag konvergiert im Limes $E \rightarrow \mu^{(0)}$ gegen den Term, der nach (3.71) von der vollständigen Greenschen Funktion in der Spektraldarstellung abgezogen werden muss. Hieraus schließt man, dass der Beitrag des Grundzustandes gerade dem Summanden $l=0, m=0$ in (3.61) entspricht. Drückt man also $\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x})$ durch die Greensche Funktion (3.61) aus, so erhält man nach Abziehen des Summanden für $l=0, m=0$

$$\Psi_e^{(1)}(\mathbf{x}_1) = - \int d^3x_2 g'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mu_c^{(0)}) U(\mathbf{x}_2) \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2), \quad (3.73)$$

wobei die Abkürzung

$$g'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mu_c^{(0)}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta_1, \phi_1) Y_{lm}^*(\theta_2, \phi_2) \frac{\Gamma(1/2 + \nu - \lambda)}{\hbar\omega(r_1 r_2)^{3/2} \Gamma(1 + 2\nu)} \times [\theta(r_1 - r_2) M_{\lambda, \nu}(\alpha r_2^2) W_{\lambda, \nu}(\alpha r_1^2) + \theta(r_2 - r_1) M_{\lambda, \nu}(\alpha r_1^2) W_{\lambda, \nu}(\alpha r_2^2)] \quad (3.74)$$

mit $\lambda = \mu_c^{(0)}/2\hbar\omega$, $\nu = l/2 + 1/4$ und $\alpha = M\omega/\hbar$ eingeführt wurde.

Die zweite Korrektur des chemischen Potentials (3.49) kann weiter vereinfacht werden, indem man zuerst (3.71) in (3.49) einsetzt und erkennt, dass dann das Integral über den zweiten Term in (3.49) aufgrund der Orthogonalität der Eigenzustände verschwindet:

$$\mu_c^{(2)} = -\frac{1}{N_0} \int d^3x_1 \int d^3x_2 U(\mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_2) \Psi_e^{(0)*}(\mathbf{x}_1) \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{x}_2)}{E_{\mathbf{n}} - \mu_c^{(0)}} \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2). \quad (3.75)$$

Benutzt man (3.74) statt der Spektraldarstellung der Greenschen Funktion, so erhält man schließlich

$$\mu_c^{(2)} = -\frac{1}{N_0} \int d^3x_1 \int d^3x_2 U(\mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_2) \Psi_e^{(0)*}(\mathbf{x}_1) g'(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mu_c^{(0)}) \Psi_e^{(0)}(\mathbf{x}_2). \quad (3.76)$$

3.6 Kritische Temperatur

In diesem Abschnitt soll die Verschiebung der kritischen Temperatur bezüglich der Unordnung in führender Ordnung in drei Dimensionen berechnet werden. Dabei wird die kritische Temperatur als ein Funktional des Unordnungspotentials betrachtet und in Bezug darauf bis zur zweiten Ordnung berechnet. Zunächst leitet man das effektive Potential (3.39) nach dem chemischen Potential ab, um die Teilchenzahl zu erhalten. Danach setzt man in der Teilchenzahlgleichung die definierenden Bedingungen für das Auftreten des kritischen Punktes ein:

$$N_0 = 0, \quad \beta = \beta_c, \quad \mu = \mu_c. \quad (3.77)$$

Dadurch erhält man für die Teilchenzahl am kritischen Punkt

$$\begin{aligned}
N &= \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta_c(\mu_c - E_0)k} \left[\frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta_c k})^3} - 1 \right] - \frac{\partial}{\partial \mu} \int d^3x U(\mathbf{x}) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c}^{\beta=\beta_c} \\
&+ \frac{1}{2\hbar^2\beta_c} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int d^3x_1 \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^3x_2 U(\mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_2) \\
&\times \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Big|_{\mu=\mu_c}^{\beta=\beta_c} + \dots \quad (3.78)
\end{aligned}$$

Als nächstes setzt man die Entwicklung des chemischen Potentials μ_c bezüglich des Zufallspotentials aus (3.41) ein:

$$\begin{aligned}
N &= \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta_c k})^3} - 1 \right] \left[1 + \beta_c k (\mu_c^{(1)} + \mu_c^{(2)}) + \frac{\beta_c^2 k^2}{2} \mu_c^{(1)2} + \dots \right] \quad (3.79) \\
&- \int d^3x U(\mathbf{x}) \left(\frac{\partial}{\partial \mu} + \mu_c^{(1)} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \right) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c} + \frac{1}{2\hbar^2\beta_c} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 \int d^3x_1 \\
&\times \int_0^{\hbar\beta} d\tau_2 \int d^3x_2 U(\mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_2) \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c} + \dots
\end{aligned}$$

Danach wird auch die kritische Temperatur bezüglich des Zufallspotentials bis zur zweiten Ordnung entwickelt:

$$T_c = T_c^{(0)} + T_c^{(1)} + T_c^{(2)} + \dots \quad (3.80)$$

Dies ergibt

$$\begin{aligned}
N &= \left[1 + (T_c^{(1)} + T_c^{(2)}) \frac{\partial}{\partial T} + \frac{T_c^{(1)2}}{2} \frac{\partial^2}{\partial T^2} + (\mu_c^{(1)} + \mu_c^{(2)}) \left(1 + T_c^{(1)} \frac{\partial}{\partial T} \right) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\mu_c^{(1)2}}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \right] N \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \\
&+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{U(\mathbf{x}_1) U(\mathbf{x}_2)}{2\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \\
&- \int d^3x U(\mathbf{x}) \left(\frac{\partial}{\partial \mu} + \mu_c^{(1)} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - \frac{T_c^{(1)}\beta}{T} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} + \dots \quad (3.81)
\end{aligned}$$

Diesem Resultat kann man nun die Korrekturen der kritischen Temperatur in führender Ordnung als Funktional des Unordnungspotentials entnehmen. Man erhält die Verschiebung der kritischen Temperatur in erster Ordnung bezüglich $U(\mathbf{x})$

$$\frac{T_c^{(1)}}{T_c^{(0)}} = \frac{\int d^3x U(\mathbf{x}) \frac{\partial G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0)}{\partial \mu} - \mu_c^{(1)} \frac{\partial N}{\partial \mu}}{T \frac{\partial N}{\partial T}} \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \quad (3.82)$$

In zweiter Ordnung bezüglich $U(\mathbf{x})$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{T_c^{(2)}}{T_c^{(0)}} = & -\frac{1}{T \frac{\partial N}{\partial T}} \left\{ \left[\frac{T_c^{(1)2}}{2} \frac{\partial^2}{\partial T^2} + \left(\mu_c^{(2)} + \mu_c^{(1)} T_c^{(1)} \frac{\partial}{\partial T} \right) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\mu_c^{(1)2}}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \right] N \right. \\ & + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3 x_{1,2} \frac{U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)}{2\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \\ & \left. - \int d^3 x U(\mathbf{x}) \left(\mu^{(1)} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - \frac{T_c^{(1)}\beta}{T} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \right\} \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}}. \quad (3.83) \end{aligned}$$

Diese Ergebnisse sind quantenmechanisch exakt und ermöglichen es nun, die Momente der kritischen Temperatur bezüglich des Unordnungsensemblemittelwertes zu berechnen.

3.7 Unordnungsmittel

Im folgenden Abschnitt wird die unordnungsgemittelte Verschiebung der kritischen Temperatur und die zugehörige Standardabweichung im Limes großer Teilchenzahlen N und für schwache Unordnung in führender Ordnung berechnet. Angenommen wird dabei die Gaußsche Korrelation (3.5). Mittelt man die Verschiebung der kritischen Temperatur über viele Realisierungen, so verschwinden nach (3.3) die Terme, die linear im Zufallspotential sind, d.h.

$$\frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} = \frac{\overline{T_c^{(2)}}}{T_c^{(0)}} + \dots \quad (3.84)$$

3.7.1 Semiklassik

Setzt man (3.83) in (3.84) ein, so ergibt sich für die Verschiebung der kritischen Temperatur

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} = & -\frac{1}{T \frac{\partial N}{\partial T}} \left\{ \left[\frac{\overline{T_c^{(1)2}}}{2} \frac{\partial^2}{\partial T^2} + \left(\overline{\mu_c^{(2)}} + \overline{\mu_c^{(1)}} T_c^{(1)} \frac{\partial}{\partial T} \right) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\overline{\mu_c^{(1)2}}}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \right] N \right. \\ & + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3 x_{1,2} \frac{\overline{U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)}}{2\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \\ & \left. - \int d^3 x \left(\frac{\overline{U(\mathbf{x})\mu^{(1)}}}{T} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - \frac{\overline{U(\mathbf{x})T_c^{(1)}\beta}}{T} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \right\} \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} + \dots \quad (3.85) \end{aligned}$$

Die Gleichung (3.85) soll im Folgenden semiklassisch entwickelt werden, da diese nicht exakt berechnet werden kann. Dabei wird außerdem der Limes großer Teilchenzahlen betrachtet, also nur die führende Ordnung bezüglich der Teilchenzahl berechnet. Zunächst

werden die Teilchenzahl N durch deren semiklassische Näherung (2.144) ersetzt und die Ableitungen nach μ ausgeführt. Betrachtet man danach den Limes $T \downarrow T_c^{(0)}$, so erhält man die semiklassischen Entwicklungen

$$\sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)k} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^3} - 1 \right] \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = \frac{\zeta(3)}{(\hbar\omega\beta)^3} \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} + \dots, \quad (3.86)$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)k} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^3} - 1 \right] \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = \frac{\zeta(2)}{(\hbar\omega\beta)^3} \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} + \dots, \quad (3.87)$$

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \sum_{k=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)k} \left[\frac{1}{(1-e^{-\hbar\omega\beta k})^3} - 1 \right] \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = \frac{[3\zeta(2)+2\zeta(3)+\gamma+\frac{3}{2}-\ln \hbar\omega\beta]}{(\hbar\omega\beta)^3} \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} + \dots \quad (3.88)$$

Als nächstes werden die Ableitungen nach der Temperatur in (3.85) ausgeführt, zusammen mit (3.86)–(3.88) erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} &= -\frac{1}{3} \left\{ 3 \frac{\overline{T_c^{(1)2}}}{T_c^{(0)2}} + \frac{\zeta(2)\beta_c^{(0)}}{\zeta(3)} \left(\frac{\overline{2T_c^{(1)}\mu_c^{(1)}}}{T_c^{(0)}} + \overline{\mu_c^{(2)}} \right) \right. \\ &\quad + \left[3\zeta(2)+2\zeta(3)+\gamma+\frac{3}{2}-\ln \hbar\omega\beta_c^{(0)} \right] \frac{\beta_c^{(0)2} \overline{\mu_c^{(1)2}}}{2\zeta(3)} \\ &\quad - \int d^3x \left(\frac{\overline{U(\mathbf{x})\mu^{(1)}}}{N} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} - \frac{\overline{U(\mathbf{x})T_c^{(1)}}}{NT_c^{(0)}} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} + \dots \\ &\quad \left. + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{\overline{U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)}}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Alle Terme sind von der Ordnung $\mathcal{O}(R)$, allerdings unterscheiden sie sich in ihrer Abhängigkeit von der Teilchenzahl N . Es wird sich in der folgenden Rechnung herausstellen, dass nur $\overline{\mu_c^{(2)}}$ und das letzte Integral in (3.89) zum thermodynamischen Limes beitragen und dass die restlichen Terme für experimentell relevante Teilchenzahlen vernachlässigt werden können. Die führende Ordnung wird proportional zu $\sqrt{\omega}$ sein, d. h. mit $N^{-1/6}$ skalieren, da im thermodynamischen Limes das Produkt $N\omega^3$ konstant gehalten wird (siehe Abschnitt 2.2.8). Zuerst werden all jene Beiträge berechnet, die nicht zum thermodynamischen Limes beitragen.

3.7.2 Erster Beitrag höherer Ordnung

Man beginnt mit dem ersten Term $\overline{T_c^{(1)2}}/T_c^{(0)2}$, der sich aus (3.82) wie folgt ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{T_c^{(1)2}}}{T_c^{(0)2}} &= \frac{1}{9} \left[\frac{\zeta(2)^2 \beta_c^{(0)2}}{\zeta(3)^2} \overline{\mu_c^{(1)2}} - 2 \frac{\zeta(2) \beta_c^{(0)}}{\zeta(3) N} \int d^3x \overline{\mu_c^{(1)} U(\mathbf{x})} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \right. \\ &\quad \left. + \int d^3x_{1,2} \frac{\overline{U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)}}{N^2} \frac{\partial G_0(\mathbf{x}_1, 0; \mathbf{x}_1, 0)}{\partial \mu} \frac{\partial G_0(\mathbf{x}_2, 0; \mathbf{x}_2, 0)}{\partial \mu} \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \right]. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Zunächst soll der exakte Vielteilchen-Propagator (2.180) in (2.176) eingesetzt werden:

$$G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{\beta(\mu-E_0)n} \left[\frac{e^{-M\omega \tanh(\hbar\omega\beta n/2) \mathbf{x}^2/\hbar}}{(1 - e^{-\hbar\omega\beta n})^{3/2}} - e^{-M\omega \mathbf{x}^2/\hbar} \right]. \quad (3.91)$$

Setzt man jetzt (3.5), (3.48) und (3.91) in (3.90) ein, so erkennt man, dass es sich bei allen Beiträgen um Gaußsche Integrale handelt. Das erste lautet

$$\overline{\mu_c^{(1)2}} = \int d^3x_1 \int d^3x_2 \frac{R}{(2\pi\epsilon^2)^{3/2}} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{-M\omega(\mathbf{x}_1^2+\mathbf{x}_2^2)/2\hbar} e^{-(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)^2/2\epsilon^2}. \quad (3.92)$$

Die Variablen werden zu Schwerpunkt- und Relativkoordinaten transformiert, danach werden die Gauß-Integrale ausgeführt und man erhält

$$\overline{\mu_c^{(1)2}} = \frac{R}{(1 + \tilde{\epsilon}^2)^{3/2}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \quad (3.93)$$

mit der dimensionslosen Korrelationslänge

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}. \quad (3.94)$$

Diese dimensionslose Korrelationslänge soll in allen folgenden Betrachtungen selbst im thermodynamischen Limes nicht als klein angenommen werden, da explizit der Einfluss von Unordnung mit endlicher Korrelationslänge behandelt werden soll. Nimmt man an, dass $\tilde{\epsilon}$ im thermodynamischen Limes großer Teilchenzahlen aufgrund der ω -Abhängigkeit vernachlässigbar klein wird, so sind die in dieser Näherung berechneten Größen nur noch im Bereich $\tilde{\epsilon} \ll 1$ gültig. Diese Situation ist aber unerwünscht, da $\tilde{\epsilon}$ beispielsweise in Experimenten mit Laser-Speckle die Größe $\tilde{\epsilon} \approx 1$ hat.

Die anderen Beiträge in $\overline{T_c^{(1)2}}/T_c^{(0)2}$ lassen sich in analoger Weise berechnen, insgesamt erhält man

$$\frac{\overline{T_c^{(1)2}}}{T_c^{(0)2}} = \frac{\beta_c^{(0)2} R}{9} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left[\frac{\zeta(2)^2}{\zeta(3)^2 (1 + \tilde{\epsilon}^2)^{3/2}} - \frac{2\zeta(2)}{\zeta(3) N} F_1 + \frac{1}{N^2} F_2 \right]. \quad (3.95)$$

Benutzt werden die Abkürzungen

$$F_1 = \sum_{n=1}^{\infty} n \left(\frac{1}{\{[1-A(n)]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n)\}^{3/2}} - \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2 + 1)^{3/2}} \right), \quad (3.96)$$

$$F_2 = \sum_{n,n'=1}^{\infty} nn' \left(-\frac{1}{\{[1-A(n)]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n)\}^{3/2}} + \frac{1}{\{[1-A(n')]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n')\}^{3/2}} + \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2 + 1)^{3/2}} \right. \\ \left. + \frac{1}{\{[1-A(n)]^2 [1-A(n')]^2 \tilde{\epsilon}^2 + [1-A(n)A(n')][1-A(n)][1-A(n')]\}^{3/2}} \right) \quad (3.97)$$

mit

$$A(n) = e^{-\hbar\omega\beta_c^{(0)} n}. \quad (3.98)$$

Angemerkt sei, dass die Reihen (3.96) und (3.97) nur deshalb endlich sind, weil hier der korrigierte Vielteilchen-Propagator (2.180) benutzt wurde. Der erste Term in (3.95) ist proportional zu $N^{-1/2}$. Den beiden weiteren Termen ist ihre Abhängigkeit von N aufgrund der Reihen nicht ohne weiteres anzusehen. Es reicht aber nachzuprüfen, dass diese von höherer Ordnung als der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1/6})$ sind, denn dann können sie vernachlässigt werden. Dazu berechnet man die Reihen F_1 und F_2 für verschiedene Teilchenzahlen und trägt die Ergebnisse logarithmisch auf. Zu beachten ist hierbei, dass die Teilchenzahl N in führender Ordnung über die Beziehung (2.118) mit der Frequenz ω zusammenhängt. Man kann in Abbildung 3.2 anhand der Steigung der Geraden erkennen, dass F_1 proportional zu $N^{2/3}$ ist, und F_2 proportional zu $N^{4/3}$. Diese Proportionalität kann auch analytisch abgeschätzt werden, dazu wandelt man die Reihen F_1 und F_2 mithilfe der Euler-MacLaurin-Formel näherungsweise in Integrale um und führt anschließend die Substitutionen $\tilde{n} = \hbar\omega\beta_c^{(0)} n$ und $\tilde{n}' = \hbar\omega\beta_c^{(0)} n'$ durch:

$$F_1 = \int_0^{\infty} d\tilde{n} \frac{\tilde{n}}{(\hbar\omega\beta_c^{(0)})^2} \left\{ \frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - e^{-\tilde{n}}]^{3/2}} - \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2 + 1)^{3/2}} \right\} + \dots, \quad (3.99)$$

$$F_2 = \int_0^{\infty} d\tilde{n} \int_0^{\infty} d\tilde{n}' \frac{\tilde{n}\tilde{n}'}{(\hbar\omega\beta_c^{(0)})^4} \left\{ -\frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - e^{-\tilde{n}}]^{3/2}} + \frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}'})^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - e^{-\tilde{n}'}]^{3/2}} \right. \\ \left. + \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2 + 1)^{3/2}} + \frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2 (1-e^{-\tilde{n}'})^2 \tilde{\epsilon}^2 + (1-e^{-\tilde{n}}e^{-\tilde{n}'}) (1-e^{-\tilde{n}})(1-e^{-\tilde{n}'})]^{3/2}} \right\} + \dots \quad (3.100)$$

Diesen Näherungen lassen sich die zuvor grafisch bestimmten Abhängigkeiten der Reihen F_1 und F_2 von N ebenfalls entnehmen. Das bedeutet, der erste Beitrag in (3.95) ist proportional zu $N^{-1/2}$, der zweite proportional zu $N^{-5/6}$ und der dritte proportional zu $N^{-7/6}$. Dies bedeutet, dass $T_c^{(1)2}/T_c^{(0)2}$ für die mittlere Verschiebung vernachlässigt werden kann.

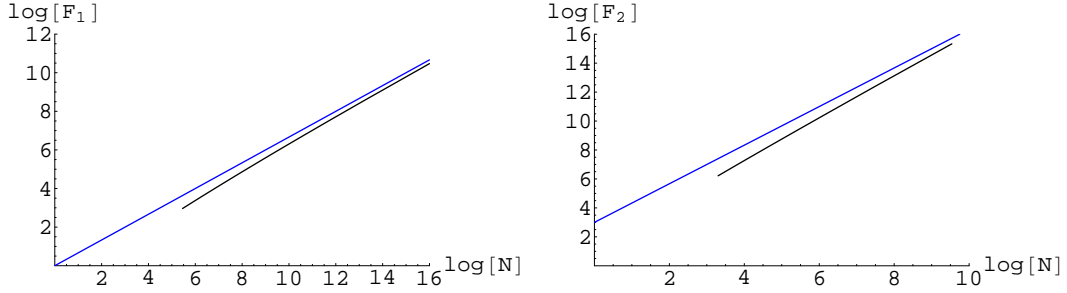


Abbildung 3.2: $\log F_1$ (links) bzw. $\log F_2$ (rechts) aufgetragen gegen $\log N$ (schwarze Linie) für $\tilde{\epsilon} = 0$. Die Vergleichslineal (blau) hat eine Steigung von $2/3$ (links) bzw. $4/3$ (rechts).

3.7.3 Weitere Beiträge höherer Ordnung

Der zweite Beitrag in (3.89) lautet

$$\frac{\beta_c^{(0)} \overline{T_c^{(1)} \mu_c^{(1)}}}{T_c^{(0)}} = -\frac{1}{3} \left[\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \beta_c^{(0)2} \overline{\mu^{(1)2}} - \int d^3x \frac{\beta_c^{(0)} \overline{\mu^{(1)} U(\mathbf{x})}}{N} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \right] \quad (3.101)$$

Setzt man hier (3.48) und (3.91) ein, so erhält man analog zur vorhergehenden Rechnung

$$\begin{aligned} \frac{\beta_c^{(0)} \overline{T_c^{(1)} \mu_c^{(1)}}}{T_c^{(0)}} &= -\frac{\beta_c^{(0)2} R}{3} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left[\frac{\zeta(2)}{\zeta(3)(1+\tilde{\epsilon}^2)^{3/2}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{\infty} n \left(\frac{1}{\{[1-A(n)]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n)\}^{3/2}} - \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2 + 1)^{3/2}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Das Verhalten der Reihen für verschiedene N wurde bereits zuvor untersucht, der erste Term ist proportional zu $N^{-1/2}$, während der zweite proportional zu $N^{-5/6}$ ist.

Der vierte Beitrag $\overline{\mu_c^{(1)2}}$ wurde schon in (3.93) berechnet. Auch dieser ist nicht von führender Ordnung bezüglich N , da er proportional zu $N^{-1/2}$ ist.

Der fünfte Beitrag in (3.89) entspricht gemäß (3.90) bis auf eine Konstante und einer zusätzlichen Ableitung nach μ dem zweiten Term in $\overline{T_c^{(1)2}}/T_c^{(0)2}$, man erhält mit (3.95)

$$-\frac{1}{N} \int d^3x \overline{\mu^{(1)} U(\mathbf{x})} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = -\frac{\beta_c^{(0)2} R}{N} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} F_3 \quad (3.103)$$

mit der Abkürzung

$$F_3 = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \left(\frac{1}{\{[1-A(n)]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n)\}^{3/2}} - \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2 + 1)^{3/2}} \right). \quad (3.104)$$

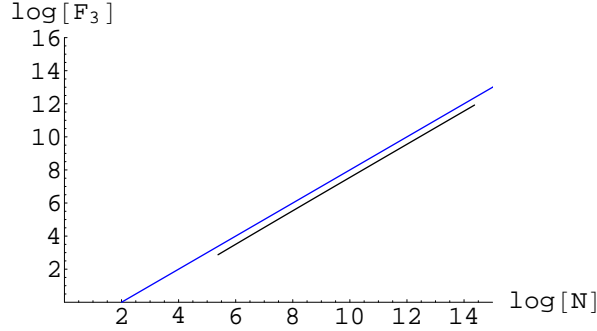


Abbildung 3.3: $\log F_3$ aufgetragen gegen $\log N$ (schwarze Linie) für $\tilde{\epsilon} = 0$. Die Vergleichsline (blau) hat eine Steigung von 1.

Analog zu Abschnitt 3.7.2 wird das Verhalten der Reihe F_3 für verschiedene N untersucht. Anhand von Abbildung 3.3 lässt sich erkennen, dass die Reihe proportional zu N ist. Eine Näherung der Reihe F_3 durch ein Integral liefert nach der Substitution $\tilde{n} = \hbar\omega\beta_c^{(0)}n$

$$F_3 = \int_0^\infty d\tilde{n} \frac{\tilde{n}^2}{(\hbar\omega\beta_c^{(0)})^3} \left\{ \frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2\tilde{\epsilon}^2+1-e^{-\tilde{n}}]^{3/2}} - \frac{1}{(\tilde{\epsilon}^2+1)^{3/2}} \right\} + \dots \quad (3.105)$$

Auch hier lässt sich erkennen, dass F_3 proportional zu N ist. Insgesamt ist der fünfte Beitrag in (3.89) also proportional zu $N^{-1/2}$.

Der sechste Term von (3.89) lautet

$$\begin{aligned} & \int d^3x \frac{\overline{T_c^{(1)}U(\mathbf{x})\beta}}{T_c^{(0)}N} \frac{\partial}{\partial\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = \int d^3x \frac{\overline{T_c^{(1)}U(\mathbf{x})\beta^2}}{T_c^{(0)}N} \frac{\partial}{\partial\beta} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \\ & \times \sum_{n=1}^{\infty} n e^{\beta(\mu-E_0)n} \left[\frac{e^{-M\omega \tanh(\hbar\omega\beta n/2)\mathbf{x}^2/\hbar}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta n})^{3/2}} - e^{-M\omega\mathbf{x}^2/\hbar} \right] \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}}. \end{aligned} \quad (3.106)$$

Die Ableitung nach β lässt sich auch als eine Ableitung nach dem Summationsindex n ausdrücken:

$$\begin{aligned} & \int d^3x \frac{\overline{T_c^{(1)}U(\mathbf{x})\beta}}{T_c^{(0)}N} \frac{\partial}{\partial\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = \int d^3x \frac{\overline{T_c^{(1)}U(\mathbf{x})\beta}}{T_c^{(0)}N} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \\ & \times \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \frac{\partial}{\partial n} e^{\beta(\mu-E_0)n} \left[\frac{e^{-M\omega \tanh(\hbar\omega\beta n/2)\mathbf{x}^2/\hbar}}{(1-e^{-\hbar\omega\beta n})^{3/2}} - e^{-M\omega\mathbf{x}^2/\hbar} \right] \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}}. \end{aligned} \quad (3.107)$$

Dieses Integral entspricht bis auf einen Faktor und der Ableitung nach n dem zweiten und

dritten Beitrag von (3.90). Man erhält daher nach (3.95)

$$\int d^3x \frac{\overline{t_1 U(\mathbf{x})} \beta}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, 0) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} = \frac{\beta_c^{(0)2} R}{N} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{\zeta(2)}{3\zeta(3)} F_4 - \frac{1}{N} F_5 \right) \quad (3.108)$$

mit den Abkürzungen

$$F_4 = - \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \frac{\partial}{\partial n} \frac{1}{\{[1-A(n)]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n)\}^{3/2}}, \quad (3.109)$$

$$F_5 = - \sum_{n, n'=1}^{\infty} n^2 n' \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{\{[1-A(n)]^2 [1-A(n')]^2 \tilde{\epsilon}^2 + [1-A(n)A(n')][1-A(n)][1-A(n')]\}^{3/2}} - \frac{2}{\{[1-A(n)]^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - A(n)\}^{3/2}} \right). \quad (3.110)$$

In Abbildung 3.4 sind die Reihen F_4 und F_5 für verschiedene N aufgetragen. Der Steigung der jeweiligen Geraden lässt sich die Potenz bezüglich N entnehmen. F_4 ist proportional zu $N^{2/3}$, F_5 ist proportional zu $N^{4/3}$. Nähert man die Reihen (3.109) und (3.110) mithilfe der Euler-MacLaurin-Formel durch Integrale und führt die Substitutionen $\tilde{n} = \hbar\omega\beta_c^{(0)} n$ und $\tilde{n}' = \hbar\omega\beta_c^{(0)} n'$ durch, so erhält man

$$F_4 = - \int_0^{\infty} d\tilde{n} \frac{\tilde{n}^2}{(\hbar\omega\beta_c^{(0)})^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{n}} \frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - e^{-\tilde{n}}]^{3/2}} + \dots, \quad (3.111)$$

$$F_5 = - \int_0^{\infty} d\tilde{n} \int_0^{\infty} d\tilde{n}' \frac{\tilde{n}^2 \tilde{n}'}{(\hbar\omega\beta_c^{(0)})^4} \frac{\partial}{\partial \tilde{n}} \left\{ - \frac{2}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2 \tilde{\epsilon}^2 + 1 - e^{-\tilde{n}}]^{3/2}} + \frac{1}{[(1-e^{-\tilde{n}})^2 (1-e^{-\tilde{n}'})^2 \tilde{\epsilon}^2 + (1-e^{-\tilde{n}} e^{-\tilde{n}'}) (1-e^{-\tilde{n}}) (1-e^{-\tilde{n}'})]^{3/2}} \right\} + \dots \quad (3.112)$$

Auch diesen Ergebnissen lässt sich die jeweilige Ordnung bezüglich N entnehmen, sie entsprechen den zuvor grafisch bestimmten. Insgesamt ist der erste Term in (3.107) proportional zu $N^{-5/6}$, der zweite proportional zu $N^{-7/6}$. Somit sind auch diese Beiträge nicht von führender Ordnung und werden vernachlässigt.

3.7.4 Thermodynamischer Limes großer Teilchenzahlen

Insgesamt vereinfacht sich die Verschiebung der kritischen Temperatur im thermodynamischen Limes zu

$$\frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} = -\frac{1}{3} \left\{ \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \beta_c^{(0)} \overline{\mu_c^{(2)}} + \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{\overline{U(\mathbf{x}_1)U(\mathbf{x}_2)}}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Big|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \right\}. \quad (3.113)$$

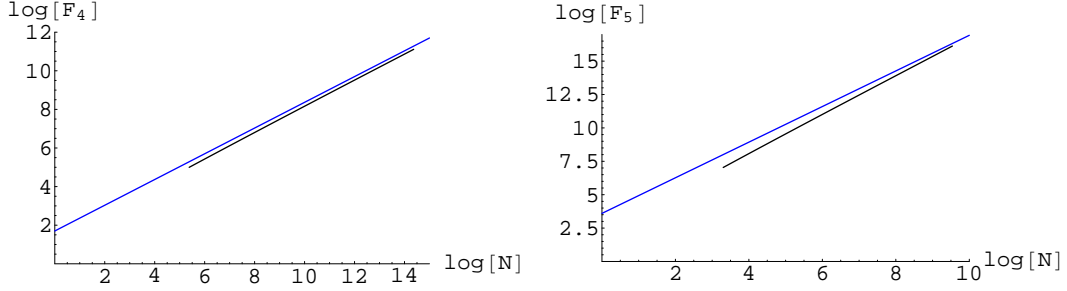


Abbildung 3.4: $\log F_4$ (links) bzw. $\log F_5$ (rechts) aufgetragen gegen $\log N$ (schwarze Linie) für $\tilde{\epsilon} = 0$. Die Vergleichsline (blau) hat eine Steigung von $2/3$ (links) bzw. $4/3$ (rechts).

Zuerst soll das Integral $\overline{\mu^{(2)}}$ berechnet werden. Setzt man nach der Unordnungsmittelung (2.92) und (3.5) in (3.76) ein, so fällt auf, dass die Gaußförmige Korrelationsfunktion (3.5) nicht ohne weiteres in Kugelkoordinaten ausgedrückt werden kann. Hierzu soll die Formel [24, (8.88)]

$$e^{-(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2 / 2\epsilon^2} = e^{-(r_1^2 + r_2^2) / 2\epsilon^2} \sqrt{\frac{8\pi^3 \epsilon^2}{r_1 r_2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l I_{l+1/2}(r_1 r_2 / \epsilon^2) Y_{lm}(\theta_2, \phi_2) Y_{lm}^*(\theta_1, \phi_1) \quad (3.114)$$

verwendet werden, wobei $I_\nu(x)$ die modifizierte Besselfunktion beschreibt. Setzt man diese Formel und (3.74) schließlich ebenfalls in $\overline{\mu_c^{(2)}}$ ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \overline{\mu_c^{(2)}} &= - \int_0^\infty dr_{1,2} \int d\Omega_{1,2} \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \frac{R}{\epsilon^2 \hbar \omega} e^{-(r_1^2 + r_2^2)(\alpha/2 + 1/2\epsilon^2)} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \\ &\quad \times I_{l+1/2}(r_1 r_2 / \epsilon^2) Y_{lm}(\theta_2, \phi_2) Y_{lm}^*(\theta_1, \phi_1) Y_{l'm'}^*(\theta_2, \phi_2) Y_{l'm'}(\theta_1, \phi_1) \frac{\Gamma(1/2 + \nu - \lambda)}{\Gamma(1 + 2\nu)} \\ &\quad \times [\theta(r_1 - r_2) M_{\lambda,\nu}(\alpha r_2^2) W_{\lambda,\nu}(\alpha r_1^2) + \theta(r_2 - r_1) M_{\lambda,\nu}(\alpha r_1^2) W_{\lambda,\nu}(\alpha r_2^2)] . \end{aligned} \quad (3.115)$$

Die Abkürzungen lauten $\lambda = \mu_c^{(0)} / 2\hbar\omega$, $\nu = l' / 2 + 1/4$ und $\alpha = M\omega / \hbar$, $d\Omega$ beschreibt hier das Raumwinkelement. Die Integration über die Winkel kann aufgrund der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen ausgeführt werden:

$$\int d\Omega Y_{l,m}^*(\theta, \phi) Y_{l',m'}(\theta, \phi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} . \quad (3.116)$$

Die verbliebene Summe über m kann ausgeführt werden, da $\overline{\mu_c^{(2)}}$ nach der Integration über die Winkel nicht mehr von m abhängt. Außerdem stellt man fest, dass die Integrale über

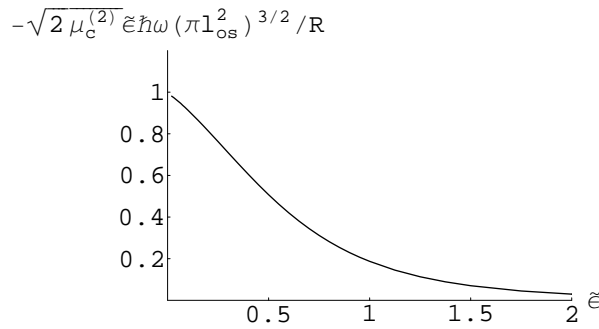


Abbildung 3.5: $-\overline{\mu_c^{(2)}} \tilde{\epsilon}$ aufgetragen gegen $\tilde{\epsilon}$ mit $l_{\text{os}} = \sqrt{\hbar/M\omega}$.

die beiden Terme in der eckigen Klammer den gleichen Beitrag liefern. Setzt man λ und ν ein und führt die Substitution $\sqrt{\alpha}r_1=r'_1$, $\sqrt{\alpha}r_2=r'_2$ durch, so erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \overline{\mu_c^{(2)}} &= - \int_0^\infty dr'_2 \int_{r'_2}^\infty dr'_1 \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \frac{2R}{\tilde{\epsilon}^2 \hbar \omega} e^{-(r_1'^2+r_2'^2)(1/2+1/2\tilde{\epsilon}^2)} \sum_{l=1}^\infty \frac{(2l+1)\Gamma(l/2)}{\Gamma(l+3/2)} \\ &\quad \times I_{l+1/2}(r'_1 r'_2 / \tilde{\epsilon}^2) M_{3/4, l/2+1/4}(r_2'^2) W_{3/4, l/2+1/4}(r_1'^2). \end{aligned} \quad (3.117)$$

Hierbei wurde wieder die dimensionslose Korrelationslänge (3.94) benutzt. Der Integrand in $\overline{\mu_c^{(2)}}$ ist im gesamten Integrationsgebiet endlich und lässt sich für verschiedene Korrelationslängen numerisch auswerten. Mithilfe von *Mathematica 4* wurde $\overline{\mu_c^{(2)}}$ auf drei Stellen genau berechnet. Hierzu wurde der Integrand in (3.117) durch $f(x, y, \tilde{\epsilon}, l)$ abgekürzt, so dass sich (3.117) auf folgende Weise annähern lässt:

$$\overline{\mu_c^{(2)}} = - \sum_{l=1}^g \int_0^5 dy \int_y^5 dx f(x, y, \tilde{\epsilon}, l). \quad (3.118)$$

Es genügt, den Integrationsbereich auf den angegebenen Bereich zu begrenzen, da der Integrand im restlichen Integrationsbereich verschwindend klein ist. Man erkennt an Abbildung 3.5, dass $\overline{\mu_c^{(2)}}$ für kleiner werdende $\tilde{\epsilon}$ monoton ansteigt. Allerdings wird es zunehmend schwieriger, $\overline{\mu_c^{(2)}}$ numerisch zu berechnen, da die Reihe über l in (3.117) für kleiner werdende $\tilde{\epsilon}$ immer langsamer konvergiert. Der Limes $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ kann daher numerisch nicht durchgeführt werden.

Als nächstes soll der zweite Beitrag in (3.114) berechnet werden. Da eine analytische Lösung mit dem exakten Propagator nicht möglich scheint, soll hier die führende Ordnung des semiklassischen Propagators (2.195) benutzt werden. Dies ist gerechtfertigt, da im Rahmen dieser Rechnung nur die führende Ordnung bezüglich der Teilchenzahl betrachtet wird. Zunächst werden Schwerpunkt- und Relativkoordinaten eingeführt und die

Abkürzungen $b_c = \hbar\omega\beta_c^{(0)}$ und $\tilde{\epsilon} = \epsilon M\omega/\hbar$ verwendet:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \quad (3.119) \\
&= \frac{R}{2N\hbar^2(2\pi\epsilon^2)^{3/2}b_c^{(0)3}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \int_0^{\hbar\beta_c^{(0)}} d\tau_1 \int_0^{\hbar\beta_c^{(0)}} d\tau_2 \int d^3x_r \int d^3x_s \\
&\times \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \theta(\tau_1 - \tau_2) + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \theta(\tau_2 - \tau_1) \right] \\
&\times \frac{n+k}{[(\tau_1 - \tau_2 + n)(\tau_2 - \tau_1 + k)]^{3/2}} e^{-M\omega\mathbf{x}_s^2(n+k)b_c/2\hbar} e^{-M\omega\mathbf{x}_r^2[(n+k)b_c^{(0)}/(\tau_1 - \tau_2 + n)(\tau_2 - \tau_1 + k) + 1/\tilde{\epsilon}^2]/2\hbar}.
\end{aligned}$$

Die Integrale über \mathbf{x}_s und \mathbf{x}_r sind Gauß-Integrale und können ausgeführt werden:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \\
&= \frac{R}{2N\hbar^2b_c^{(0)3}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \int_0^{\hbar\beta_c^{(0)}} d\tau_{1,2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \theta(\tau_1 - \tau_2) + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \theta(\tau_2 - \tau_1) \right] \\
&\times \frac{1}{(n+k)^{1/2}[b_c^{(0)}(\tau_1 - \tau_2 + n)(\tau_2 - \tau_1 + k) + \tilde{\epsilon}^2(n+k)]^{3/2}}. \quad (3.120)
\end{aligned}$$

Danach wendet man die θ -Funktionen auf die Integrale an und führt die Substitution $\tau'_1 = \tau_1/\hbar\beta_c^{(0)}$, $\tau'_2 = \tau_2/\hbar\beta_c^{(0)} - \tau_2/\hbar\beta_c^{(0)} + n$ durch:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \\
&= -\frac{\beta_c^{(0)2}R}{2Nb_c^{(0)9/2}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^1 d\tau'_1 \int_{\tau'_1+n}^n d\tau'_2 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^1 d\tau'_1 \int_n^{\tau'_1-1+n} d\tau'_2 \right] \\
&\times \frac{1}{(n+k)^{1/2}[-\tau'_2 + \tau'_2(n+k) + \tilde{\epsilon}^2(n+k)/b_c^{(0)}]^{3/2}}. \quad (3.121)
\end{aligned}$$

Dieses Integral lässt sich nach [37, (2.264.5)] lösen und man erhält schließlich nach einiger Vereinfachung

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \\
&= \frac{2\beta_c^{(0)2}R}{Nb_c^{(0)4}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n+4\tilde{\epsilon}^2/b_c^{(0)})\tilde{\epsilon}}. \quad (3.122)
\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis wurde bereits von M. Timmer berechnet [19, 25]. Setzt man hier die führende Ordnung von (2.156) ein, so vereinfacht sich das Ergebnis auf

$$\begin{aligned} & \int_0^{\hbar\beta} d\tau_{1,2} \int d^3x_{1,2} \frac{R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{2N\hbar^2\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) \Bigg|_{\mu=\mu_c^{(0)}}^{\beta=\beta_c^{(0)}} \\ &= \frac{2\beta_c^{(0)2} R}{b_c^{(0)} \zeta(3)} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n + 4\tilde{\epsilon}^2/b_c^{(0)})\tilde{\epsilon}}. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Das Integral verschwindet für $\tilde{\epsilon} \rightarrow \infty$ und strebt für $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ gegen unendlich. Für die Verschiebung der kritischen Temperatur erhält man insgesamt

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} &= \frac{2\beta_c^{(0)} R}{3\zeta(3)\hbar\omega} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left[2^{3/2} \zeta(2) \int_0^{\infty} dr'_2 \int_{r'_2}^{\infty} dr'_1 \frac{1}{\tilde{\epsilon}^2} e^{-(r_1'^2 + r_2'^2)(1/2 + 1/2\tilde{\epsilon}^2)} \right. \\ &\quad \times \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l+1)\Gamma(l/2)}{\Gamma(l+3/2)} I_{l+1/2}(r'_1 r'_2 / \tilde{\epsilon}^2) M_{3/4, l/2+1/4}(r_2'^2) W_{3/4, l/2+1/4}(r_1'^2) \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n + 4\tilde{\epsilon}^2/b_c^{(0)})\tilde{\epsilon}} \right] \end{aligned} \quad (3.124)$$

bzw. nach Einführung einer dimensionslosen Unordnungsstärke $\tilde{R} = R M^{3/2} \omega^{-1/2} \hbar^{-7/2}$ und $\hbar\omega\beta_c^{(0)} = \zeta(3)^{1/3} N^{1/3}$:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} &= \frac{2\tilde{R}}{3N^{1/3}\zeta(3)^{2/3}(2\pi)^{3/2}} \left\{ 2^{3/2} \zeta(2) \int_0^{\infty} dr'_2 \int_{r'_2}^{\infty} dr'_1 \frac{1}{\tilde{\epsilon}^2} e^{-(r_1'^2 + r_2'^2)(1/2 + 1/2\tilde{\epsilon}^2)} \right. \\ &\quad \times \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l+1)\Gamma(l/2)}{\Gamma(l+3/2)} I_{l+1/2}(r'_1 r'_2 / \tilde{\epsilon}^2) M_{3/4, l/2+1/4}(r_2'^2) W_{3/4, l/2+1/4}(r_1'^2) \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n[n + 4\tilde{\epsilon}^2 N^{1/3} / \zeta(3)]\tilde{\epsilon}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.125)$$

Die Verschiebung $\Delta T_c/T_c^{(0)}$ ist also in führender Ordnung für festes $\tilde{\epsilon}$ und festes R proportional zu $N^{-1/6}$ bzw. für festes $\tilde{\epsilon}$ und festes \tilde{R} proportional zu $N^{-1/3}$ und verschwindet somit im thermodynamischen Limes. Die rechte Grafik von Abbildung 3.6 zeigt den Logarithmus von (3.125) aufgetragen gegen $\log N$. An der Steigung ist erkennbar, dass die Verschiebung der kritischen Temperatur für große Teilchenzahlen proportional zu $N^{-1/3}$ ist.

In der linken Grafik von Abbildung 3.6 ist die Verschiebung der kritischen Temperatur gemäß (3.125) gegen die dimensionslose Korrelationslänge $\tilde{\epsilon}$ aufgetragen. Man erkennt, dass die Verschiebung in dem aufgetragenen Parameterbereich positiv ist und ein Maximum im Bereich $0 < \tilde{\epsilon} < 1$ aufweist. Für kleinere $\tilde{\epsilon}$ wird die Verschiebung kleiner und scheint

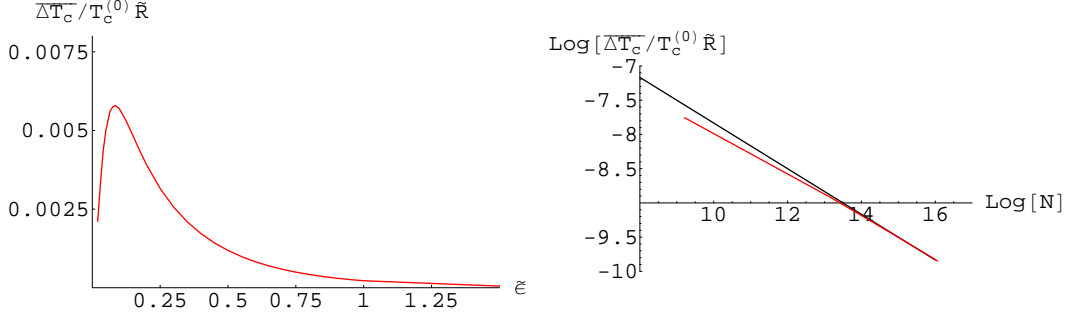


Abbildung 3.6: Links: $\overline{\Delta T_c}/T_c^{(0)} \tilde{R}$ aufgetragen gegen $\tilde{\epsilon}$ für $N=10^5$. Rechts: $\text{Log}(\overline{\Delta T_c}/T_c^{(0)} \tilde{R})$ aufgetragen gegen $\text{Log} N$ für $\tilde{\epsilon}=1$. Die Vergleichsgerade hat eine Steigung von $-1/3$.

gegen null zu streben, der exakte Grenzwert für $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ kann aufgrund der numerischen Berechnung von (3.117) nicht bestimmt werden. Für große $\tilde{\epsilon}$ verschwindet die Verschiebung der kritischen Temperatur. Dies ist auch zu erwarten, da das Zufallspotential mit größer werdendem $\tilde{\epsilon}$ flacher wird.

Die linke Grafik von Abbildung 3.7 zeigt die Verschiebung der kritischen Temperatur für zwei verschiedene Teilchenzahlen aufgetragen gegen $\tilde{\epsilon} N^{1/6}$. Man erkennt, dass die Maxima bei ungefähr dem gleichen Wert für $\tilde{\epsilon} N^{1/6}$ zu finden sind. In der rechten Grafik von Abbildung 3.7 wird diese Beobachtung genauer untersucht, indem der Logarithmus des Maximums $\tilde{\epsilon}_M$ gegen den Logarithmus verschiedener Teilchenzahlen zwischen $N=10^3$ und $N=2 \cdot 10^5$ aufgetragen ist. Anhand der Steigung lässt sich erkennen, dass das Maximum der Verschiebung für experimentell relevante Teilchenzahlen ungefähr mit $N^{-1/6}$ skaliert:

$$\tilde{\epsilon}_M N^{1/6} \approx 0.56. \quad (3.126)$$

Dies wird mit (2.156) und (3.94) zu

$$\frac{\epsilon_M}{\lambda_c} \approx 0.22 \quad (3.127)$$

mit der thermischen Wellenlänge $\lambda_c = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta_c^{(0)}/M}$. Der maximale Unordnungseffekt auf die kritische Temperatur wird also dann erreicht, wenn die Korrelationslänge ϵ und die thermische Wellenlänge λ_c der Teilchen mit der Temperatur $T_c^{(0)}$ ungefähr gleich groß sind. Die positive Verschiebung für die kritische Temperatur kann physikalisch so verstanden werden, dass das Quantengas von vielen Potentialmulden durchsetzt ist, welche die Teilchen anziehen. Im Fallenzentrum bewirkt dies eine Erhöhung der Teilchendichte und somit auch eine Erhöhung der kritischen Temperatur. In diesem Sinne lässt sich die Unordnung als eine attraktive effektive Wechselwirkung verstehen [25].

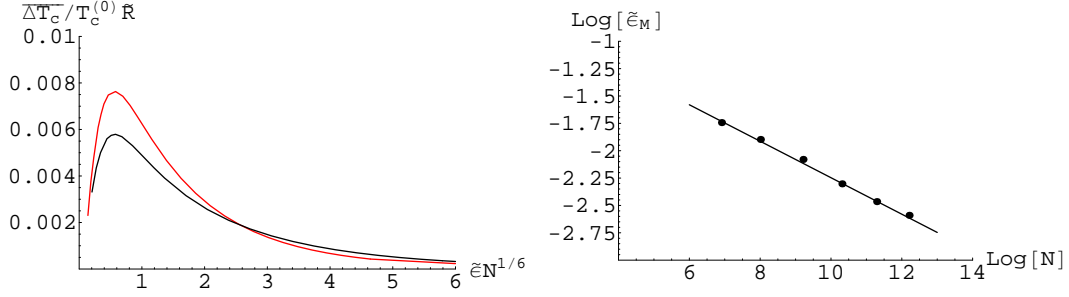


Abbildung 3.7: Links: $\overline{\Delta T_c}/T_c^{(0)} \tilde{R}$ gemäß (3.125) aufgetragen gegen $\tilde{\epsilon} N^{1/6}$ für $N=10^4$ (rot) sowie $N=10^5$ (schwarz). Rechts: Logarithmus des Maximums $\tilde{\epsilon}_M$ von (3.125) aufgetragen gegen $\text{Log} N$. Die Vergleichsgerade hat eine Steigung von $-1/6$.

3.7.5 Vergleich mit der Literatur

In diesem Abschnitt wird das Ergebnis für die Verschiebung der kritischen Temperatur mit früheren Arbeiten von M. Timmer verglichen. Gefunden wurde für die Verschiebung der kritischen Temperatur folgendes Ergebnis [19, 25]:

$$\frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)} T_i} = \frac{2\tilde{R}}{3N^{1/3}\zeta(3)^{2/3}(2\pi)^{3/2}} \left\{ \frac{\zeta(2)}{\tilde{\epsilon}} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n[n + 4\tilde{\epsilon}^2 N^{1/3}/\zeta(3)]\tilde{\epsilon}} \right\}. \quad (3.128)$$

Trägt man (3.125) und (3.128) gegen $\tilde{\epsilon}$ auf, so kann man anhand von Abbildung 3.8 erkennen, dass sich die Ergebnisse qualitativ unterscheiden. Die Verschiebung (3.125) ist kleiner als die von M. Timmer berechnete. Für kleine $\tilde{\epsilon}$ ist der relative Unterschied klein, während dieser für größer werdende $\tilde{\epsilon}$ anwächst, da (3.125) für große $\tilde{\epsilon}$ wesentlich schneller gegen null strebt als (3.128).

Der Unterschied beider Ergebnisse soll im Folgenden genauer untersucht werden. Zunächst wird (3.125) umgeschrieben zu

$$\frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} = \frac{2\tilde{R}}{3N^{1/3}\zeta(3)^{2/3}(2\pi)^{3/2}} \left\{ \frac{f(\tilde{\epsilon})}{\tilde{\epsilon}} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n[n + 4\tilde{\epsilon}^2 N^{1/3}/\zeta(3)]\tilde{\epsilon}} \right\}, \quad (3.129)$$

mit der Abkürzung

$$f(\tilde{\epsilon}) = 2^{3/2}\zeta(2) \int_0^{\infty} dr'_2 \int_{r'_2}^{\infty} dr'_1 \frac{1}{\tilde{\epsilon}} e^{-(r_1'^2 + r_2'^2)(1/2 + 1/2\tilde{\epsilon}^2)} \\ \times \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l+1)\Gamma(l/2)}{\Gamma(l+3/2)} I_{l+1/2}(r'_1 r'_2 / \tilde{\epsilon}^2) M_{3/4, l/2+1/4}(r_2'^2) W_{3/4, l/2+1/4}(r_1'^2). \quad (3.130)$$

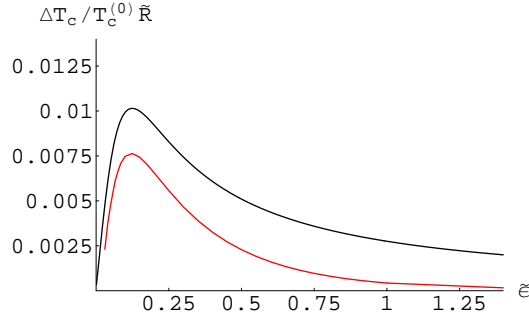


Abbildung 3.8: (3.125) (rot) und (3.128) (schwarz) aufgetragen gegen $\tilde{\epsilon}$ für $N=10^4$.

Mit (3.130) lässt sich die Differenz von (3.129) und (3.128) schreiben als

$$\frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)}} - \frac{\overline{\Delta T_c}}{T_c^{(0)} \text{Ti}} = \frac{2\tilde{R}}{3\tilde{\epsilon}N^{1/3}\zeta(3)^{2/3}(2\pi)^{3/2}} [f(\tilde{\epsilon}) - \zeta(2)]. \quad (3.131)$$

Es besteht also für festes $\tilde{\epsilon}$ stets eine Diskrepanz, die erst im Limes $N \rightarrow \infty$ verschwindet. In Anhang C wird gezeigt, dass sich die Ergebnisse von M. Timmer mithilfe des effektiven Potentials reproduzieren lassen, sofern die Unordnungsmittelung bereits am großkanonischen Potential in Abhängigkeit von den Strömen durchgeführt wird, bevor die Legendre-Transformation von den Strömen j^*, j zu den Feldmittelwerten Ψ^*, Ψ durchgeführt wird. Die Ursache der verschiedenen Ergebnisse (3.125) und (3.128) liegt deshalb vermutlich in der Art begründet, wie die Unordnungsmittelung durchgeführt wird. Während der Herleitung von (3.125) wird die kritische Temperatur als ein Funktional des Zufallspotentials betrachtet und ist prinzipiell bei Kenntnis dieses Potentials auch für eine einzelne Realisierung berechenbar. Die Unordnungsmittelung wird erst an dem endgültigen Ausdruck für die kritische Temperatur durchgeführt. Bei der Herleitung von (3.128) wird bereits das großkanonische Potential über viele Zufallspotentiale gemittelt und aus dieser die kritische Temperatur bestimmt. Eingesetzt wird in dieses das chemische Potential am kritischen Punkt, das mithilfe der unordnungsgemittelten Selbstenergie berechnet wird. Dies entspricht einer unkontrollierten Näherung, da im Allgemeinen gilt:

$$\overline{\Delta T_c[U(\mathbf{x})](\mu_c[\overline{\Sigma]})} \neq \overline{\Delta T_c[U(\mathbf{x})](\mu_c[\Sigma])}, \quad (3.132)$$

wobei Σ die Selbstenergie bezeichnet.

3.7.6 Varianz und Standardabweichung

Die Varianz $\sigma_{T_c}^2$ zur mittleren Verschiebung der kritischen Temperatur berechnet man wie folgt:

$$\sigma_{T_c}^2 = \overline{(T_c - \overline{T_c})^2}. \quad (3.133)$$

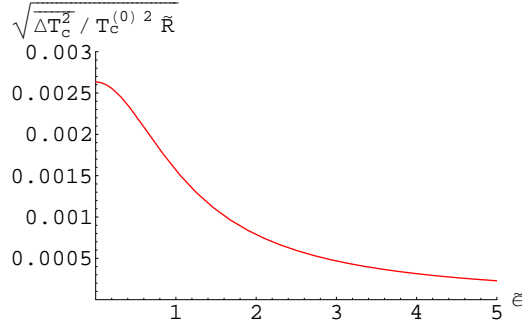


Abbildung 3.9: Standardabweichung (3.138) aufgetragen gegen $\tilde{\epsilon}$ für $N=10^5$.

Berücksichtigt werden soll hierbei nur die führende Ordnung in R :

$$\sigma_{T_c}^2 = \overline{\left(\frac{T_c^{(1)}}{T_c^{(0)}}\right)^2} + \dots \quad (3.134)$$

Der benötigte Mittelwert wurde schon in (3.90) berechnet, man erhält im thermodynamischen Limes großer Teilchenzahlen

$$\sigma_{T_c}^2 = \frac{\zeta(2)^2 \beta_c^{(0)2} R}{9\zeta(3)^2 (1 + \tilde{\epsilon}^2)^{3/2}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \quad (3.135)$$

bzw. für dimensionslose Unordnungsstärke $\tilde{R}=R M^{3/2}\omega^{-1/2}\hbar^{-7/2}$ unter Beachtung von (2.156)

$$\sigma_{T_c}^2 = \frac{\zeta(2)^2 \tilde{R}}{9\zeta(3)^{4/3} N^{2/3} (2\pi)^{3/2} (1 + \tilde{\epsilon}^2)^{3/2}} \cdot \quad (3.136)$$

Die Standardabweichung σ_{T_c} entspricht der Wurzel der Varianz $\sigma_{T_c}^2$

$$\sigma_{T_c} = \frac{\zeta(2)\beta_c^{(0)}\sqrt{R}}{3\zeta(3)(1 + \tilde{\epsilon}^2)^{3/4}} \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/4} \quad (3.137)$$

bzw.

$$\sigma_{T_c} = \frac{\zeta(2)\sqrt{\tilde{R}}}{3\zeta(3)^{2/3} N^{1/3} (2\pi)^{3/4} (1 + \tilde{\epsilon}^2)^{3/4}} \cdot \quad (3.138)$$

Die Standardabweichung ist für festes $\tilde{\epsilon}$ und festes R proportional zu $N^{-1/4}$ bzw. für festes $\tilde{\epsilon}$ und festes \tilde{R} proportional zu $N^{-1/3}$, im Limes $N \rightarrow \infty$ verschwindet die Standardabweichung. In Abbildung 3.9 ist die Standardabweichung für verschiedene $\tilde{\epsilon}$ aufgetragen. Für größer werdende $\tilde{\epsilon}$ wird die Standardabweichung kleiner, da das Zufallspotential zunehmend flacher wird. Im Limes $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ strebt die Standardabweichung gegen ihr Maximum.

Während die Verschiebung der kritischen Temperatur in diesem Limes verschwindet, erreicht die Standardabweichung dort gerade ihren größten Wert. Hieraus lässt sich schließen, dass die kritische Temperatur keine selbstmittelnde Größe ist, da man in diesem Fall erwarten würde, dass die Standardabweichung im Limes $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ verschwindet.

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

In Kapitel 2 wird das ideale Bose-Gas in einer isotropen harmonischen Falle mittels eines effektiven Potentials beschrieben. Die großkanonische Zustandssumme, die man durch Aufsummieren aller möglichen Konfigurationen der Schrödinger-Felder erhält, wird dadurch genähert, dass die Schrödinger-Felder in den Feldmittelwert und die Fluktuationen zerlegt werden. Dabei müssen die Fluktuationen senkrecht auf dem Feldmittelwert stehen und die Integration in der Zustandssumme beschränkt sich nur noch auf die Fluktuationen. Diese semiklassische Näherung ist anwendbar, solange der Feldmittelwert, der effektiv dem Grundzustand entspricht, eine makroskopische Größe darstellt. Der Ansatz des effektiven Potentials ermöglicht die Herleitung einer semiklassischen Näherung für alle thermodynamischen Größen, die keine Divergenzen aufweist und eine Verallgemeinerung der Theorie von H. Kleinert für die kritische Temperatur [24] auf alle Temperaturen darstellt. Dies wird anhand der kritischen Temperatur, des Kondensatanteiles und der Wärmekapazität für $D=3$ Dimensionen demonstriert. Dabei werden die bereits bekannten semiklassischen Näherungen reproduziert [5, 6]. Die Ordnungen, die bisher bei herkömmlichen semiklassischen Entwicklungen unphysikalische Divergenzen aufwiesen, zeigen eine zusätzliche logarithmische Abhängigkeit von der Teilchenzahl. In $D=3$ Raumdimensionen stellt sich heraus, dass die erste Finite-Size-Korrektur der Wärmekapazität zu einer Verringerung des Sprunges an der kritischen Temperatur führt und dass die zweiten Finite-Size-Korrekturen der kritischen Temperatur und des Kondensatanteils wie die schon bekannten ersten Korrekturen zu einer Verkleinerung der jeweiligen Größe führen. Anschließend wird eine semiklassische Näherung für den exakten Vielteilchen-Propagator dieses Systems in $D=3$ Dimensionen angegeben, welche die beiden führenden Ordnungen der zuvor neu erlangten semiklassischen Näherung der Teilchenzahlgleichung reproduziert.

Ein weiteres Anwendungsgebiet dieser Theorie sind Bose-Gase in $D=1, 2$ Dimensionen. Die in Kapitel 2 hergeleitete semiklassische Näherung wurde allgemein für D Dimensionen ausgeführt, deshalb ist es ohne weiteres möglich, auch semiklassische Näherungen der thermodynamischen Größen des idealen Bose-Gases in $D=1, 2$ Dimensionen zu berech-

nen. Besonders der Fall $D=1$ ist vielversprechend, da die kritische Temperatur in diesem Fall nicht mit der herkömmlichen semiklassischen Näherung zu berechnen ist [6, 30]. Hinzu kommt außerdem, dass für dieses System bisher noch keine analytische Näherung für die Wärmekapazität gefunden wurde. Weitere Anwendungsmöglichkeiten bietet die Theorie auch für anisotrope harmonische oder anharmonische Potentiale. Hierfür ist es allerdings notwendig, die hier behandelte semiklassische Entwicklung entsprechend zu modifizieren.

In Kapitel 3 wird der Einfluss schwacher Unordnung auf eine ideales Bose-Gas untersucht, das sich in einer isotropen harmonischen Falle befindet. Berechnet wird der Unordnungseffekt auf die kritische Temperatur, wobei analytisch über viele Realisierungen von Unordnungspotentialen gemittelt wird. Die Verschiebung der kritischen Temperatur wird als ein Funktional des Zufallspotentials berechnet und die Unordnungsmittelung erst am Ende der Rechnung durchgeführt. Dieser Ansatz ermöglicht es, neben der mittleren Verschiebung der kritischen Temperatur auch die Standardabweichung für diesen Mittelwert zu berechnen. Wie in Kapitel 2 wird das Bose-Gas durch ein effektives Potential beschrieben, wobei das zusätzliche schwache Unordnungspotential störungstheoretisch behandelt wird. Die Beiträge, die linear vom Zufallspotential abhängen und somit nicht zur mittleren Verschiebung der kritischen Temperatur beitragen, erzeugen die führende Ordnung der Standardabweichung, da die kritische Temperatur für deren Berechnung quadriert werden muss. Es stellt sich heraus, dass der Mittelwert der kritischen Temperatur von den Ergebnissen voriger Arbeiten [19] abweicht, aber qualitativ die gleichen Aussagen liefert. Die Abweichung wird dadurch erklärt, dass die Unordnungsmittelung im Unterschied zu [19] erst zum Ende der Rechnung durchgeführt wird. Die kritische Temperatur wird im zugänglichen Parameterbereich durch den Einfluss der schwachen Unordnung im Mittel vergrößert, wobei sich der maximale Effekt dann einstellt, wenn die Korrelationslänge ungefähr die gleiche Größe wie die thermische Wellenlänge der Bosonen für die kritische Temperatur besitzt. Die durch die Unordnung entstehende zufällige Potentialverteilung erzeugt einen Effekt, der mit dem einer attraktiven effektiven Wechselwirkung verglichen werden kann [19]. Für sehr große Korrelationslängen hingegen verschwindet der Unordnungseffekt auf die kritische Temperatur, da die aus dem Zufallspotential resultierenden Kräfte in diesem Bereich zunehmend schwächer werden. Die Standardabweichung verschwindet ebenfalls für sehr große Korrelationslängen, allerdings erreicht sie ihr Maximum im Limes verschwindender Korrelationslänge. Dies lässt den Schluss zu, dass der Wert des Zufallspotentials im Fallenzentrum in diesem Limes einen maßgeblichen Einfluss auf die Teilchendichte besitzt. Insbesondere bedeutet dies, dass die kritische Temperatur selbst für beliebig kleine Korrelationslängen keine selbstmittelnde Größe darstellt, da die Standardabweichung in diesem Fall verschwinden müsste.

Eine weitere Anwendungsmöglichkeit dieses Ansatzes besteht in der Untersuchung von Unordnung in $D=1, 2$ Dimensionen, da beispielsweise in dem Experiment vom M. Inguscio ein quasi-eindimensionales ungeordnetes System untersucht wird [12]. Interessant wäre auch eine Berücksichtigung der Wechselwirkung mit dem Ziel, die superfluide Dichte der Teilchen zu untersuchen. Problematisch hierbei ist allerdings, dass die Wechselwirkung bei

Temperaturen der Größenordnung der kritischen Temperatur schwierig zu beschreiben ist. Eine weitere interessante Herausforderung besteht darin, die Standardabweichung auch für andere physikalische Größen wie den kollektiven Schwingungen zu berechnen, deren Unordnungsmittel bereits berechnet wurde [38].

Kapitel 5

Danksagung

Zuallererst möchte ich Prof. Dr. Dr. h.c. Robert Graham und Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster für die Betreuung meiner Diplomarbeit danken.

Hilfreich zur Seite standen mir Sven Biermann, Dr. Gianmaria Falco, Konstantin Glaum, Walja Korolevski, Dr. Konstantin Krutitsky, Aristeu Lima, Dr. Patrick Navez und Matthias Timmer mit ihren Ratschlägen und Ideen.

Hervorzuheben ist auch die unermüdliche Hilfe von Monika Motzko im Bereich der Verwaltung und Dr. Rüdiger Oberhage bei Problemen mit der Technik.

Außerdem gebührt mein Dank dem SFB/TR 12 für die Förderung dieser Diplomarbeit. Schließlich danke ich Melanie und meiner Familie für die wertvolle Unterstützung, die sie mir bei der Erstellung dieser Arbeit gewährten.

Anhang A

Resummation

In diesem Anhang werden Reihen der Form

$$I(A, b, D) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-bAk}}{(1 - e^{-bk})^D} \quad (\text{A.1})$$

betrachtet. Unter der Annahme $0 < b \ll 1$ ist es möglich, ein Verfahren anzuwenden, das eine gute Näherung der Reihe in Potenzen von b liefert [24, Appendix 7A].

A.1 Euler-MacLaurin-Formel

Prinzipiell könnte man (A.1) für kleine b durch die Euler-MacLaurin-Formel [24, (2.530)]

$$\sum_{k=0}^g f(k) = \int_0^g dk f(k) + \frac{f(0) + f(g)}{2} + \dots \quad (\text{A.2})$$

approximieren. Das dabei auftretende Integral würde allerdings divergieren, da der Integrand an der Stelle $k=0$ divergiert. Deshalb entwickelt man zunächst den Nenner von (A.1) für kleine b

$$\frac{1}{(1 - e^{-bk})^D} = \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D)}{(bk)^{D-l}} + \mathcal{O}(b^0) \quad (\text{A.3})$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$C_0(D) = 1, \quad C_1(D) = \frac{D}{2}, \quad C_2(D) = \frac{D(3D-1)}{24}, \quad C_3(D) = \frac{D^2(D-1)}{48}, \dots \quad (\text{A.4})$$

Diese Entwicklung zieht man in (A.1) vom Nenner ab und addiert sie wieder hinzu:

$$I(A, b, D) = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-bAk} \left[\frac{1}{(1 - e^{-bk})^D} - \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D)}{(bk)^{D-l}} \right] + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D) e^{-bAk}}{(bk)^{D-l}}. \quad (\text{A.5})$$

Damit hat man erreicht, dass man den ersten Beitrag von (A.5) mithilfe der Euler-MacLaurin-Formel (A.2) in ein Integral mit den Grenzen null und unendlich umwandeln kann, da die für $k=0$ divergenten Beiträge abgezogen wurden. Der Fehler, der dadurch entsteht, dass man in (A.5) den Term für $k=0$ hinzufügt, kann wie folgt berechnet werden. Zunächst stellt man den ersten Term in (A.5) durch eine Taylor-Entwicklung für kleine b dar. Dies ergibt

$$I(A, b, D) = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-bAk} \sum_{l=D}^{\infty} \frac{C_l(D)}{(bk)^{D-l}} + \dots \quad (\text{A.6})$$

Jetzt führt man die Substitution $l'=l-D$ durch und addiert und subtrahiert den Beitrag der Reihe für $k=0$:

$$I(A, b, D) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-bAk} \sum_{l'=0}^{\infty} C_{l'+D}(D) (bk)^{l'} - C_D(D) + \dots \quad (\text{A.7})$$

Die Korrektur, die durch das Hinzufügen des Beitrages für $k=0$ entsteht, ist also von der Ordnung $\mathcal{O}(b^0)$. Die Gleichung (A.5) wird mithilfe dieser Umformung zu

$$I(A, b, D) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-bAk} \left[\frac{1}{(1 - e^{-bk})^D} - \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D)}{(bk)^{D-l}} \right] + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D) e^{-bAk}}{(bk)^{D-l}} + \mathcal{O}(b^0). \quad (\text{A.8})$$

Als nächstes wendet man (A.2) auf die Klammer in (A.8) an. Die höheren Korrekturen in (A.2) können vernachlässigt werden, da diese aufgrund der abgezogenen Entwicklung von der Ordnung $\mathcal{O}(b^0)$ sind. Für (A.8) folgt also

$$I(A, b, D) = \int_0^{\infty} dk e^{-bAk} \left[\frac{1}{(1 - e^{-bk})^D} - \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D)}{(bk)^{D-l}} \right] + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D) e^{-bAk}}{(bk)^{D-l}} + \mathcal{O}(b^0). \quad (\text{A.9})$$

Die beiden Terme in (A.9) werden nun folgendermaßen behandelt:

- In dem Integral von (A.9) wird die Substitution $x=e^{-bk}$ durchgeführt, woraus direkt folgt, dass der Beitrag des Integrals von der Ordnung $\mathcal{O}(b^{-1})$ ist. Außerdem kann man das Integral mithilfe der Beta-Funktion [37, (8.380)]

$$B(x, y) = \int_0^1 dt t^{x-1} (1-t)^{y-1} = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad (\text{A.10})$$

auf die Gamma-Funktion zurückführen. Die weiteren Terme unter dem Integral lassen sich direkt mit der Integraldarstellung der Gamma-Funktion [37, (8.310)]

$$\int_0^{\infty} dk k^{x-1} e^{-ka} = \frac{\Gamma(x)}{a^x} \quad (\text{A.11})$$

auswerten.

- Den zweiten Term auf der rechten Seite von (A.9) kann man durch die polylogarithmischen Funktionen (2.20) ausdrücken.

Dies ergibt schließlich für (A.9):

$$I(A, b, D) = \frac{1}{b} \left[\frac{\Gamma(1-D)\Gamma(A)}{\Gamma(1+A-D)} - \sum_{l=0}^{D-1} C_l(D) \Gamma(1+l-D) A^{D-l-1} \right] + \sum_{l=0}^{D-1} \frac{C_l(D)}{b^{D-l}} \zeta_{D-l}(e^{-Ab}) + \mathcal{O}(b^0). \quad (\text{A.12})$$

A.2 Dimensionale Regularisierung

In dieser Arbeit sind die Reihen (A.1) nur für ganzzahlige Dimensionen D von Interesse, für welche die Gamma-Funktionen in (A.12) divergieren. Daher wenden wir das Verfahren der dimensional Regularisierung an [29] und setzen $D=d-\epsilon$ mit $d=1, 2, 3, 4, \dots$, wobei wir den Limes $\epsilon \rightarrow 0$ betrachten. Dies führt zunächst auf

$$I(A, b, d) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{b} \left[\frac{\Gamma(1-d+\epsilon)\Gamma(A)}{\Gamma(1+A-d+\epsilon)} - \sum_{l=0}^{d-1} C_l(d-\epsilon) \Gamma(1+l-d+\epsilon) A^{d-l-1-\epsilon} \right] + \sum_{l=0}^{d-1} \frac{C_l(d)}{b^{d-l}} \zeta_{d-l}(e^{-Ab}) + \mathcal{O}(b^0). \quad (\text{A.13})$$

Vor Ausführen des Limes $\epsilon \rightarrow 0$ muss dieser Ausdruck für kleine ϵ entwickelt werden. Dabei benötigt man für die Gamma-Funktionen die Entwicklung

$$\Gamma(-n+\epsilon) = \frac{(-1)^n}{n!} \left\{ \frac{1}{\epsilon} + \psi_0(n+1) + \mathcal{O}(\epsilon^1) \right\} \quad (\text{A.14})$$

mit $n=1, 2, 3, \dots$ und $\epsilon > 0$ [29, (8D.24)]. Die hierbei auftretenden Funktionen der Art

$$\psi_0(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z) \quad (\text{A.15})$$

werden als Eulersche Digammafunktionen bezeichnet. Für diese gilt die Rekursionsbeziehung [29, (8D.6)]

$$\psi_0(z) = \frac{1}{z-1} + \psi_0(z-1), \quad (\text{A.16})$$

mit der Eulerschen Konstante

$$\gamma = -\psi_0(1) = 0.5772\dots \quad (\text{A.17})$$

Außerdem findet die Näherung $x^\epsilon = 1 + \epsilon \ln x + \dots$ für kleine ϵ Verwendung. Bei der Entwicklung der Koeffizienten $C_l(d - \epsilon)$,

$$C_l(d - \epsilon) = C_l^{(0)}(d) - C_l^{(1)}(d)\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (\text{A.18})$$

treten die Entwicklungskoeffizienten

$$C_l^{(0)}(d) = C_l(d), \quad (\text{A.19})$$

$$C_0^{(1)}(d) = 0, \quad C_1^{(1)}(d) = \frac{1}{2}, \quad C_2^{(1)}(d) = \frac{6d-1}{24}, \quad C_3^{(1)}(d) = \frac{d(3d-2)}{48}, \dots \quad (\text{A.20})$$

auf. Insgesamt erhält man damit aus (A.13)

$$\begin{aligned} I(A, b, d) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{(-1)^{d-1}}{b} \left\{ \frac{1}{(d-1)!} \left[\prod_{l=1}^{d-1} (A-l) \right] \left[\frac{1}{\epsilon} - \psi_0(1+A-d) + \psi_0(d) \right] \right. \\ &\quad - \sum_{l=0}^{d-1} \frac{(-1)^l C_l^{(0)}(d)}{(d-l-1)!} \left[\frac{1}{\epsilon} + \psi_0(d-l) - \frac{C_l^{(1)}(d)}{C_l^{(0)}(d)} - \ln(A) \right] A^{d-l-1} \left. \right\} \\ &\quad + \sum_{l=0}^{d-1} \frac{C_l^{(0)}(d)}{b^{d-l}} \zeta_{d-l} (e^{-Ab}) + \mathcal{O}(b^0). \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Dies kann noch weiter vereinfacht werden, indem man die Identität

$$\frac{1}{(d-1)!} \prod_{l=1}^{d-1} (A-l) = \sum_{l=0}^{d-1} \frac{(-1)^l C_l^{(0)}(d)}{(d-l-1)!} A^{d-l-1} \quad (\text{A.22})$$

benutzt, die in Abschnitt A.3 durch vollständige Induktion bewiesen wird. Aufgrund von (A.22) heben sich die Terme in (A.21) proportional zu $1/\epsilon$ gerade weg, so dass der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ ausgeführt werden kann. Außerdem verwendet man die Rekursionsbeziehung (A.16) für die Digammafunktionen. Man erhält schließlich das Ergebnis

$$\begin{aligned} I(A, b, d) &= \frac{1}{b} \sum_{l=0}^{d-1} \frac{(-1)^{d-l-1} C_l^{(0)}(d)}{(d-l-1)!} A^{d-l-1} \left[-\psi_0(1+A-d) + \ln A + \frac{C_l^{(1)}(d)}{C_l^{(0)}(d)} + \sum_{m=d-l}^{d-1} \frac{1}{m} \right] \\ &\quad + \sum_{l=0}^{d-1} \frac{C_l^{(0)}(d)}{b^{d-l}} \zeta_{d-l} (e^{-Ab}) + \mathcal{O}(b^0). \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Dies stellt unter der Annahme $0 < b \ll 1$ eine gute Näherung der Reihe (A.1) dar, da der Fehler von der Ordnung $\mathcal{O}(b^0)$ ist. Spezialisiert man auf $d=1, 2, 3, 4$, so erhält man

$$I(A, b, 1) = \frac{1}{b} [\ln A - \psi_0(A) + \zeta_1(e^{-Ab})] + \mathcal{O}(b^0), \quad (\text{A.24})$$

$$I(A, b, 2) = \frac{1}{b^2} \zeta_2(e^{-Ab}) + \frac{1}{b} \left\{ -(A-1) [\ln A - \psi_0(A-1)] + \frac{3}{2} + \zeta_1(e^{-Ab}) \right\} + \mathcal{O}(b^0), \quad (\text{A.25})$$

$$I(A, b, 3) = \frac{1}{b^3} \zeta_3(e^{-Ab}) + \frac{3}{2b^2} \zeta_2(e^{-Ab}) + \frac{1}{b} \left\{ \frac{1}{2} (A-1)(A-2) [\ln A - \psi_0(A-2)] - \frac{5}{4} A + \frac{53}{24} + \zeta_1(e^{-Ab}) \right\} + \mathcal{O}(b^0), \quad (\text{A.26})$$

$$I(A, b, 4) = \frac{1}{b^4} \zeta_4(e^{-Ab}) + \frac{2}{b^3} \zeta_3(e^{-Ab}) + \frac{11}{6b^2} \zeta_2(e^{-Ab}) + \frac{1}{b} \left\{ + \frac{7}{12} A^2 - \frac{179}{72} A + \frac{8}{3} - \frac{1}{6} (A-1)(A-2)(A-3) [\ln A - \psi_0(A-3)] + \zeta_1(e^{-Ab}) \right\} + \mathcal{O}(b^0). \quad (\text{A.27})$$

A.3 Vollständige Induktion

Bewiesen werden soll nun die Identität (A.22). Dazu benutzt man die Methode der vollständigen Induktion. Man beginnt zunächst mit der Beobachtung, dass der Induktionsanfang $d=1$ trivial erfüllt ist. Jetzt bleibt noch zu zeigen, dass (A.22) auch für $d+1$ gilt, wenn die Identität für d richtig ist. Schreibt man die linke Seite von (A.22) statt für d für $d+1$ auf, so erhält man wieder mit (A.22)

$$\frac{1}{d!} \prod_{l=1}^d (A-l) = \frac{A-d}{d} \sum_{l=0}^{d-1} \frac{(-1)^l C_l^{(0)}(d)}{(d-l-1)!} A^{d-l-1}. \quad (\text{A.28})$$

Multipliziert man die rechte Seite aus und substituiert man dann in der zweiten Reihe auf der rechten Seite $l'=l+1$, so erhält man nach Abspalten zweier Terme:

$$\begin{aligned} \frac{1}{d!} \prod_{l=1}^d (A-l) &= \frac{1}{d} \left[\frac{C_0^{(0)}(d)}{(d-1)!} A^d - d(-1)^{d-1} C_{d-1}^{(0)}(d) \right] \\ &+ \frac{1}{d} \sum_{l=1}^{d-1} \left[\frac{(-1)^l C_l^{(0)}(d) A^{d-l}}{(d-l-1)!} + \frac{d(-1)^l C_{l-1}^{(0)}(d) A^{d-l}}{(d-l)!} \right]. \quad (\text{A.29}) \end{aligned}$$

Verwendet man auf der linken Seite (A.22) für $d+1$ und fasst die rechte Seite zusammen, so erhält man schließlich

$$\sum_{l=0}^d \frac{(-1)^l C_l^{(0)}(d+1)}{(d-l)!} A^{d-l} = \frac{1}{d} \left[\frac{C_0^{(0)}(d)}{(d-1)!} A^d - d(-1)^{d-1} C_{d-1}^{(0)}(d) \right] + \sum_{l=1}^{d-1} \frac{(-1)^l A^{d-l}}{(d-l)!} \frac{(d-l)C_l^{(0)}(d) + dC_{l-1}^{(0)}(d)}{d}. \quad (\text{A.30})$$

Somit ist noch zu zeigen, dass

$$C_l^{(0)}(d+1) = \frac{(d-l)C_l^{(0)}(d) + dC_{l-1}^{(0)}(d)}{d} \quad (\text{A.31})$$

gilt. Dafür sei zuerst daran erinnert, dass die Koeffizienten $C_l^{(0)}(d)$ aufgrund von (A.3) der Identität

$$\frac{x^d}{(1-e^{-x})^d} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0)}(d) x^l \quad (\text{A.32})$$

entstammen. Zum Beweis von (A.31) wird zunächst die erzeugende Funktion

$$f(x) = \sum_{l=1}^{\infty} a_l(d) x^l \quad (\text{A.33})$$

eingeführt mit den Koeffizienten

$$a_l(d) = \frac{(d-l)C_l^{(0)}(d) + dC_{l-1}^{(0)}(d)}{d}. \quad (\text{A.34})$$

Setzt man die Koeffizienten in (A.33) ein, so erhält man mit (A.32)

$$f(x) = \frac{x^d}{(1-e^{-x})^d} - 1 + \frac{x^{d+1}}{(1-e^{-x})^d} - \frac{x}{d} \frac{\partial}{\partial x} \frac{x^d}{(1-e^{-x})^d}. \quad (\text{A.35})$$

Dies vereinfacht sich zu

$$f(x) = \frac{x^{d+1}}{(1-e^{-x})^{d+1}} - 1. \quad (\text{A.36})$$

Diese Gleichung kann man mithilfe von (A.32) wiederum schreiben als

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(0)}(d+1) x^l - 1. \quad (\text{A.37})$$

Hieraus folgt mit (A.33) und (A.34) die zu beweisende Aussage (A.31). Betrachtet man den ersten Term auf der rechten Seite von (A.30), so stellt man fest, dass aufgrund von

(A.4) $C_0^{(0)}(d) = C_0^{(0)}(d+1)$ gilt, so dass dieser gleich dem nullten Glied der Reihe auf der linken Seite ist. Der zweite Term auf der rechten Seite von (A.30) entspricht dem letzten Glied der Reihe auf der linken Seite, da aufgrund von (A.31) $C_d^{(0)}(d+1) = C_{d-1}^{(0)}(d)$ gilt. Insgesamt erhält man damit aus (A.30), dass die Identität (A.22) auch für $d+1$ bewiesen ist.

Anhang B

Greensche Funktion des harmonischen Oszillators

Ziel dieses Abschnittes ist die Berechnung der Greenschen Funktion in $D=3$ Dimensionen zu der inhomogenen Differentialgleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\omega^2\mathbf{x}^2 - E\right)G_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) = -i\hbar\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \quad (\text{B.1})$$

Dies geschieht mithilfe der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion [39, 5.1.2]. Zuerst wird der Fall $\mathbf{x}\neq\mathbf{x}'$ untersucht:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\omega^2\mathbf{x}^2 - E\right)\psi(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{x}'. \quad (\text{B.2})$$

Transformiert man die Variablen zu Kugelkoordinaten, so erhalt man

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2Mr^2} + \frac{M}{2}\omega^2r^2 - E\right]\psi(r, \theta, \phi) = 0, \quad (\text{B.3})$$

wobei $\hat{\mathbf{L}}$ den Drehimpulsoperator beschreibt. Durch den Separationsansatz $\psi(r, \theta, \phi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ reduziert sich (B.3) auf

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2l(l+1)}{2Mr^2} + \frac{M}{2}\omega^2r^2 - E\right]R_l(r) = 0. \quad (\text{B.4})$$

Fuhrt man hier die Substitutionen $r=\sqrt{\hbar/M\omega\rho}$ und $\epsilon=2E/\hbar\omega$ durch, so erhalt man

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho^2 + \epsilon\right]R_l(\rho) = 0. \quad (\text{B.5})$$

Diese Gleichung lässt sich durch die Substitution $R_l(\rho) = g_l(\rho)/\rho^{3/2}$ umformen zu

$$\frac{\partial^2 g_l(\rho)}{\partial \rho^2} - \frac{4}{\rho^4} \frac{\partial g_l(\rho)}{\partial \rho} + \frac{6g_l(\rho)}{\rho^5} + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho^2 + \epsilon \right] \frac{g_l(\rho)}{\rho^3} = 0. \quad (\text{B.6})$$

Setzt man $x = \rho^2$, so lässt sich diese Gleichung in Whittakers Differentialgleichung überführen:

$$\frac{\partial^2 g_l(x)}{\partial x^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{x} + \frac{1/4 - \mu^2}{x^2} \right] g_l(x) = 0 \quad (\text{B.7})$$

mit $\lambda = \epsilon/4 = E/2\hbar\omega$ und $\mu = l/2 + 1/4$. Zwei linear unabhängige Lösungen dieser Differentialgleichung lauten [36, 7.1.1]

$$M_{\lambda, \mu}(x) = e^{-x/2} x^{\mu+1/2} {}_1F_1(\mu + 1/2 - \lambda; 1 + 2\mu; x) \quad (\text{B.8})$$

sowie

$$W_{\lambda, \mu}(x) = \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu + 1/2 - \lambda)} M_{\lambda, -\mu}(x) + \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(-\mu + 1/2 - \lambda)} M_{\lambda, \mu}(x). \quad (\text{B.9})$$

Es lassen sich also zwei linear unabhängige Radialfunktionen

$$R_l^1(r) = \frac{M_{\lambda, \mu}(\alpha r^2)}{(\alpha r^2)^{3/2}}, \quad R_l^2(r) = \frac{W_{\lambda, \mu}(\alpha r^2)}{(\alpha r^2)^{3/2}} \quad (\text{B.10})$$

finden mit $\alpha = M\omega/\hbar$. Die Greensche Funktion $G_c(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E)$ wird anschließend nach den Funktionen $\psi(r, \theta, \phi)$ entwickelt. Dabei wird in der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion folgender Ansatz gewählt:

$$G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) \left\{ \theta(r-r') [A_{lm}^1 R_l^1(r) + A_{lm}^2 R_l^2(r)] + \theta(r'-r) [B_{lm}^1 R_l^1(r) + B_{lm}^2 R_l^2(r)] \right\}. \quad (\text{B.11})$$

Die Koeffizienten A_{lm}^1 , A_{lm}^2 , B_{lm}^1 und B_{lm}^2 werden aus den Randbedingungen bei $r=r'$ bestimmt, zwei von ihnen müssen allerdings gleich null gesetzt werden, um physikalisch sinnlose divergente Lösungen auszuschließen, denn es gilt [36, 7.6.1]:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_l^1(r) = \infty \quad (\text{B.12})$$

sowie nach [37, (9.220.3)] und [37, (9.220.4)]

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_l^2(r) = \infty. \quad (\text{B.13})$$

Um diese Lösungen auszuschließen, setzt man in (B.11) A_{lm}^1 und B_{lm}^2 gleich null:

$$G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) \left\{ \theta(r-r') A_{lm}^2 R_l^2(r) + \theta(r'-r) B_{lm}^1 R_l^1(r) \right\}. \quad (\text{B.14})$$

Die erste Anschlussbedingung bei $r=r'$ lautet

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) \Big|_{r=r'+\epsilon} = \lim_{\epsilon \downarrow 0} G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) \Big|_{r=r'-\epsilon}. \quad (\text{B.15})$$

Setzt man (B.14) in diese Bedingung ein, multipliziert mit $Y_{l'm'}^*(\theta, \phi)$ und integriert über die Winkel θ, ϕ so erhält man

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \theta(\epsilon) B_{l'm'}^1 R_{l'}^1(r'+\epsilon) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \theta(\epsilon) A_{l'm'}^2 R_{l'}^2(r'-\epsilon). \quad (\text{B.16})$$

Es folgt also die Beziehung

$$B_{l'm'}^1 = A_{l'm'}^2 \frac{R_{l'}^2(r')}{R_{l'}^1(r')}. \quad (\text{B.17})$$

Für die zweite Anschlussbedingung wird zunächst die Identität

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r-r') \delta(\theta-\theta') \delta(\phi-\phi') \quad (\text{B.18})$$

benötigt. Als nächstes drückt man (B.1) in Kugelkoordinaten aus:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \right) G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) = \frac{2M}{\hbar^2} \left(\frac{M}{2} \omega^2 r^2 - E \right) G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) - \frac{2M}{i\hbar r^2 \sin \theta} \delta(r-r') \delta(\theta-\theta') \delta(\phi-\phi'). \quad (\text{B.19})$$

Diese Gleichung wird mit $Y_{l'm'}(\theta, \phi)$ multipliziert, anschließend wird über alle Winkel θ, ϕ sowie bezüglich r über das Intervall $[r'-\epsilon, r'+\epsilon]$ integriert. Dies führt auf die Gleichung

$$\int_{r'-\epsilon}^{r'+\epsilon} dr \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) G_{l'm'}(r, r', \theta', \phi'; E) = \int_{r'-\epsilon}^{r'+\epsilon} dr \frac{2M}{\hbar^2} \left(\frac{M}{2} \omega^2 r^2 - E \right) G_{l'm'}(r, r', \theta', \phi'; E) + \frac{2M}{\hbar r^2} Y_{l',m'}(\theta', \phi') \quad (\text{B.20})$$

mit der Abkürzung

$$G_{l'm'}(r, r', \theta', \phi'; E) = \left\{ \theta(r-r') A_{l'm'}^2 R_{l'}^2(r) + \theta(r'-r) B_{l'm'}^1 R_{l'}^1(r) \right\}. \quad (\text{B.21})$$

Führt man in (B.20) den Limes $\epsilon \downarrow 0$ durch, so tragen der zweite und der dritte Term in der ersten Zeile sowie der erste und der zweite Term in der zweiten Zeile nicht zu (B.20) bei, da die Funktion $G_{l'm'}(r, r', \theta', \phi'; E)$ bei $r=r'$ stetig ist und deren Ableitung nach r höchstens eine endliche Unstetigkeit besitzt. Mit diesen Überlegungen wird (B.20) zu

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \downarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial r} G_{l'm'}(r, r', \theta', \phi'; E) \Big|_{r=r'+\epsilon} - \frac{\partial}{\partial r} G_{l'm'}(r, r', \theta', \phi'; E) \Big|_{r=r'-\epsilon} \right] \\ &= \frac{2iM}{\hbar r'^2} Y_{l',m'}(\theta', \phi'). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Anschließend setzt man (B.17) und (B.21) in diese Anschlussbedingung ein:

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \theta(\epsilon) A_{l'm'}^2 \left[\frac{\partial}{\partial r} R_{l'}^2(r) \Big|_{r=r'+\epsilon} - \frac{R_{l'}^2(r')}{R_{l'}^1(r')} \frac{\partial}{\partial r} R_{l'}^1(r) \Big|_{r=r'-\epsilon} \right] = \frac{2iM}{\hbar r'^2} Y_{l',m'}(\theta', \phi'). \quad (\text{B.23})$$

Nach Ausführen des Limes $\epsilon \rightarrow 0$ erhält man

$$A_{l'm'}^2 = \frac{2iM}{\hbar r'^2} Y_{l',m'}(\theta', \phi') \frac{R_{l'}^1(r')}{R_{l'}^1(r') \frac{\partial}{\partial r'} R_{l'}^2(r') - R_{l'}^2(r') \frac{\partial}{\partial r'} R_{l'}^1(r')}. \quad (\text{B.24})$$

Unter Beachtung von $\rho' = \sqrt{m\omega/\hbar} r'$ lässt sich (B.24) durch eine Wronski-Determinante ausdrücken:

$$A_{l'm'}^2 = \frac{2iM}{\hbar r'^2} Y_{l',m'}(\theta', \phi') \frac{\rho'^2 R_{l'}^1(r')}{2\sqrt{m\omega/\hbar} W[M_{\lambda,\mu}(\rho'^2), W_{\lambda,\mu}(\rho'^2)]}. \quad (\text{B.25})$$

Die Wronski-Determinante der Whittaker-Funktionen (B.8), (B.9) kann der Literatur entnommen werden [36, 7.1.2], insgesamt ergibt dies für $A_{l'm'}^2$

$$A_{l'm'}^2 = - \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{3/2} \frac{i\Gamma(1/2 + \mu - \lambda)}{\omega\Gamma(1 + 2\mu)} Y_{l',m'}(\theta', \phi') R_{l'}^1(r'). \quad (\text{B.26})$$

Für die Greensche Funktion erhält man nach Einsetzen von (B.17) und (B.26) in (B.14)

$$\begin{aligned} G_c(r, \theta, \phi, r', \theta', \phi'; E) &= - \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') \frac{i\Gamma(1/2 + \mu - \lambda)}{\omega(r r')^{3/2} \Gamma(1 + 2\mu)} \\ &\times [\theta(r-r') M_{\lambda,\mu}(\alpha r'^2) W_{\lambda,\mu}(\alpha r^2) + \theta(r'-r) M_{\lambda,\mu}(\alpha r^2) W_{\lambda,\mu}(\alpha r'^2)] \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

mit $\lambda = E/2\hbar\omega$ und $\mu = l/2 + 1/4$. Dieses Ergebnis steht in Übereinstimmung mit der Literatur gemäß [24, (8.91)] und [24, (9.55)] und [40, 6.4.1].

Anhang C

Unordnungsmittel für effektives Potential

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie sich die Ergebnisse von M. Timmer [19, 25] für die Verschiebung der kritischen Temperatur durch schwache Unordnung mithilfe des effektiven Potentials herleiten lassen. Hierbei wird die Unordnungsmittelung bereits am großkanonischen Potential in Abhängigkeit von den Strömen durchgeführt, bevor aus diesem das effektive Potential nach (2.65) bestimmt wird. Die Berechnung des effektiven Potentials erfolgt analog zu den Abschnitten 2.2.3–2.2.5. Zu Beginn wird das erzeugende Funktional (2.62) mit der Wirkung (2.61) betrachtet, allerdings wird die darin enthaltene euklidische Wirkung noch um das Zufallspotential $U(\mathbf{x})$ ergänzt:

$$\mathcal{A}_e[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, \tau)}{\partial \tau} + \hat{H}_E(\mathbf{x}) + U(\mathbf{x}) - \mu \right] \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (\text{C.1})$$

Zur Vereinfachung soll des erzeugende Funktional durch die Abkürzungen (3.13) ausgedrückt werden:

$$Z = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-\int_{12} \psi_1^* G_{12}^{-1} \psi_2 - \int_1 U_1 \psi_1^* \psi_1 / \hbar + \int_1 (\psi_1^* j_1 + \psi_1 j_1^*) / \hbar}. \quad (\text{C.2})$$

Entwickelt man das erzeugende Funktional (C.2) für kleine Zufallspotentiale U bis zur zweiten Ordnung, so erhält man

$$Z = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \left(1 - \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \psi_1^* \psi_1 + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \psi_1^* \psi_1 \psi_2^* \psi_2 + \dots \right) \times e^{-\int_{12} \psi_1^* G_{12}^{-1} \psi_2 + \int_1 (\psi_1^* j_1 + \psi_1 j_1^*) / \hbar}. \quad (\text{C.3})$$

Nach (3.25) lassen sich die Felder in der Klammer durch Funktionalableitungen nach dem Integralkern ausdrücken:

$$Z = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi \left(1 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} \frac{\delta}{\delta G_{22}^{-1}} + \dots \right) \times e^{-\int_{12} \psi_1^* G_{12}^{-1} \psi_2 + \int_1 (\psi_1^* j_1 + \psi_1 j_1^*) / \hbar} . \quad (\text{C.4})$$

Das Funktionalintegral lässt sich nun entsprechend Abschnitt 2.2.4 berechnen, dies führt auf

$$Z = \left(1 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \frac{\delta}{\delta G_{11}^{-1}} \frac{\delta}{\delta G_{22}^{-1}} + \dots \right) e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 / \hbar^2} . \quad (\text{C.5})$$

Zu weiteren Berechnung werden die Beziehungen (3.31) und (3.35) benötigt, mit denen man die Funktionalableitungen

$$\frac{\delta e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 / \hbar^2}}{\delta G_{11}^{-1}} = \left(-G_{11} - \frac{1}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{14} j_3^* j_4 \right) e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 / \hbar^2} , \quad (\text{C.6})$$

$$\frac{\delta^2 e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 / \hbar^2}}{\delta G_{11}^{-1} \delta G_{22}^{-1}} = \left(G_{12} G_{21} + \frac{2}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{12} G_{24} j_3^* j_4 \right) e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 / \hbar^2} \quad (\text{C.7})$$

erhält, die anschließend in (C.5) eingesetzt werden:

$$Z = \left[1 - \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \left(G_{11} + \frac{1}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{14} j_3^* j_4 \right) + \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \left(G_{11} + \frac{1}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{14} j_3^* j_4 \right) \left(G_{22} + \frac{1}{\hbar^2} \int_{34} G_{32} G_{24} j_3^* j_4 \right) - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \left(G_{12} G_{21} + \frac{2}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{12} G_{24} j_3^* j_4 \right) + \dots \right] e^{-\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 / \hbar^2} . \quad (\text{C.8})$$

Aus dieser Gleichung berechnet man über die Beziehung (2.62) das großkanonische Potential in Abhängigkeit von den Strömen. Der dabei auftretende Logarithmus wird bis zur zweiten Ordnung bezüglich des Zufallspotentials entwickelt:

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \dots \quad (\text{C.9})$$

Insgesamt erhält man für das großkanonische Potential in Abhängigkeit von den Strömen

$$\begin{aligned} \Omega[j^*, j] = & \frac{1}{\beta} \left[\text{Trln} G_0^{-1} - \frac{1}{\hbar^2} \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 + \frac{1}{\hbar} \int_1 U_1 \left(G_{11} + \frac{1}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{14} j_3^* j_4 \right) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} U_1 U_2 \left(G_{12} G_{21} + \frac{2}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{12} G_{24} j_3^* j_4 \right) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Gleichung (C.10) wird nun unordnungsgemittelt, bevor das effektive Potential berechnet wird:

$$\begin{aligned} \overline{\Omega[j^*, j]} = & \frac{1}{\beta} \left[\text{Trln} G_0^{-1} - \frac{1}{\hbar^2} \int_{12} j_1^* G_{12} j_2 \right. \\ & \left. - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} R_{12} \left(G_{12} G_{21} + \frac{2}{\hbar^2} \int_{34} G_{31} G_{12} G_{24} j_3^* j_4 \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

mit der Abkürzung $R_{12} = R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ für (3.4). In dieser Gleichung wird jetzt eine Legendre-Transformation von den Strömen j^*, j zu den Feldmittelwerten Ψ^*, Ψ durchgeführt. Zunächst werden dazu die Mittelwerte nach (2.64) berechnet:

$$\begin{aligned} \Psi_1^* &= \frac{1}{\hbar} \int_2 j_2^* G_{21} + \frac{1}{\hbar^3} \int_{234} R_{34} j_2^* G_{23} G_{34} G_{41} + \dots, \\ \Psi_1 &= \frac{1}{\hbar} \int_2 G_{12} j_2 + \frac{1}{\hbar^3} \int_{234} R_{34} G_{13} G_{34} G_{42} j_2 + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Diese Beziehungen lassen sich unter Benutzung von (3.32) iterativ bis zur ersten Ordnung in R invertieren:

$$\begin{aligned} j_1^* &= \hbar \int_2 \Psi_2^* G_{21}^{-1} - \frac{1}{\hbar} \int_2 R_{12} \Psi_2^* G_{21} + \dots, \\ j_1 &= \hbar \int_2 G_{12}^{-1} \Psi_2 - \frac{1}{\hbar} \int_2 R_{12} G_{12} \Psi_2 + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Anschließend werden für die Legendre-Transformation noch folgende Terme benötigt:

$$\int_1 \Psi_1 j_1^* = \int_1 \Psi_1^* j_1 = \hbar \int_{12} \Psi_1^* G_{12}^{-1} \Psi_2 - \frac{1}{\hbar} \int_{12} R_{12} \Psi_1^* G_{12} \Psi_2 + \dots \quad (\text{C.14})$$

Setzt man (C.11), (C.13) und (C.14) in (2.65) ein, so erhält man für das unordnungsgemittelte effektive Potential schließlich

$$\begin{aligned} \overline{\Gamma[\Psi^*, \Psi]} = & \frac{1}{\beta} \left(\text{Tr} \ln G_0^{-1} + \int_{12} \Psi_1^* G_{12}^{-1} \Psi_2 - \frac{1}{\hbar^2} \int_{12} R_{12} \Psi_1^* G_{12} \Psi_2 \right. \\ & \left. - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} R_{12} G_{12} G_{21} + \dots \right). \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Nach (2.67) geht das effektive Potential für extremalisierte Feldmittelwerte in das großkanonische Potential über. Setzt man darüber hinaus noch die Temperatur gleich der kritischen Temperatur, bei der die extremalisierten Feldmittelwerte (2.92) gerade verschwinden, so erhält man für das großkanonische Potential

$$\overline{\Omega} \Big|_{T=T_c} = \frac{1}{\beta_c} \left(\text{Tr} \ln G_0^{-1} - \frac{1}{2\hbar^2} \int_{12} R_{12} G_{12} G_{21} + \dots \right) \Big|_{T=T_c}. \quad (\text{C.16})$$

Die Selbstenergie lässt sich mithilfe einer zweifachen Funktionalableitung des unordnungsgemittelten effektiven Potentials (C.15) nach den Feldmittelwerten Ψ^*, Ψ berechnen:

$$\beta \frac{\delta^2 \overline{\Gamma[\Psi^*, \Psi]}}{\delta \Psi_1^* \delta \Psi_2} = G_{12}^{-1} - \frac{1}{\hbar^2} R_{12} G_{12} + \dots \quad (\text{C.17})$$

Definiert man die effektive Vielteilchen-Green-Funktion als die ungestörte Vielteilchen-Green-Funktion minus die Selbstenergie, so erhält man für diese aus (C.17)

$$\overline{\Sigma} = \frac{1}{\hbar^2} R_{12} G_{12} + \dots \quad (\text{C.18})$$

Da M. Timmer zur Berechnung der Verschiebung der kritischen Temperatur die Teilchenzahlgleichung am kritischen Punkt betrachtet und in diese das kritische chemische Potential einsetzt, das aus der Selbstenergie bestimmt wurde, reicht es aus zu zeigen, dass diese beiden Größen mit den hier berechneten übereinstimmen. Ein Vergleich von (C.16) mit [25, (3.17)] zeigt, dass die großkanonischen Potentiale und folglich auch die Teilchenzahlgleichungen für $T=T_c$ übereinstimmen. Auch die Selbstenergie (C.18) entspricht dem Ergebnis von M. Timmer [25, (3.102)]. Hiermit ist gezeigt, dass sich dessen Ergebnisse auch mithilfe des unordnungsgemittelten effektiven Potentials berechnen lassen.

Literaturverzeichnis

- [1] S. N. Bose, *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Zeitschrift für Physik **26**, 178 (1924)
- [2] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **22**, 261 (1924) und **1**, 3 (1925)
- [3] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995)
- [4] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995)
- [5] S. Grossmann and M. Holthaus, *On Bose-Einstein Condensation in Harmonic Traps*, Phys. Lett. A **208**, 188 (1995)
- [6] W. Ketterle and N.J. van Druten, *Bose-Einstein Condensation of a Finite Number of Particles Trapped in One or Three Dimensions*, Phys. Rev. A **54**, 1 (1996)
- [7] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Condensate Fraction and Critical Temperature of a Trapped Interacting Bose Gas*, Phys. Rev. A **54**, R4633 (1996)
- [8] J. R. Ensher, D. S. Jin, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Bose-Einstein Condensation in a Dilute Gas: Measurement of Energy and Ground-State Occupation*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4984 (1996)
- [9] F. Gerbier, J. H. Thywissen, S. Richard, M. Hugbart, P. Bouyer, and A. Aspect, *Critical Temperature of a Trapped, Weakly Interacting Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **92**, 030405 (2004)
- [10] http://spie.org/Images/Graphics/Newsroom/Imported/390/390_fig2.jpg

- [11] D. Clément, A. F. Varón, M. Hugbart, J. A. Retter, P. Bouyer, L. Sanchez-Palencia, D. M. Gangardt, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect, *Suppression of Transport of an Interacting Elongated Bose-Einstein Condensate in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **95**, 170409 (2005)
- [12] J. E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D. S. Wiersma, C. Fort, and M. Inguscio, *Bose-Einstein Condensate in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **95**, 070401 (2005)
- [13] J. C. Dainty, *Laser Speckle and Related Phenomena*, 2. Edition (Springer-Verlag Berlin, 1984)
- [14] U. Gavish and Y. Castin, *Matter-Wave Localization in Disordered Cold Atom Lattices*, Phys. Rev. Lett. **95**, 020401 (2005)
- [15] S. Ospelkaus, C. Ospelkaus, O. Wille, M. Succo, P. Ernst, K. Sengstock, and K. Bongs, *Localization of Bosonic Atoms by Fermionic Impurities in a Three-Dimensional Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **96**, 180403 (2006)
- [16] L. Feenstra, L.M. Andersson, J. Schmiedmayer, *Microtraps and Atom Chips: Toolboxes for Cold Atom Physics*, cond-mat/0302059
- [17] J. Fortagh, H. Ott, S. Kraft, and C. Zimmermann, *Surface Effects in Magnetic Microtraps*, Phys. Rev. A **66**, R041604 (2002)
- [18] P. Kruger, L.M. Andersson, S. Wildermuth, S. Hofferberth, E. Haller, S. Aigner, S. Groth, I. Bar-Joseph, and J. Schmiedmayer, *Disorder Potentials near Lithographically Fabricated Atom Chips*, cond-mat/0504686
- [19] M. Timmer, A. Pelster, and R. Graham, *Disorder-Induced Shift of Critical Temperature for Dilute Trapped Bose Gases*, Europhys. Lett. **76**, 760 (2006)
- [20] Konstantin Glaum, *Thermodynamische Eigenschaften von Bose-Gasen*, Promotionsarbeit, Freie Universität Berlin (2008)
- [21] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, 2. Auflage (Springer-Verlag, Berlin, 2004)
- [22] J. W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Perseus Publishing, Cambridge, 1998)
- [23] A.L. Fetter and J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971)
- [24] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, 4. Edition (World Scientific, Singapore, 2006)

- [25] M. Timmer, *Ultrakalte Atomgase in Zufallspotentialen*, Diplomarbeit, Universität Duisburg-Essen (2006)
- [26] V.I. Yukalov and R. Graham, *Bose-Einstein-Condensed Systems in Random Potentials*, Phys. Rev. A **75**, 023619 (2007)
- [27] J. E. Robinson, *Note on the Bose-Einstein Integral Functions*, Phys. Rev. **83**, 678 (1951)
- [28] A. Pelster, *Vorlesung zur Bose-Einstein-Kondensation*, Universität Duisburg-Essen (2004),
http://www.theo-phys.uni-essen.de/tp/ags/pelster_dir/SS04/skript.pdf
- [29] H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of ϕ^4 -Theories* (World Scientific, Singapore, 2001)
- [30] V. I. Yukalov and E. P. Yukalova, *Modified Semiclassical Approximation for Trapped Bose Gases*, Phys. Rev. A **72**, 063611 (2005)
- [31] R. Folman, P. Krüger, J. Schmiedmayer, J. Denschlag, and C. Henkel, *Microscopic Atom Optics: From Wires to an Atom Chip*, (Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics, Vol. 48, Academic Press, 2002)
- [32] C. Morette, *On the definition and approximation of Feynman's path integral*, Phys. Rev. **81**, 848 (1951)
- [33] B. S. DeWitt, *Theory of Dynamical Groups and Fields* (Gordon and Breach, New York, 1965)
- [34] R. Jackiw, Phys. Rev. D **9**, 1686 (1974)
- [35] A. Pelster and K. Glaum, *Many-Body Vacuum Diagrams and Their Recursive Graphical Construction*, Physica Status Solidi B **237**, 72 (2003)
- [36] W. Magnus, F. Oberhettinger, and R. P. Soni, *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, 3. Edition (Springer-Verlag, New York, 1966)
- [37] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 5. Edition (Academic Press, United States of America, 1994)
- [38] G.M. Falco, A. Pelster, and R. Graham, *Collective Oscillations in Trapped Bose-Einstein Condensed Gases in the Presence of Weak Disorder*, Phys. Rev. A **76**, 013624 (2007)

- [39] A. Pelster, *Zur Theorie und Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik*, Promotionsarbeit, Universität Stuttgart (1996)
- [40] C. Grosche and F. Steiner, *Handbook of Feynman Path Integrals*, (Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 145, Springer-Verlag, Berlin, 1998)