Diplomarbeit

Bose-Einstein-Kondensation im Funktionalintegralzugang

vorgelegt von Christian Henning

Januar 2006



Institut für Theoretische Physik und Astrophysik der Universität Kiel

Referent:

Prof. Dr. Gerhard Grensing

Korreferent/in:

Prof. Dr. Michael Bonitz

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	 Funktionale Methoden und die Bose-Einstein-Kondensation 2.1 Die großkanonische Zustandssumme	5 5 8 10 14 20
3	Die Hugenholtz-Pines-Relation3.1Die Schwinger-Dyson-Gleichungen $3.1.1$ Schwinger-Dyson-Gleichungen in Bezug auf $\Sigma^{1,0}$ 3.2Differentialidentitäten der Selbstenergieanteile $3.2.1$ Störungstheoretische Betrachtungen $3.2.2$ Exakte Herleitung 3.3 Beweis der HP-Relation	25 26 29 30 30 31 35
4	Die Dyson-Beliaev-Gleichungen4.1Das erzeugende Funktional $\Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]$ 4.2Herleitung der DB-Gleichungen4.3 und ihr Zusammenhang mit der HP-Relation	39 39 41 44
5	 Das verdünnte, schwach wechselwirkende Bosegas 5.1 Die Selbstenergieanteile	45 46 47 50 52 53 55 61
6	Zusammenfassung	67
Α	FrequenzsummenA.1Die Berechnung einfacher Frequenzsummen	69 69

	A.2 A.3	Die Berechnung doppelter Frequenzsummen erster Art	70 71	
В	Die	Integralgleichung der Streuamplitude	73	
С	Тор	ologische Betrachtungen zur $\psi_c, \overline{\psi}_c$ -Abhängigkeit von $\Sigma^{0,0}$	75	
Lit	iteraturverzeichnis			

1 Einleitung

Die vor über 100 Jahren vorhergesagte Kondensation bosonischer Systeme, die Bose-Einstein-Kondensation, gehört sicherlich zu den faszinierensten Phänomenen der modernen Physik. Besonders seit der 1995 gelungenen Realisierung dieser Bose-Einstein-Kondensation [AEM⁺95, DMA⁺95, BSTH95] für Systeme von eingeschlossenen, ultrakalten, atomaren Gasen hat die Untersuchung dieser Thematik zu einem schnell wachsenden Forschungsgebiet geführt. Doch nicht nur Laser-gekühlte Atome oder der historische Prototyp eines Bose-Einstein-Kondensats, flüssiges ⁴He, sind Gegenstand dieser Forschung. Ebenso führen Untersuchungen von Hochtemperatur-Supraleitern, Exitonen, subatomarer Materie oder auch von Neutronensternen zu aktuellen Fragestellungen, die eng im Zusammenhang mit der Bose-Einstein-Kondensation stehen [GSS95]. Aber gerade wegen der Komplexität dieses Themas ist ein grundlegendes Verständnis von einfachen Systemen unabdingbar. Insbesondere die Analyse der Bose-Einstein-Kondensation von homogenen bosonischen Systemen ist dazu prädestiniert und deshalb auch Gegenstand aktuellen Interesses.

Die Untersuchung solcher Systeme von wechselwirkenden Bosonen geht zurück auf Bogoliubov [Bog47], der als erster durch Anwendung einer kanonischen Transformation das zugehörige Anregungsspektrum berechnen konnte. Kurze Zeit später gelang es Beliaev [Bel58a], Methoden aus der Quantenfeldtheorie bei der Anwendung auf diese Vielteilchensysteme zu benutzen, um so bestimmte Rechnungen entscheidend zu vereinfachen bzw. überhaupt erst zu ermöglichen. Vor allem die Verwendung der Greenschen Funktionen führte in der Folge zu wesentlichen Erkenntnissen. So wurden sie zum Beispiel von Hugenholtz und Pines [HP59] benutzt, um Quantenkorrekturen physikalischer Größen zu berechnen. Im Verlaufe ihrer Arbeit konnten sie zusätzlich die nach ihnen benannte Hugenholtz-Pines-Relation aufzeigen, die das chemische Potential mit den Selbstenergien auf nicht-störungstheoretischem Wege in Verbindung bringt.

All diese Arbeiten betrachteten das homogene bosonische System allerdings bei der Temperatur T = 0. Nachdem erste thermische Korrekturen von Lee und Yang [LY58, LY59] mit Hilfe der Pseudopotentialmethode berechnet wurden, gelang es als erstem Popov in seinen Arbeiten [Pop83, Pop87, PY88] das System im Falle endlicher Temperatur, das heißt für $T \neq 0$, zu untersuchen. Dazu nutzte er aber nicht den von Beliaev verwendeten Operatorformalismus als Zugang zur Quantenfeldtheorie, sondern bediente sich des Funktionalintegralzuganges in seiner kohärenten Darstellung [Fad76]. Dies ist allerdings vom Feynmanschen Funktionalintegral zu unterscheiden, welches nicht von kohärenten Zuständen ausgeht und deshalb für die Bose-Einstein-Kondensation auch nicht geeignet ist.

Die bei Popovs Zugang verwendete Funktionalintegration ist eine der leistungsstärksten Methoden in der heutigen theoretischen Physik. Sie bietet einen rationellen Formalismus, der einfachere und schnellere Rechnungen erlaubt, als es im Operatorzugang (wenn überhaupt) möglich ist, und hilft darüber hinaus auch eine qualitative Einsicht des zugrunde liegenden Phänomens aufzubauen. Insbesondere auch für den Fall der Bose-Einstein-Kondensation sorgt das Funktionalintegral in kohärenter Darstellung für einen optimalen Zugang. Leider hat sich dieser, obwohl in der Quantenfeldtheorie ein Standardwerkzeug, innerhalb der Vielteilchentheorie bisher nur zögerlich durchgesetzt [NO94, And04].

Popov war damit, wie bereits erwähnt, in der Lage, erstmals auch eine Untersuchung des homogenen bosonischen Systems für beliebige Temperaturen inklusive des kritischen Punktes T_c durchzuführen. Inbesondere bewies er die auf endliche Temperaturen verallgemeinerte Hugenholtz-Pines-Relation, um damit Berechnungen bestimmter Größen, u.a. die "thermal depletion" durchzuführen. Allerdings ist sein Beweis in zweierlei Hinsicht nicht korrekt. Zum einen ist die von ihm angeführte Argumentation nicht folgerichtig, führt ihn aber trotzdem zum richtigen Ergebnis. Zum anderen gelingt Popov der Beweis nur innerhalb der Störungstheorie, obwohl die Hugenholtz-Pines-Relation in ihrer Originalfassung für T = 0 nicht störungstheoretisch, sondern exakt war.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, den von Popov erbrachten Beweis der Hugenholtz-Pines-Relation zu korrigieren und auf nicht-störungstheoretische Weise zu verallgemeinern. Insbesondere erhalten wir als Resultat, daß die Hugenholtz-Pines-Relation auch für endliche Temperaturen exakt ist. Darüber hinaus wird es uns mit Hilfe der Schwinger-Dyson-Gleichungen, die wir herleiten und für den angesprochenen Beweis benutzen werden, möglich sein, eine äquivalente Formulierung jener Relation anzugeben. Diese Formulierung wird uns dann eine Berechnung der "thermal depletion" in erster Loopnäherung ermöglichen.

Grundlage dieser Diplomarbeit ist die Mitschrift [Gre04] der Vorlesung "Einführung in die Quantenfeldtheorie" gehalten von G. Grensing im WS 2003/04 an der Universität Kiel.

Der Text dieser Arbeit gliedert sich folgendermaßen:

• Nach dieser Einleitung wenden wir uns im zweiten Kapitel den funktionalen Methoden zu. Insbesondere stellen wir in 2.1 die großkanonische Zustandssumme sowie in 2.3 die Greenschen Funktionen in ihrer funktionalintegralen Form dar und erläutern in Abschnitt 2.4 wie man diese Größen mit Hilfe von Feynmangraphen störungstheoretisch berechnet. Desweiteren machen wir uns in 2.2 durch Symmetriebetrachtungen der klassischen Feldgleichungen das Auftreten einer Bose-Einstein-Kondensation plausibel.

Abschnitt 2.4.1 ist der Einführung weiterer Größen, insbesondere den Selbstenergien, gewidmet, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit eine wichtige Rolle spielen werden.

• Anschließend behandelt das dritte Kapitel den Beweis der Hugenholtz-Pines-Relation. Um diesen durchzuführen, werden wir uns in 3.1 mit den Schwinger-Dyson-Gleichungen des homogenen bosonischen Systems befassen. Mit Hilfe dieser Gleichungen sind wir dann in Abschnitt 3.2 in der Lage, wichtige Differentialidentitäten exakt abzuleiten, die uns den Beweis der Hugenholtz-Pines-Relation, den wir in 3.3 durchführen werden, ermöglichen. Zuvor werden wir allerdings in Abschnitt 3.2 die Differentialidentitäten auch störungstheoretisch berechnen, um so die Unterschiede zu Popovs Zugang besser deutlich machen zu können.

Die Erarbeitung einer äquivalenten Formulierung der Hugenholtz-Pines-Relation auf Grundlage der Schwinger-Dyson-Gleichungen in Abschnitt 3.1.1 runden das Kapitel ab.

- Kapitel 4 ist der Herleitung, der im folgenden wichtigen Dyson-Beliaev-Gleichungen gewidmet. Diese Herleitung, die wir in Abschnitt 4.2 geben werden, führen wir allerdings nicht wie sonst oft üblich mit Hilfe von Feynmangraphen durch, sondern mit Hilfe von Vertexfunktionen, mit denen wir uns in 4.1 befassen. In Abschnitt 4.3 betrachten wir kurz den Zusammenhang, der zwischen den Dyson-Beliaev-Gleichungen und der Hugenholtz-Pines-Relation existiert.
- Eine der grundlegenden Anwendungen, bei der die Erkenntnisse über bosonische Systeme einfließen, ist das verdünnte Bosegas. Deshalb werden wir in Kapitel 5 die zuvor gewonnenen Kenntnisse innerhalb dieses speziellen Systems benutzen. Dazu geben wir am Anfang eine passende Näherung der Selbstenergien an, aus der wir in Abschnitt 5.2 mit Hilfe der Dyson-Beliaev-Gleichungen einen Ausdruck für die Greensche Funktion berechnen werden. Dies ermöglich uns dann die in 5.3 folgende Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Nichtkondensatsdichte.

Die in dieser Arbeit zentrale Hugenholtz-Pines-Relation bzw. ihre äquivalente Darstellung werden wir schließlich in Abschnitt 5.4 benutzen, um die für die Untersuchung des Bose-Einstein-Kondensats wichtige "thermal depletion" in erster Loopordnung zu berechnen.

• Eine Zusammenfassung schließt die Arbeit ab.

• Einige wichtige Rechnungen, deren Resultate wir benötigen, sind in den Anhängen aufgeführt.

2 Funktionale Methoden und die Bose-Einstein-Kondensation

Die vorliegende Arbeit gilt der Untersuchung eines Systems wechselwirkender Bosonen, die sich bei endlicher Temperatur innerhalb eines endlichen Volumens $V = L^3$ befinden. Insbesondere wird uns ein solches System im Bereich der Bose-Einstein-Kondensation interessieren. Die dabei auftretenden theoretischen Fragestellungen werden wir mit Hilfe der Quantenfeldtheorie im Funktionalintegralzugang behandeln. Das vorliegende Kapitel dient deshalb der Einführung dazu notwendiger Methoden. Vor allem werden wir die Zustandsumme und andere wichtige Größen, wie zum Beispiel die Greenschen Funktionen, als Funktionalintegral darstellen und aufzeigen, wie man sie mit Hilfe der Störungstheorie berechnet. Zusätzlich wollen wir durch Untersuchung der klassischen Feldgleichungen plausibel machen, warum überhaupt eine Kondensation auftritt.

2.1 Die großkanonische Zustandssumme

Bevor wir die Analyse unseres bosonischen Vielteilchensystems beginnen können, ist es wichtig darzulegen, welche quantenstatistische Beschreibung des Systems wir überhaupt wählen. Das oft benutzte Ensemble mit fester Teilchenzahl erweist sich nämlich in unserem Fall eines Zwei-Phasen-Gemisches aus Kondensat und Rückstand als zu einschränkend in der Beschreibungsmöglichkeit. Vielmehr werden wir deshalb den Zugang über das großkanonische Ensemble mit variabler Teilchenzahl verwenden. Die diesen Zugang ermöglichende Größe der Quantenstatistik ist die großkanonische Zustandssumme

$$Z(T,V,\mu) = \operatorname{Spe}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}.$$
(2.1.1)

In der angegebenen Form ist sie formal als Spur des Entwicklungsoperators in imaginärer Zeit interpretierbar. Damit ist es möglich, die angegebene Zustandssumme als Funktionalintegral in kohärenter Darstellung zu schreiben [Gre04], das heißt unter Benutzung von bosonischen, kohärenten Zuständen. Die Wahl dieser kohärenten Zustände als Entwicklungsbasis für das Funktionalintegral ist bei der Benutzung des großkanonischen Ensembles sehr natürlich, da sich diese Zustände u.a. dadurch auszeichnen, daß sie keine feste Teilchenzahl besitzen. Die Zustandssumme erhält damit die Gestalt¹

$$Z(T,V,\mu) = \int_{\text{PBC}} d[\overline{\psi},\psi] \ e^{-\int_0^\beta d\tau \left(\int_V d\mathbf{x} \left(\overline{\psi}(\tau,\mathbf{x}) \left\{\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu\right\} \psi(\tau,\mathbf{x})\right) + H[\overline{\psi},\psi]\right)}, \tag{2.1.2}$$

wobei die Funktionen $\overline{\psi}, \psi$, über die integriert wird, gemäß der Bezeichnung "PBC"² den periodischen Randbedingungen

$$\psi(\tau + \beta, \mathbf{x}) = \psi(\tau, \mathbf{x}) \qquad \overline{\psi}(\tau + \beta, \mathbf{x}) = \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \psi(\tau, \mathbf{x} + L\mathbf{e}_i) = \psi(\tau, \mathbf{x}) \qquad \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x} + L\mathbf{e}_i) = \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x})$$
(2.1.3)

unterliegen. Mit Hilfe dieser Bedingungen wird das endliche Volumen, in dem sich die Teilchen befinden, berücksichtigt. Der auftretende Hamiltonoperator \hat{H} bzw. die entsprechende Hamiltonfunktion *H* ist im Falle des bosonischen Systems mit Zweiteilchenwechselwirkung durch

$$H[\overline{\psi}, \psi] = \int_{V} d\mathbf{x} \left(\frac{1}{2m} \nabla \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \cdot \nabla \psi(\tau, \mathbf{x}) \right) + \frac{1}{2} \int_{V \times V} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \psi(\tau, \mathbf{x}) U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \overline{\psi}(\tau, \mathbf{y}) \psi(\tau, \mathbf{y}) \quad (2.1.4)$$

gegeben.

Wie es bei Pfadintegralen typisch ist, so beschreibt auch der im Funktionalintegral (2.1.2) auftretende, Exponent (ohne Minuszeichen) die klassische Wirkung des Systems, die mit (2.1.4) die Form

$$S[\overline{\psi}, \psi] := \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\,\tau \Big(\int_{V} \mathrm{d}\,\mathbf{x}\overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \{ \frac{\partial}{\partial\tau} - \frac{\nabla^{2}}{2m} - \mu \} \psi(\tau, \mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int_{V \times V} \mathrm{d}\,\mathbf{x} \,\mathrm{d}\,\mathbf{y}\overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \psi(\tau, \mathbf{x}) U(\mathbf{x} - \mathbf{y})\overline{\psi}(\tau, \mathbf{y}) \psi(\tau, \mathbf{y}) \Big) \quad (2.1.5)$$

annimmt. Durch die periodischen Randbedingungen (2.1.3) ist es möglich, diese Wirkung, bei der die auftretenden Funktionen durch Ort x und (imaginäre) Zeit τ beschrieben werden, auch mit Hilfe der entsprechenden Fouriertransformierten, die durch Frequenz ω

 $^{^{1}\}hbar = 1$

²Periodic boundary conditions; diese explizite Bezeichnung werden wir allerdings im weiteren Verlauf den Funktionalintegralen nicht mehr hinzufügen.

und Impuls k beschrieben werden, auszudrücken. Letztere berechnen sich mit

$$\psi(\boldsymbol{\omega}, \mathbf{k}) = \frac{1}{(\beta V)^{1/2}} \int_{0}^{\beta} \int_{V} d\tau d\mathbf{x} \ e^{i(\boldsymbol{\omega}\tau + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \psi(\tau, \mathbf{x})$$

$$\overline{\psi}(\boldsymbol{\omega}, \mathbf{k}) = \frac{1}{(\beta V)^{1/2}} \int_{0}^{\beta} \int_{V} d\tau d\mathbf{x} \ e^{-i(\boldsymbol{\omega}\tau + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}),$$
(2.1.6)

wenn die Fourierzerlegung der periodischen Felder durch

$$\psi(\tau, \mathbf{x}) = \frac{1}{(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{k_i = n\frac{2\pi}{L} \\ \omega = n\frac{2\pi}{\beta}}} e^{-i(\omega\tau + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \psi(\omega, \mathbf{k})$$

$$\overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) = \frac{1}{(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{k_i = n\frac{2\pi}{L} \\ \omega = n\frac{2\pi}{\beta}}} e^{i(\omega\tau + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \overline{\psi}(\omega, \mathbf{k})$$
(2.1.7)

gegeben ist³. Nutzen wir diese Zerlegung für die einzelnen Summanden in (2.1.5), so erhält man

$$\int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau \int_{V} \mathrm{d}\mathbf{x} \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \{ \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^{2}}{2m} - \mu \} \psi(\tau, \mathbf{x})$$

$$= \sum_{p, p'} \overline{\psi}(p') \psi(p) \frac{1}{\beta V} \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau \int_{V} \mathrm{d}\mathbf{x} e^{ip'x} \{ \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^{2}}{2m} - \mu \} e^{-ipx}$$

$$= \sum_{p, p'} \overline{\psi}(p') \{ -i\mathbf{p}^{0} + \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} - \mu \} \psi(p) \frac{1}{\beta V} \int_{0}^{\beta} \mathrm{d}\tau \int_{V} \mathrm{d}\mathbf{x} e^{ix(p'-p)}$$

$$= \sum_{p} \overline{\psi}(p) \{ -i\mathbf{p}^{0} + \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} - \mu \} \psi(p),$$

$$(2.1.8)$$

³Die ω -Summation kann man auch durch $\sum_n f(\omega_n)$ mit der Matsubarafrequenz $\omega_n = n \frac{2\pi}{\beta}$ ausdrücken. Wir werden dafür im folgenden kurz $\sum_{\omega} f(\omega)$ schreiben. Entsprechendes gilt für die k-Summation. Darüber hinaus führen wir zur Vereinfachung der Darstellung die 4-Größen $x = (\tau, \mathbf{x})$ und $p = (\omega, \mathbf{k}) =: (p^0, \mathbf{p})$ ein, wobei wir letztere kurz als Impuls bezeichnen, und machen vor allem bei Benutzung des Potentials davon Gebrauch, das Argument als Index zu verwenden.

sowie

$$\frac{1}{2} \int_{0}^{\beta} d\tau \int_{V \times V} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \psi(\tau, \mathbf{x}) U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \overline{\psi}(\tau, \mathbf{y}) \psi(\tau, \mathbf{y})
= \frac{1}{2} \sum_{\substack{p_1, p_2, \\ p_3, p_4, \mathbf{k}}} \overline{\psi}(p_1) \psi(p_3) U_{\mathbf{k}} \overline{\psi}(p_2) \psi(p_4)
\times \frac{1}{V^3 \beta^2} \int_{0}^{\beta} \int_{V \times V} d\tau d\mathbf{x} d\mathbf{y} e^{ip_1 x} e^{-ip_3 x} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} e^{ip_2 y} e^{-ip_4 y}$$

$$= \frac{1}{4\beta V} \sum_{\substack{p_1, p_2 \\ p_3, p_4, \mathbf{k}}} \overline{\psi}(p_1) \psi(p_3) \{U_{\mathbf{k}} + U_{\mathbf{k}}\} \overline{\psi}(p_2) \psi(p_4) \delta_{p_1 + p_2, p_3 + p_4} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_4}$$

$$= \frac{1}{4\beta V} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ =-p_3 + p_4}} \overline{\psi}(p_1) \overline{\psi}(p_2) \{U_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3} + U_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4}\} \psi(p_3) \psi(p_4),$$
(2.1.9)

wobei wir $U(\mathbf{x}) = V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ und $U_{\mathbf{k}} = U_{-\mathbf{k}}$ benutzt haben. Damit läßt sich die Wirkung auch mit Hilfe der fouriertransformierten Felder durch

$$S[\overline{\psi}, \psi] := \sum_{p} \overline{\psi}(p) \{ -i\mathbf{p}^{0} + \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} - \mu \} \psi(p)$$

+
$$\frac{1}{4\beta V} \sum_{\substack{p_{1}+p_{2} \\ =p_{3}+p_{4}}} \overline{\psi}(p_{1}) \overline{\psi}(p_{2}) \{ U_{\mathbf{p}_{1}-\mathbf{p}_{3}} + U_{\mathbf{p}_{1}-\mathbf{p}_{4}} \} \psi(p_{3}) \psi(p_{4}) \quad (2.1.10)$$

berechnen. Dies wird uns vor allem bei der Störungstheorie von großem Nutzen sein.

2.2 Die klassischen Feldgleichungen und das Auftreten einer Kondensation

Betrachten wir die klassische Wirkung (2.1.5) des bosonischen Systems, so können wir durch Variation die klassischen Feldgleichungen

$$0 = \frac{\delta S}{\delta \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x})} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^2}{2m} - \mu + \int d\mathbf{y} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \overline{\psi}(\tau, \mathbf{y}) \psi(\tau, \mathbf{y}) \right\} \psi(\tau, \mathbf{x})$$
(2.2.1a)

$$0 = \frac{\delta S}{\delta \psi(\tau, \mathbf{x})} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^2}{2m} - \mu + \int \mathrm{d}\mathbf{y} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \overline{\psi}(\tau, \mathbf{y}) \psi(\tau, \mathbf{y}) \right\} \overline{\psi}(\tau, \mathbf{x}) \quad (2.2.1b)$$

errechnen⁴. Die durchgeführte Variation entspricht dabei der niedrigsten Ordnung in der Näherungsmethode der stationären Phase bezüglich des Funktionalintegrals (2.1.2) bzw. der Sattelpunktsapproximation. Das Ergebnis, die Gleichungen (2.2.1), können als allgemeine Form der Groß-Pitaevskii-Gleichungen in imaginärer Zeit und ohne externes Potential aufgefaßt werden. Sie besitzen eine einfache, von Null verschiedene Lösung, nämlich $\psi = \psi_c = konst$. und $\overline{\psi} = \overline{\psi}_c$. Dabei bestimmt sich die Konstante aus der Wechselwirkung und dem chemischen Potential gemäß

$$0 = -\mu \psi_c + \int \mathrm{d} \mathbf{y} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) |\psi_c|^2 \psi_c \qquad (2.2.2)$$

unter Benutzung des fouriertransformierten Potentials $U_0 = \int d\mathbf{y} U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) z \mathbf{u}$

$$\psi_c = \sqrt{\frac{\mu}{U_0}} e^{i\phi} \,. \tag{2.2.3}$$

Eine bestimmte Lösung der klassischen Feldgleichungen wird daraus durch Festlegung der Phase ϕ gewonnen. Das dem ganzen dabei zugrunde liegende Prinzip ist die spontane Symmetriebrechung: In der klassischen Physik werden die Symmetrien des Systems und damit die der physikalischen Größen durch die Symmetrien der Lagrangedichte bzw. der Wirkung beschrieben, was in der Invarianz unter den entsprechenden Symmetrietransformationen zum Ausdruck kommt. In der Quantentheorie wird diese Lagrangedichte aber durch die grundlegenden Operatoren der Theorie dargestellt. Diese Operatoren besitzen je nach Zustand des Systems bestimmte Erwartungswerte. Das ergibt folgende Möglichkeit. Die Lagrangedichte gehorcht einer Symmetrie, während der Systemzustand bzw. der entsprechende Zustandsvektor diese nicht besitzt. Das führt dazu, daß beobachtbare Größen, wie zum Beispiel Erwartungswerte, nicht länger der Symmetrie der Lagrangedichte unterliegen. Einen solchen Prozeß, bei dem durch die Wahl eines Systemzustandes die Symmetrie gebrochen wird, nennt man spontane Symmetriebrechung. Machen wir uns dies durch Betrachtung der zum bosonischen System ähnlichen, aber stationären und einfacheren Lagrangedichte

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2m} (\nabla \psi)^2 - \frac{1}{2} U_0 |\psi|^4 + \mu |\psi|^2$$
(2.2.4)

klar. Diese Lagrangedichte besitzt ebenso wie (2.1.5) eine globale U(1)-Invarianz, das heißt, sie ist invariant unter der Transformation $\psi(x) \mapsto \psi(x) e^{i\alpha}$. Die Minima des zugehörigen Potentials sind durch

$$\psi = \sqrt{\frac{\mu}{U_0}} e^{i\phi} \tag{2.2.5}$$

gegeben (siehe dazu Abbildung 2.1) und werden charakteristischerweise durch die angegebene Symmetrietransformation ineinander überführt. In der Quantentheorie werden

⁴Hierbei ist zu bemerken, daß die Felder $\psi, \overline{\psi}$ im allgemeinen nicht als zueinander komplex konjugierte Größen aufgefaßt werden können [NO94], sondern als unabängig voneinander betrachtet werden müssen.



Abbildung 2.1: Darstellung des Potentials $V(\psi)$ und der zugehörigen Minima

die klassischen Felder ψ durch Operatoren $\hat{\psi}$ ersetzt, und für den Grundzustand gilt $\langle \hat{\psi} \rangle = \sqrt{\frac{\mu}{U_0}} e^{i\phi}$, wobei die Phase ϕ zur eindeutigen Wahl des Grundzustandes festgelegt werden muß. Dadurch besitzt er allerdings nicht mehr die Symmetrie der Lagrangedichte, denn

$$\langle \hat{\psi} \rangle = \sqrt{\frac{\mu}{U_0}} e^{i\phi} \mapsto \langle \hat{\psi} e^{i\alpha} \rangle = \sqrt{\frac{\mu}{U_0}} e^{i(\phi+\alpha)} \neq \sqrt{\frac{\mu}{U_0}} e^{i\phi}.$$
(2.2.6)

Wir erkennen also, daß im Fall unseres bosonischen Systems tatsächlich eine spontane Symmetriebrechung existiert⁵. Es läßt sich zeigen [NO94], daß damit auch eine Kondensation des bosonischen Systems einhergeht, und daß die Dichte des Kondensats in klassischer Näherung bei T = 0 durch $n_c = |\psi_c|^2 = \frac{\mu}{U_0}$ gegeben ist. Dieser Wert wird aber, wie wir im Kapitel 5 noch sehen werden, sowohl quantentheoretisch als auch thermisch durch die sogenannte "quantum depletion" bzw. "thermal depletion" korrigiert werden.

2.3 Die Greenschen Funktionen

Innerhalb der Quantenfeldtheorie, und damit auch bei deren Anwendung auf Vielteilchensysteme, spielen die sogenannten Greenschen Funktionen bzw. Propagatoren eine entscheidende Rolle. Sie sind Verallgemeinerungen der aus der Lösungstheorie von Differentialgleichungen bekannten Greenschen Funktionen [Eco83] und kommen in vielen Varianten vor - Einteilchen, Vielteilchen, T = 0, $T \neq 0$, reelle Zeit, imaginäre Zeit, Die Bedeutung dieser Größen beruht zum einen darauf, daß mit ihrer Hilfe die wichtigsten physikalischen und experimentell meßbaren Eigenschaften eines Systems berechnet werden können. Zum anderen ist es möglich, die Propagatoren mit Hilfe der Störungstheorie auf systematische Weise zu berechnen.

⁵Diese findet allerdings erst unterhalb einer kritischen Temperatur statt.

Wir definieren die Greenschen Funktionen (bei endlicher Temperatur, in imaginärer Zeit) durch das Funktionalintegral

$$G^{\prime m,n}(p_1 \cdots p_m; p_1' \cdots p_n') = \frac{1}{Z} \int d[\overline{\psi}, \psi] \ \psi(p_1) \cdots \psi(p_m) \overline{\psi}(p_1') \cdots \overline{\psi}(p_n') e^{-S[\overline{\psi}, \psi]}.$$
(2.3.1)

Es ist möglich, diesen Ausdruck auch im Operatorformalismus durch entsprechende Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gemäß

$$G^{\prime m,n}(p_1 \cdots p_m; p_1^{\prime} \cdots p_n^{\prime}) = \langle T[\hat{\psi}(p_1) \cdots \hat{\psi}(p_m) \hat{\psi}^{\dagger}(p_n^{\prime}) \cdots \hat{\psi}^{\dagger}(p_1^{\prime})] \rangle$$
(2.3.2)

darzustellen [NO94], wobei *T* die Operatoren in imaginärer Zeit ordnet und $\langle \cdot \rangle$ den thermischen Erwartungswert bezeichnet. Die durch (2.3.1) definierten Greenschen Funktionen $G'^{m,n}$ haben allerdings den Nachteil, daß sie die Kondensation des bosonischen Systems nicht explizit berücksichtigen. Die einfachste Möglichkeit [Pop83], dies zu ändern, besteht beim Funktionalintegral in der Aufspaltung

$$\psi(x) = \chi(x) + \psi_c \tag{2.3.3a}$$

$$\overline{\psi}(x) = \overline{\chi}(x) + \overline{\psi}_c \tag{2.3.3b}$$

innerhalb des Wirkungsfunktionals, bei der ψ_c eine noch beliebige komplexe Konstante darstellt, deren Zusammenhang mit dem Kondensat später hergestellt wird. In der Impulsdarstellung nimmt (2.3.3) die Form

$$\psi(p) = \frac{1}{(\beta V)^{1/2}} \int_{0}^{\beta} \int_{V} d\tau d\mathbf{x} e^{ipx} \psi(x)$$

$$= \frac{1}{(\beta V)^{1/2}} \int_{0}^{\beta} \int_{V} d\tau d\mathbf{x} e^{ipx} (\chi(x) + \psi_c)$$

$$= \chi(p) + (\beta V)^{1/2} \psi_c \delta_{p,0}$$
(2.3.4)

und entsprechend

$$\overline{\psi}(p) = \overline{\chi}(p) + (\beta V)^{1/2} \overline{\psi}_c \delta_{p,0}$$
(2.3.5)

an. Nun ist es möglich, die Greenschen Funktionen

$$G^{m,n}(p_{1}\cdots p_{m};p_{1}'\cdots p_{n}') = \frac{1}{Z} \int d[\overline{\chi},\chi] \ \chi(p_{1})\cdots\chi(p_{m})\overline{\chi}(p_{1}')\cdots\overline{\chi}(p_{n}')e^{-S[\overline{\chi}+\overline{\psi}_{c},\chi+\psi_{c}]}$$
$$= \langle T[\hat{\chi}(p_{1})\cdots\hat{\chi}(p_{m})\hat{\chi}^{\dagger}(p_{n}')\cdots\hat{\chi}^{\dagger}(p_{1}')] \rangle$$
(2.3.6)

zu definieren, die, wie wir noch sehen werden, eine explizite Behandlung der Kondensation erlauben. Im folgenden werden wir das dabei auftretende Wirkungsfunktional $S[\overline{\chi} +$ $\overline{\psi}_c, \chi + \psi_c$] kurz mit $S[\overline{\chi}, \chi]$ bezeichnen, obwohl dadurch zu beachten ist, daß durch $S[\overline{\psi}, \psi]$ und $S[\overline{\chi}, \chi]$ zwei unterschiedliche funktionale Zusammenhänge gegeben sind. Aufgrund von (2.1.10) gilt für letzteren

$$\begin{split} S[\overline{\chi} + \overline{\psi}_{c}, \chi + \psi_{c}] \\ &= \sum_{p} (\overline{\chi}(p) + (\beta V)^{1/2} \overline{\psi}_{c} \delta_{p,0}) \{ -i p^{0} - \frac{p^{2}}{2m} - \mu \} (\chi(p) + (\beta V)^{1/2} \psi_{c} \delta_{p,0}) \\ &+ \frac{1}{4\beta V} \sum_{\substack{p_{1} + p_{2} \\ = p_{3} + p_{4}}} (\overline{\chi}(p_{1}) + (\beta V)^{1/2} \overline{\psi}_{c} \delta_{p,0}) (\overline{\chi}(p_{2}) + (\beta V)^{1/2} \overline{\psi}_{c} \delta_{p,0}) \{ U_{\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{3}} + U_{\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{4}} \} \\ &\times (\chi(p_{3}) + (\beta V)^{1/2} \psi_{c} \delta_{p,0}) (\chi(p_{4}) + (\beta V)^{1/2} \psi_{c} \delta_{p,0}) \\ &= (\beta V) \alpha + \sum_{p} \overline{\chi}(p) \{ -i p^{0} - \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} - \mu \} \chi(p) + (\beta V)^{1/2} (\overline{\gamma} \chi(0) + \overline{\chi}(0) \gamma) \\ &+ |\psi_{c}|^{2} \sum_{p} \overline{\chi}(p) \chi(p) \{ U_{0} + U_{\mathbf{p}} \} + \frac{1}{2} \sum_{p} (\psi_{c}^{2} \overline{\chi}(p) \overline{\chi}(-p) + \overline{\psi}_{c}^{2} \chi(p) \chi(-p)) U_{\mathbf{p}} \\ &+ \frac{1}{2(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{p_{1} + p_{2} \\ = p_{3}}} (\psi_{c} \overline{\chi}(p_{1}) \overline{\chi}(p_{2}) \chi(p_{3}) + \overline{\psi}_{c} \chi(p_{1}) \chi(p_{2}) \overline{\chi}(p_{3})) \{ U_{\mathbf{p}_{1}} + U_{\mathbf{p}_{2}} \} \\ &+ \frac{1}{4\beta V} \sum_{\substack{p_{1} + p_{2} \\ p_{3} + p_{4}}} \overline{\chi}(p_{1}) \overline{\chi}(p_{2}) \chi(p_{3}) \chi(p_{4}) \{ U_{\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{3}} + U_{\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{4}} \}, \end{aligned}$$

$$(2.3.7)$$

wobei α und γ durch

$$\alpha := |\psi_c|^2 \left(\frac{1}{2} |\psi_c|^2 U_0 - \mu \right)$$
(2.3.8a)

$$\gamma := \psi_c \left(|\psi_c|^2 U_0 - \mu \right) \tag{2.3.8b}$$

gegeben sind. Es ist noch zu bemerken, daß die Greenschen Funktionen $G^{m,n}$ eine besonders einfache und zugängliche Form besitzen, falls

$$\psi_c = \frac{\langle \hat{\psi}(p=0) \rangle}{(\beta V)^{1/2}}$$
(2.3.9)

gesetzt wird; dann gilt nämlich insbesondere

$$G^{1,0}(0) = \langle \hat{\chi}(p=0) \rangle = 0$$
 und (2.3.10a)

$$G^{0,1}(0) = 0. (2.3.10b)$$

Nachdem wir nun die Greenschen Funktionen definiert haben, stellt sich natürlich die Frage, warum sie denn in so engem Zusammenhang mit beobachtbaren Größen stehen. Dies wird plausibel, wenn man bedenkt, daß die Propagatoren als Erwartungswerte von Feldoperatoren darstellbar sind und daß innerhalb der zweiten Quantisierung meßbare

Größen ebenfalls durch diese Feldoperatoren beschrieben werden. So gilt zum Beispiel für die Teilchenzahl eines Systems

$$N = \lim_{\tau^+ \to \tau} \int \mathrm{d} \, \mathbf{x} < \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{x}, \tau^+) \, \hat{\psi}(\mathbf{x}, \tau) > = \lim_{\tau^+ \to \tau} \int \mathrm{d} \, \mathbf{x} G'^{1,1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau^+)$$

beziehungsweise unter Ausnutzung der translatorischen Invarianz, bei der die Greensche Funktion nur noch von der Differenz ihrer Argumente abhängt,

$$= \lim_{\tau^{+} \to \tau} \int d\mathbf{x} G'^{1,1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}, \tau - \tau^{+}) = \lim_{\tau^{+} \to \tau} \int d\mathbf{x} \frac{1}{\beta V} \sum_{p} e^{i(p^{0}(\tau - \tau^{+}) + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}))} G'^{1,1}(p; p)$$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0+} \frac{1}{\beta} \sum_{p} e^{ip^{0}\varepsilon} G'^{1,1}(p; p).$$
(2.3.11)

Wir sehen also, daß es tatsächlich möglich ist, physikalische Größen mit Hilfe der Greenschen Funktionen zu berechnen. Für die Dichte des Systems folgt mit (2.3.11)

$$\rho = \frac{1}{\beta V} \lim_{\varepsilon \to 0+} \sum_{p} e^{i p^0 \varepsilon} G'^{1,1}(p;p).$$
(2.3.12)

Ersetzen wir die Greensche Funktion $G'^{1,1}$ durch $G^{1,1}$ gemäß

$$G^{\prime 1,1}(p;p) = \frac{1}{Z} \int \mathbf{d}[\overline{\psi},\psi] \ \psi(p)\overline{\psi}(p) e^{-S[\overline{\psi},\psi]}$$

$$= \frac{1}{Z} \int \mathbf{d}[\overline{\chi},\chi] \ (\chi(p) + (\beta V)^{1/2}\psi_c \delta_{p,0}) (\overline{\chi}(p) + (\beta V)^{1/2}\overline{\psi}_c \delta_{p,0}) e^{-S[\overline{\chi},\chi]}$$

$$= G^{1,1}(p;p) + (\beta V)^{1/2} \delta_{p,0} (G^{0,1}(p)\psi_c + G^{1,0}\overline{\psi}_c) + \beta V |\psi_c|^2 \delta_{p,0},$$

(2.3.13)

so erhalten wir mit der Wahl (2.3.9) die Relation

$$\rho = \frac{1}{\beta V} \lim_{\varepsilon \to 0+} \sum_{p} e^{i p^{0} \varepsilon} G^{1,1}(p;p) + |\psi_{c}|^{2}, \qquad (2.3.14)$$

die uns die physikalische Bedeutung der Konstanten ψ_c angibt. Legen wir nämlich diese beliebige Konstante durch (2.3.9) fest, so erhält $|\psi_c|^2$ die natürliche Bedeutung der Kondensatsdichte n_c , das heißt $n_c = |\psi_c|^2$. Insbesondere wird damit deutlich, warum die Einführung von ψ_c eine explizite Behandlung des Kondensats erlaubt. Wir werden allerdings die Konstante bis zum Beweis der Hugenholtz-Pines-Relation nicht festlegen, sondern weiterhin als beliebig zulassen, da mit der durch (2.3.9) erreichbaren einfacheren Darstellung der Greenschen Funktionen auch einige Einschränkungen verbunden sind, die wir zunächst vermeiden möchten. Die Berechnung der Greenschen Funktionen kann auf einfache Weise mit Hilfe des erzeugenden Funktionals

$$Z[\overline{J},J] = Z^{-1} \int d[\overline{\chi},\chi] \ e^{-S[\overline{\chi},\chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$
(2.3.15)

durchgeführt werden. Es hängt von den skalaren Funktionen J und \overline{J} ab, welche aufgrund der Entsprechung in der zugehörigen Lagrangedichte auch als äußere Quellen bezeichnet werden. Die Anknüpfung von \overline{J} und J an die Felder erfolgt dabei über

$$\overline{J} \cdot \chi := \sum_{p} \overline{J}(p) \chi(p)$$
 bzw. (2.3.16a)

$$\overline{\chi} \cdot J := \sum_{p} \overline{\chi}(p) J(p).$$
(2.3.16b)

Unter Benutzung der funktionalen Ableitung von $Z[\overline{J}, J]$ nach den äußeren Quellen werden nun gerade die Greenschen Funktionen generiert, wenn man die Ableitung an der Stelle $\overline{J} = 0 = J$ betrachtet. Dann gilt nämlich

$$\frac{\delta^{m}}{\delta \overline{J}(p_{1})\dots\delta \overline{J}(p_{m})} \frac{\delta^{n}}{\delta J(p_{1}')\dots\delta J(p_{n}')} Z[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J}$$

$$= \frac{1}{Z} \int d[\overline{\chi},\chi] \chi(p_{1})\dots\chi(p_{m})\overline{\chi}(p_{1}')\dots\overline{\chi}(p_{n}') e^{-S[\overline{\chi},\chi]+\overline{J}\cdot\chi+\overline{\chi}\cdot J}|_{\overline{J}=0=J} \qquad (2.3.17)$$

$$= G^{m,n}(p_{1}\dots p_{m};p_{1}'\dots p_{n}').$$

Der für die korrekte Normierung der Greenschen Funktionen notwendige Vorfaktor Z^{-1} im erzeugenden Funktional (2.3.15) führt dazu, daß letzteres auf Eins im Sinne von

$$Z[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J} = Z^{-1} \int d[\overline{\chi},\chi] \ e^{-S[\overline{\chi},\chi]} = 1$$
(2.3.18)

normiert ist. Wir werden im nächsten Abschnitt feststellen, daß dadurch ebenfalls die Berechnung des Vorfaktors Z^{-1} bzw. der großkanonischen Zustandssumme möglich ist.

2.4 Störungstheorie und ihre Darstellung durch Feynmangraphen

Die angegebenen Greenschen Funktionen ebenso wie die großkanonische Zustandssumme können im Fall der wechselwirkenden Bosonen nicht exakt berechnet werden. Vielmehr sind Näherungsmethoden für ihre Bestimmung erforderlich. Eine dieser Methoden, die Störungstheorie, basiert auf der im Funktionalintegral (2.3.15) durchführbaren Aufspaltung

$$S = S_0 + S_I,$$
 (2.4.1)

bei der die Terme, die die Wechselwirkung beschreiben, in S_I isoliert werden und der dadurch auftretende Faktor e^{S_I} in einer Potenzreihe entwickelt und integriert wird. Dazu ist es allerdings notwendig, zuvor die Größe

$$Z_0[\overline{J}, J] = Z_0^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] e^{-S_0[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$
(2.4.2)

mit

$$Z_0 = \int d[\overline{\chi}, \chi] \ e^{-S_0[\overline{\chi}, \chi]}$$
(2.4.3)

des Systems ohne Wechselwirkung zu berechnen. Ist dies gelungen, können wir nämlich das erzeugende Funktional des Systems mit Wechselwirkung bzw. die daraus konstruierbaren Größen durch Entwicklung der Relation

$$Z[\overline{J}, J] = Z^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] e^{-S[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$

$$= Z^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] e^{-S_0[\overline{\chi}, \chi] - S_I[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$

$$= Z^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] e^{-S_I[\overline{\chi}, \chi]} e^{-S_0[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$

$$= Z^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] e^{-S_I[\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \overline{J}}]} e^{-S_0[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$

$$= Z^{-1} e^{-S_I[\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \overline{J}}]} \int d[\overline{\chi}, \chi] e^{-S_0[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$

$$= \frac{Z_0}{Z} e^{-S_I[\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \overline{J}}]} Z_0[\overline{J}, J]$$
(2.4.4)

bestimmen. Die dazu notwendige Kenntnis des Funktionals (2.4.2) läßt sich mit Hilfe einer Variablentransformation gewinnen, die die linearen Abhängigkeiten in \overline{J} und J weitestgehend eliminiert. Diese Transformation

$$\begin{split} \chi &\mapsto \chi' = \chi - \zeta \\ \overline{\chi} &\mapsto \overline{\chi}' = \overline{\chi} - \overline{\zeta} \end{split} \tag{2.4.5}$$

bei der die neuen Integrationsvariablen durch gestrichene Größen dargestellt werden und bei der über ζ und $\overline{\zeta}$ noch geeignet verfügt wird, stellt nur eine funktionale Translation dar, so daß aufgrund von d $[\overline{\chi}', \chi'] = d[\overline{\chi}, \chi]$

$$Z_0[\overline{J},J] = Z_0^{-1} \int d[\overline{\chi}',\chi'] \ e^{-S_0[\overline{\chi}'+\overline{\zeta},\chi'+\zeta]+\overline{J}\cdot(\chi'+\zeta)+(\overline{\chi}'+\overline{\zeta})\cdot J}$$
(2.4.6)

folgt. Nutzen wir nun die explizite Gestalt der Wirkung (2.3.7) und insbesondere den wechselwirkungsfreien Anteil

$$S_0[\overline{\chi},\chi] = \sum_p \overline{\chi}(p)\Delta(p)^{-1}\chi(p) \qquad \text{mit } \Delta(p) := \left(-ip^0 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu\right)^{-1}, \qquad (2.4.7)$$

so läßt sich der Exponent des Integranden in der Form

$$-\sum_{p} \left[\left(\overline{\chi}'(p) + \overline{\zeta}(p) \right) \Delta(p)^{-1} \zeta(p) - \left(\overline{\chi}'(p) + \overline{\zeta}(p) \right) J(p) + \chi'(p) \Delta(p)^{-1} \overline{\zeta}(p) - \chi'(p) \overline{J}(p) + \overline{\chi}'(p) \Delta(p)^{-1} \chi'(p) - \zeta(p) \overline{J}(p) \right]$$

$$(2.4.8)$$

schreiben. Er vereinfacht sich noch weiter, wenn wir für die noch geeignet zu wählenden Funktionen $\overline{\zeta}$ und ζ setzen⁶

$$\Delta(p)^{-1}\zeta(p) - J(p) = 0$$
 (2.4.9a)

$$\Delta(p)^{-1}\overline{\zeta}(p) - \overline{J}(p) = 0.$$
(2.4.9b)

Daraus ergibt sich für das erzeugende Funktional ohne Wechselwirkung (2.4.6)

$$Z_{0}[\overline{J},J] = Z_{0}^{-1} \int d[\overline{\chi}',\chi'] e^{-S_{0}[\overline{\chi}',\chi'] + \zeta \cdot \overline{J}}$$

= $Z_{0}^{-1} e^{\zeta \cdot \overline{J}} \int d[\overline{\chi}',\chi'] e^{-S_{0}[\overline{\chi}',\chi']}.$ (2.4.10)

Da das verbleibende Funktionalintegral gemäß (2.4.3) berechnet werden kann und da die Funktion $\zeta(p)$ durch die Wahl (2.4.9a) festgelegt wurde, folgt letztlich die einfache Gestalt⁷

$$Z_0[\overline{J}, J] = e^{J\Delta \cdot J}. \tag{2.4.11}$$

Dieses Resultat ermöglicht es uns nun zusammen mit (2.4.4), das erzeugende Funktional des Systems mit Wechselwirkung durch die Störungsgleichung

$$Z[\overline{J},J] = \frac{Z_0}{Z} e^{-S_I[\frac{\delta}{\delta J},\frac{\delta}{\delta \overline{J}}]} e^{J\Delta \cdot \overline{J}}$$
(2.4.12)

auszudrücken, die zusammen mit der Normierung Z[0,0] = 1 die Grundlage bildet, um sowohl die Greenschen Funktionen, als auch die großkanonische Zustandssumme störungstheoretisch zu entwickeln und zu berechnen.

Um die Störungsentwicklung dieser Größen zu vereinfachen, ist es zweckmäßig - und für viele strukturelle Aspekte auch überaus nützlich - die Terme dieser Entwicklung graphisch durch sogenannte Feynmandiagramme (bzw. in unserem Fall durch Hugenholtzdiagramme) darzustellen. Hierzu wird durch festgelegte Regeln eine Eins-zu-Eins-Korrespondenz von Störungstermen und Graphen hergestellt. Über die graphische Entwicklung hinaus ist es tatsächlich sogar möglich, die komplette Störungsentwicklung der

⁶Hierbei wird deutlich, daß $\overline{\zeta}$ und ζ nicht einfach zueinander komplex konjugierte Größen sind.

⁷Insbesondere erkennt man hierbei, daß der (wechselwirkungs-)freie Propagator $G_0^{1,1}(p;p')$, der im folgenden eine wichtige Rolle spielt, durch $\Delta(p)\delta_{p,p'}$ gegeben ist.

Größen $\frac{Z}{Z_0}G^{m,n}$ und $\frac{Z}{Z_0}$ durch das Zeichnen von Diagrammen zu "berechnen". Die dazu erforderlichen, folgenden Feynmanregeln in der (ω , **k**)-Darstellung beschreiben sowohl die graphische Bestimmung der *r*-ten Ordnung dieser Störungsentwicklung als auch die Übersetzung in algebraische Ausdrücke:

- II_F Jeder aus- oder eingehenden Linie ist ein bestimmter aus- bzw. eingehender Impuls der störungstheoretisch betrachteten Größe zuzuordnen. Darüber hinaus werden auch den inneren Linien unabhängig voneinander Impulse zugeordnet. Der algebraische Ausdruck des Graphen errechnet sich nun, indem man für jede Linie den freien Propagator

$$\overrightarrow{p} = \Delta(p),$$

im folgenden kurz Propagator, multipliziert. Für Linien, die an ein und demselben Vertex beginnen und enden, ist bei der expliziten Berechnung die Benutzung eines konvergenzerzeugenden Faktors $\lim_{\varepsilon \to 0} e^{ip^0 \varepsilon}$ notwendig.

⁸Die aus- und eingehenden Linien werden auch äußere Beine des Diagramms genannt. Die Größe $\frac{Z}{Z_0}$ besitzt keine äußeren Beine.

III_F Weiterhin ist für jedes Auftreten eines Vertizes der entsprechende Faktor

• =
$$-\beta V \alpha$$

• = $-(\beta V)^{1/2} \gamma \delta_{p,0}$
 $\overrightarrow{p=0} = -(\beta V)^{1/2} \overline{\gamma} \delta_{p,0}$
 $\overrightarrow{p_1 \cdot p_2} = -|\psi_c|^2 (U_0 + U_{\mathbf{p}_1}) \delta_{p_1,p_2}$
 $\overrightarrow{p_1 \cdot p_2} = -\psi_c^2 U_{\mathbf{p}_1} \delta_{p_1,-p_2}$
 $\overrightarrow{p_1 \cdot p_2} = -\overline{\psi}_c^2 U_{\mathbf{p}_1} \delta_{p_1,-p_2}$
 $\overrightarrow{p_1 \cdot p_2} = -\overline{\psi}_c^2 U_{\mathbf{p}_1} \delta_{p_1,-p_2}$
 $\overrightarrow{p_1 \cdot p_2} = -\overline{\psi}_c^2 (U_{\mathbf{p}_1} + U_{\mathbf{p}_2}) \delta_{p_1+p_2,p_3}$
 $\overrightarrow{p_2 \cdot p_3} = -\frac{\psi_c}{(\beta V)^{1/2}} (U_{\mathbf{p}_1} + U_{\mathbf{p}_2}) \delta_{p_1+p_2,p_3}$
 $\overrightarrow{p_2 \cdot p_3} = -\frac{1}{\beta V} (U_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3} + U_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_4}) \delta_{p_1+p_2,p_3+p_4}$

zu multiplizieren.

- IV_F Der so erhaltene algebraische Term wird dann über alle inneren Impulse summiert.
- V_F Schließlich ist jedem Diagramm bzw. seiner algebraischen Darstellung noch ein Vorfaktor, der sich aus der Symmetrie des Diagramms bestimmt, hinzuzufügen⁹. In der gängigen Literatur wird dieser Symmetriefaktor üblicherweise implizit behandelt, d.h. bei der Verwendung der Graphen nicht angeführt, sondern erst bei der algebraischen Berechnung berücksichtigt. Wir werden den Vorfaktor allerdings explizit behandeln, also schon in der graphischen Darstellung verwenden.

Um diese Feynmanregeln zu verdeutlichen, betrachten wir die dritte Ordnung in der Störungstheorie. Ein entsprechendes Diagramm zur Berechnung von $\frac{Z}{Z_0}G^{1,1}(p;p')$ ist nach I_F beispielsweise durch

gegeben. Es besteht aus drei unterschiedlichen Vertizes, zwei äußeren Beinen und vier inneren Linien. Wendet man nun die Feynmanregeln II_F - V_F an, so erhält man gemäß der Beschriftung

$$\underbrace{\stackrel{p_1}{\longrightarrow} \stackrel{p_2}{\longrightarrow} \stackrel{p_4}{\longrightarrow}}_{p_2 p_3 p_2}$$
(2.4.14)

⁹Die allgemeine Berechnung der Symmetriefaktoren ist in diesem Fall durch die große Anzahl von Vertizes etwas aufwendig. Die dazu notwendigen Regeln sind [Pop83] zu entnehmen.

den algebraischen Ausdruck

$$\sum_{p_{1},p_{2},p_{3},p_{4}} \Delta(p')\Delta(p_{1})\Delta(p_{2})\Delta(p_{3})\Delta(p_{4})\Delta(p) \left[-\frac{\overline{\psi}_{c}}{(\beta V)^{1/2}} \left(U_{\mathbf{p}'}+U_{\mathbf{p}_{2}}\right)\delta_{p'+p_{2},p_{1}}\right] \\ \times \left[-\frac{\psi_{c}}{(\beta V)^{1/2}} \left(U_{\mathbf{p}_{2}}+U_{\mathbf{p}_{3}}\right)\delta_{p_{2}+p_{3},p_{1}}\right] \left[-\frac{1}{\beta V} \left(U_{\mathbf{p}_{3}-\mathbf{p}_{4}}+U_{\mathbf{p}_{3}-\mathbf{p}}\right)\delta_{p_{3},p}\right], \quad (2.4.15)$$

der sich aufgrund der Kroneckersymbole, die die Impulserhaltung an jedem Vertex zum Ausdruck bringen, wie folgt vereinfacht

$$-\frac{|\psi_c|^2}{(\beta V)^2} \sum_{p_2, p_4} \left(U_{\mathbf{p}} + U_{\mathbf{p}_2} \right)^2 \left(U_0 + U_{\mathbf{p} - \mathbf{p}_4} \right) \Delta(p)^3 \Delta(p_4) \Delta(p_2) \Delta(p_2 + p).$$
(2.4.16)

Unter Benutzung der Feynmanregeln gemäß dem angegebenen Beispiel oder auch mit Hilfe des erzeugenden Funktionals $Z[\overline{J}, J]$ lassen sich nun also sowohl die normierte, großkanonische Zustandssumme $\frac{Z}{Z_0}$ als auch die Greenschen Funktionen $G^{m,n}$ bestimmen. Ihre Entwicklungen bis einschließlich zweiter Ordnung kann man nach längerer Rechnung durch folgende graphische Ausdrücke angeben:

$$\frac{Z}{Z_0} =: \textcircled{0} = 1 + \bullet + \textcircled{0} + \frac{1}{2} \textcircled{0} + \frac{1}{2} \textcircled{0} + \bullet & \textcircled{0} + \frac{1}{2} \rule{0} + \frac{1}{2} \textcircled{0} + \frac{1}{2} \rule{0} + \frac{1$$



(2.4.17f)

Die Größe wird dabei durch die Summe der sogenannten Vakuumdiagramme dargestellt. Diese treten auch bei der Berechnung der Greenschen Funktionen auf, wenn man die angegebenen Feynmanregeln verwendet, fallen aber durch den Übergang $\frac{Z}{Z_0}G^{m,n} \rightarrow G^{m,n}$ heraus [Mag05].

2.4.1 Klassifizierung von Graphen

Bei der Darstellung der Greenschen Funktionen und der großkanonischen Zustandssumme durch Feynmangraphen (2.4.17) fällt auf, daß zwei verschiedene Arten von
Diagram




(2.4.18d)



wobei wir generell die zusammenhängenden Greenschen Funktionen $G_c^{m,n}$ durch darstellen werden. Trotz der Anschaulichkeit der topologischen Definition dieser Propagatoren wäre es sehr nützlich, auch eine rein algebraische Bestimmungsmöglichkeit der $G_c^{m,n}$ zu besitzen. Eine solche ist tatsächlich durch das entsprechende erzeugende Funktional $W[\overline{J}, J]$ gegeben, daß die Form

$$W[\overline{J},J] := \ln(\frac{Z}{Z_0}Z[\overline{J},J]) = \ln(Z[\overline{J},J]) + W \quad \text{mit } e^W := \frac{Z}{Z_0}$$
(2.4.19)

besitzt. Daraus lassen sich die zusammenhängenden Greenschen Funktionen durch

$$G_c^{m,n}(p_1\cdots p_m;p_1'\cdots p_n') = \frac{\delta^m}{\delta \overline{J}(p_1)\dots\delta \overline{J}(p_m)} \frac{\delta^n}{\delta J(p_1')\dots\delta J(p_n')} W[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J}$$
(2.4.20)

errechnen. Zusätzlich kann man nun einfach den expliziten Zusammenhang zwischen den $G^{m,n}_c$ und den $G^{m,n}_c$ angeben. Es gilt beispielsweise

$$G^{2,0}(p,p';) = \frac{\delta^2}{\delta\overline{J}(p)\delta\overline{J}(p')} Z[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J}$$

$$= e^{-W} \frac{\delta^2}{\delta\overline{J}(p)\delta\overline{J}(p')} e^{W[\overline{J},J]} |_{\overline{J}=0=J}$$

$$= e^{-W} \frac{\delta}{\delta\overline{J}(p)} \left(\frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta\overline{J}(p')} e^{W[\overline{J},J]}\right)|_{\overline{J}=0=J}$$

$$= e^{-W} \left(\frac{\delta^2}{\delta\overline{J}(p)\delta\overline{J}(p')} W[\overline{J},J] + \frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta\overline{J}(p)} \cdot \frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta\overline{J}(p')}\right) e^{W[\overline{J},J]} |_{\overline{J}=0=J}$$

$$= \left(\frac{\delta^2}{\delta\overline{J}(p)\delta\overline{J}(p')} W[\overline{J},J] + \frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta\overline{J}(p)} \cdot \frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta\overline{J}(p')}\right) \cdot Z[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J}$$

$$= G^{2,0}_c(p,p';) + G^{1,0}_c(p) \cdot G^{1,0}_c(p')$$

$$(2.4.21a)$$

und entsprechend

$$G^{2,1}(p;p') = G^{1,1}_c(p;p') + G^{0,1}_c(p;p') \cdot G^{1,0}_c(p;p).$$
(2.4.21b)

Die graphische Darstellung dieser Beziehung lautet

und erlaubt eine Verifikation mit Hilfe der Entwicklungen (2.4.17) und (2.4.18). Die in (2.4.19) eingeführte Normierungskonstante $W = \ln \frac{Z}{Z_0}$ führt zu

$$W[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J} = W, \qquad (2.4.23)$$

und ermöglicht die Berechnung der zusammenhängenden Vakuumgraphen, die durch

$$W =: \bigcirc = \bullet + \bigcirc + \frac{1}{2} \bigcirc + \bullet \bullet + \frac{1}{2} \bigcirc + \frac{1}{2} \circlearrowright + \frac{1}{2} \circlearrowright + 0 \bullet \bullet \bigcirc + \frac{1}{2} \circlearrowright + \frac{1}{2}$$

gegeben sind.

$$\Delta(p) \Big[\frac{|\psi_c|^2}{\beta V} \sum_{p_2} (U_{\mathbf{p}} + U_{\mathbf{p}_2})^2 \Delta(p_2) \Delta(p_2 + p) \Big] \Delta(p) \Big[-\frac{1}{\beta V} \sum_{p_4} (U_0 + U_{\mathbf{p} - \mathbf{p}_4}) \Delta(p_4) \Big] \Delta(p)$$
(2.4.25)

schreiben, und wir erkennen, daß die Diagrammteile, die nur durch eine Linie miteinander verbunden sind, einfach multipliziert werden - abgesehen von den zusätzlichen Propagatoren $\Delta(p)$. Es gibt also keine gemeinsame Summation. Um die Impulsabhängigkeit dieses Diagramms zu bestimmen, genügt demzufolge nur die Kenntnis des freien Propagators und der zwei irreduziblen Graphen \rightarrow , \rightarrow . Letztere lassen sich mit Hilfe der Feynmanregeln berechnen, wobei nun aber die sonst berücksichtigten Propagatoren der äußeren Beine weggelassen werden. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von der "Amputation" der äußeren Beine, und die entsprechende graphische Darstellung ist durch die amputierten Linien \leftarrow , \leftarrow gegeben. Wir erkennen an diesem Beispiel, daß letztlich nur die Kenntnis der irreduziblen Graphen entscheidend ist, um alle Feynmandiagramme zu bestimmen. Und damit ist insbesondere plausibel, warum gerade die irreduziblen, zusammenhängenden Anteile¹⁰ Σ der Greenschen Funktionen bzw. der Vakuumgraphen, die durch

$$\Sigma^{0,0} =: \mathfrak{S} = \bullet + \mathfrak{O} + \frac{1}{2} \mathfrak{O} + \frac{1}{2} \mathfrak{O} + \frac{1}{2} \mathfrak{O} + \mathfrak{O}$$

$$+ \frac{1}{2} \mathfrak{O} + \frac{1}{8} \mathfrak{O} + \frac{1}{2} \mathfrak{O}$$

$$(2.4.26a)$$

$$\Sigma^{1,0} =: \bigoplus + \bigoplus + \bigoplus + \frac{1}{2} \bigoplus + \frac{1}{$$

$$\Sigma^{0,1} =: \textcircled{0} \longrightarrow = \longleftrightarrow + () \longrightarrow + \frac{1}{2} () \longrightarrow + \frac{1$$

$$+ + + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

gegeben sind, im generellen als auch speziell im folgenden eine so wichtige Rolle spielen.

¹⁰Kurz Selbstenergieanteile oder Selbstenergien.

3 Die Hugenholtz-Pines-Relation

Im Jahr 1959 konnten Hugenholtz und Pines in ihrem bekannten Artikel "Ground State Energy and Exitation Spectrum of a System of Interacting Bosons" [HP59] eine Beziehung zwischen dem chemischen Potential und den Selbstenergieanteilen $\Sigma^{1,1}$ und $\Sigma^{2,0}$, beide für p = 0, ableiten. Mit Hilfe dieser Hugenholtz-Pines-Relation¹

$$\Sigma^{1,1}(0) + \mu = \Sigma^{2,0}(0) \tag{3.0.1}$$

ist es möglich², zu beweisen, daß die phononischen Anregungen des Bosesystems bei verschwindendem Impuls eine verschwindende Energie besitzen. Das entsprechende Energiespektrum bezeichnet man dann als "gapless". Hugenholtz und Pines konnten somit zeigen, daß für solche Theorien, die einen fälschlichen Sprung im Anregungsspektrum vorhersagen, der Grund für das Auftreten eines Sprunges in der inkonsistenten Behandlung von $\Sigma^{1,1}$ und $\Sigma^{2,0}$ liegt. Ihre Relation spielt deshalb eine Schlüsselrolle bei der Klassifizierung von Näherungsmodellen für kondensierte, bosonische Systeme und ist auch nach über 40 Jahren seit der ersten Veröffentlichung noch Gegenstand aktueller Forschung [HM65, Gri96, EOY05].

Wir wollen in diesem Kapitel auf die zugehörigen Arbeiten [Pop83, Pop87, PY88] von Popov Bezug nehmen. Der Autor hat nämlich in seinen Publikationen gezeigt, wie die Hugenholtz-Pines-Relation für endliche Temperaturen aus dem Funktionalintegralformalismus unter Benutzung eines großkanonischen Ensembles folgt (Hugenholtz und Pines betrachteten nur den Fall T = 0 bei fester Teilchenzahl). Allerdings weist seine Behandlung der Problematik zwei Schwachstellen auf. Zum einen ist seine Beweisargumentation nicht stichhaltig und führte ihn deshalb zu einer inkorrekten Behandlung von Vertizes. Zum anderen benutzte er in seinem Beweis der HP-Relation einige Identitäten, deren Gültigkeit er nur in endlicher Ordnung der Störungsrechnung nachweisen konnte.

Wir werden im folgenden eine korrekte Ableitung der Hugenholtz-Pines-Relation angeben. Insbesondere werden wir dazu auch die allgemeine Gültigkeit der angesprochenen Identitäten beweisen. Bevor wir uns aber dem eigentlichen Beweis der Relation (3.0.1) zuwenden, werden wir die Schwinger-Dyson-Gleichungen des von uns betrachteten Bosesystems herleiten, da diese im darauf folgenden Beweis eine entscheidende Rolle spielen werden.

¹Es sei darauf hingewiesen, daß aufgrund einer anderen Vorzeichenkonvention bei den Greenschen Funktionen in einigen Arbeiten auch die Relation als $\mu = \Sigma^{1,1}(0) - \Sigma^{2,0}(0)$ angegeben wird.

²Wir werden im Kapitel 4 darauf zurückkommen.

3.1 Die Schwinger-Dyson-Gleichungen

Die Schwinger-Dyson-Gleichungen bilden ein System unendlich vieler, gekoppelter Integralgleichungen, die von den Greenschen Funktionen erfüllt werden. Diese Gleichungen können nicht-approximativ abgeleitet werden und sind somit exakt. Allerdings lassen sich mit diesem System nur schwer analytische Ergebnisse erzielen, da es nicht endlich abgeschlossen ist [Nas78]. Trotzdem werden wir im folgenden diese Schwinger-Dyson-Gleichungen für die von uns betrachtete Theorie des Bosesystems herleiten, um sie im Anschluß bei der Ableitung der Hugenholtz-Pines-Relation zu benutzen. Darüber hinaus bieten die Gleichungen ebenfalls die Möglichkeit, Näherungsausdrücke - sowohl in der Entwicklung nach der Kopplungskonstanten als auch in der Loopordnung - für die Greenschen Funktionen zu bestimmen. Diese Tatsache wird uns bei einigen Rechnungen zur Analyse des verdünnten Bosegases sehr hilfreich sein.

Der Ausgangspunkt für unsere Herleitung ist die Gleichung

$$0 = \int \mathbf{d}[\overline{\boldsymbol{\chi}}, \boldsymbol{\chi}] \ \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\chi}(p)} e^{-S[\overline{\boldsymbol{\chi}}, \boldsymbol{\chi}] + \overline{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{\chi} + \overline{\boldsymbol{\chi}} \cdot \boldsymbol{J}}, \qquad (3.1.1)$$

die die Invarianz des Maßes unter Translationen zum Ausdruck bringt [Vas98]. Durch explizite Differentiation und Muliplikation des Vorfaktors Z^{-1} ergibt sich

$$0 = Z^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] \left(-\frac{\delta S}{\delta \chi(p)} [\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \right) e^{-S[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$

$$= Z^{-1} \int d[\overline{\chi}, \chi] \left(-\frac{\delta S}{\delta \chi(p)} [\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \overline{J}}] + \overline{J} \right) e^{-S[\overline{\chi}, \chi] + \overline{J} \cdot \chi + \overline{\chi} \cdot J}$$
(3.1.2)
$$= \left(-\frac{\delta S}{\delta \chi(p)} [\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \overline{J}}] + \overline{J} \right) Z[\overline{J}, J].$$

Die Gleichung (3.1.2) für das erzeugende Funktional $Z[\overline{J}, J]$ kann als kompakte Schreibweise aller Schwinger-Dyson-Gleichungen aufgefaßt werden, da man letztere durch funktionale Taylorentwicklung um $\overline{J} = 0 = J$ erhält.

Speziell für das von uns betrachtete System des Bosegases folgt mit der Wirkung (2.3.7)

$$0 = \left\{ \Delta(p)^{-1} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} + (\beta V)^{1/2} \gamma \delta_{p,0} + |\psi_c|^2 (U_0 + U_p) \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} + \psi_c^2 U_p \frac{\delta}{\delta J(-p)} \right. \\ \left. + \frac{\psi_c}{(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ = p_3}} (U_{p_1} + U_{p_2}) \delta_{p,p_1} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_2)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_3)} \right. \\ \left. + \frac{\overline{\psi}_c}{2(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ = p_3}} (U_{p_1} + U_{p_2}) \delta_{p,p_3} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_1)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_2)} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2\beta V} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ = p_3 + p_4}} (U_{p_1 - p_3} + U_{p_1 - p_4}) \delta_{p,p_1} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_2)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_3)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_4)} - J(p) \right\} Z[\overline{J}, J].$$

$$(3.1.3)$$

Wir gehen nun gemäß (2.4.19) zum erzeugenden Funktional der zusammenhängenden Greenschen Funktionen über. Dazu führen wir der Übersichtlichkeit halber die Schreibweise

$$W_{1'\dots m'|1\dots n} := \frac{\delta^m}{\delta \overline{J}(p_1')\dots\delta \overline{J}(p_m')} \frac{\delta^n}{\delta J(p_1)\dots\delta J(p_n)} W[\overline{J}, J]$$
(3.1.4)

ein und erhalten aus (3.1.3) die Gleichung

$$\begin{split} W_{p|} &= -\Delta(p) \left\{ (\beta V)^{1/2} \gamma \delta_{p,0} + |\psi_{c}|^{2} (U_{0} + U_{p}) W_{p|} + \psi_{c}^{2} U_{p} W_{|-p} \right. \\ &+ \frac{\psi_{c}}{(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{p_{1}+p_{2} \\ =p_{3}}} (U_{p_{1}} + U_{p_{2}}) \delta_{p,p_{1}} (W_{p_{3}|p_{2}} + W_{|p_{2}} W_{p_{3}|}) \\ &+ \frac{\overline{\psi}_{c}}{2(\beta V)^{1/2}} \sum_{\substack{p_{1}+p_{2} \\ =p_{3}}} (U_{p_{1}} + U_{p_{2}}) \delta_{p,p_{3}} (W_{p_{1}p_{2}|} + W_{p_{1}|} W_{p_{2}|}) \\ &+ \frac{1}{2\beta V} \sum_{\substack{p_{1}+p_{2} \\ =p_{3}+p_{4}}} (U_{p_{1}-p_{3}} + U_{p_{1}-p_{4}}) \delta_{p,p_{1}} \\ &\cdot (W_{p_{3}p_{4}|p_{2}} + W_{p_{3}p_{4}|} W_{|p_{2}} + 2W_{p_{3}|} W_{p_{4}|p_{2}} + W_{p_{3}|} W_{p_{4}|} W_{|p_{2}}) - J(p) \right\} \end{split}$$
(3.1.5)

in den Funktionalen $W_{1'\dots m'|1\dots n}$. Durch Auswertung an der Stelle $\overline{J} = 0 = J$ erhalten wir daraus unter der Berücksichtigung, daß die zusammenhängenden Greenschen Funktionen durch $G_c^{m,n}(p'_1,\dots,p'_m;p_1,\dots,p_n) = (W_{1'\dots m'|1\dots n})|_{\overline{J}=0=J}$ gegeben sind, die erste der Schwinger-Dyson-Gleichungen. Die übrigen Gleichungen folgen analog durch sukzessive Differentiation von (3.1.5) nach *J* bzw. \overline{J} und anschließender Auswertung an der Stelle $\overline{J} = 0 = J$.

Um die Lesbarkeit der Schwinger-Dyson-Gleichungen zu erhöhen, ist es angebracht, diese in ihrer graphischen Form zu verwenden. Dazu benutzen wir die Feynmanregeln und erhalten für die ersten Gleichungen

SD-Gleichung für $G_c^{1,0}$



SD-Gleichung für $G_c^{1,1}$



SD-Gleichung für $G_c^{2,0}$



Es ist nun ersichtlich, daß es mit Hilfe dieser und den höheren Schwinger-Dyson-Gleich-

ungen möglich ist, sich systematisch durch iteratives Einsetzen die zusammenhängenden Greenschen Funktionen in der Entwicklung nach der Kopplungskonstanten zu beschaffen. So verbleibt zum Beispiel in nullter Ordnung, d.h. ohne Wechselwirkung, in (3.1.7) nur der freie Propagator - wie man es auch erwarten sollte. Auf die gleiche Weise kann man sich die Loopentwicklung der angegebenen Greenschen Funktionen beschaffen.

3.1.1 Schwinger-Dyson-Gleichungen in Bezug auf $\Sigma^{1,0}$

Für unsere Zwecke ist es nützlich, wenn wir uns nun der Gleichung (3.1.6) zuwenden. Denn es ist möglich, daraus eine Gleichung für den Selbstenergieanteil $\Sigma^{1,0}$ zu erhalten. Dazu genügen folgende Überlegungen. Zum einen können die in $G_c^{1,0}$ enthaltenen irreduziblen Graphen nicht durch Summanden wie \bigcirc ---- erzeugt werden, da deren Strukturen eine Irreduzibilität von vornherein ausschließen. Zum anderen müssen bei den dann noch in Frage kommenden Summanden die darin enthaltenen zusammenhängenden Greenschen Funktionen auf ihre Graphen ohne p = 0-Einschübe³ eingeschränkt werden, um irreduzible Graphen zu erzeugen. Führen wir aus diesem Grunde die Bezeichnung

$$= + \{ \text{Graphen mit } p = 0 \text{-Einschübe} \}$$
 (3.1.9)

ein, wobei \bigotimes nur Graphen ohne p = 0-Einschübe enthält, so folgt für den Selbstenergieanteil $\Sigma^{1,0}$ aus (3.1.6) die Relation

$$\Sigma^{1,0}\Delta(0) = \bullet + \bullet + 1/2 \bullet$$

die wir wie folgt benutzen können. Machen wir nämlich die Annahme $G^{1,0} = 0$ bzw. $G_c^{1,0} = 0$ oder graphisch $\bigcirc - = 0$, dann folgt aus (3.1.6)

$$0 = G_c^{1,0} = + + + \frac{1}{2} + \frac{$$

Und da unter der gemachten Annahme ebenfalls alle Graphen mit p = 0-Einschüben verschwinden, folgt die Übereinstimmung $\mathfrak{H} = \mathfrak{H}$. Deshalb ergibt ein Vergleich von (3.1.10) und (3.1.11) die Implikation

$$G^{1,0} = 0 \Longrightarrow 0 = \Sigma^{1,0} \Delta(0) = + + + 1/2 \bigcirc + 1/2 \bigcirc$$

Wir werden noch sehen, daß gerade die letzte Gleichung eine enge Beziehung zur Hugenholtz-Pines-Relation aufweist und daß die angegebene Implikation eine wichtige Rolle bei unserer Herleitung jener Relation spielen wird.

³Den Teil eines Graphen, der keine äußeren Beine besitzt und mit dem Rest des Diagramms nur durch eine Linie verbunden ist, bezeichnet man als p = 0-Einschub, da dieser Linie ein Impuls p = 0 zugeordnet ist.

3.2 Differentialidentitäten der Selbstenergieanteile

In seinen Betrachtungen zur Hugenholtz-Pines-Relation hat Popov erstmals Differentialidentitäten zwischen den Selbstenergieanteilen des Bosesystems angegeben. Allerdings konnte er diese Beziehungen nur störungstheoretisch begründen, indem er eine entsprechende Näherung dieser Selbstenergien durch endlich viele Feynmangraphen benutzte. Wir wollen im folgenden diese approximative Betrachtung begründen, um im Anschluß daran einen generellen Beweis der Identitäten darzulegen.

3.2.1 Störungstheoretische Betrachtungen

Ausgehend von der expliziten Darstellung der Selbstenergien durch Feynmangraphen ist es möglich, einzusehen, daß $\Sigma^{1,0}(0)$ und $\Sigma^{0,1}(0)$ erzeugt werden können, indem man $\Sigma^{0,0}$ nach ψ_c bzw. $\overline{\psi}_c$ ableitet. Dazu betrachten wir die entsprechenden graphischen Terme in der Entwicklung nach den Vertizes, was ja der konventionellen Störungstheorie entspricht, bis einschließlich zweiter Ordnung und erhalten die Übersicht

wobei wir zur besseren Darstellung die Abkürzungen

$$A = -\sum_{p} \{U_{0} + U_{\mathbf{p}}\}\Delta(p)$$

$$B = \sum_{p} \{U_{0} + U_{\mathbf{p}}\}^{2}\Delta(p)^{2}$$

$$C = \sum_{p} U_{\mathbf{p}}^{2}\Delta(p)\Delta(-p)$$

$$D = \sum_{p,q} \{U_{\mathbf{p}} + U_{\mathbf{q}}\}^{2}\Delta(p)\Delta(q)\Delta(p+q)$$

$$E = \sum_{p,q} \{U_{0} + U_{\mathbf{p}}\}\{U_{0} + U_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\}\Delta(p)^{2}\Delta(q)$$

benutzt haben. Mit Hilfe der angegebenen Tabelle können wir nun leicht einsehen, daß (zumindest bis zur 2. Ordnung) die Identitäten

$$\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{0,0} = \Sigma^{1,0}(0)$$
(3.2.1a)

$$\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,\psi_c} \Sigma^{0,0} = \Sigma^{0,1}(0) \tag{3.2.1b}$$

gültig sind. Interessanterweise ist in diesem Fall also die graphische Entsprechung der Ableitungen $(\beta V)^{-1/2} \frac{d}{d\overline{\psi}_c}$ bzw. $(\beta V)^{-1/2} \frac{d}{d\psi_c}$ einfach das Anfügen von auslaufenden bzw. einlaufenden äußeren Beinen mit Impulsen p = 0. Um festzustellen, ob diese Entsprechung allgemeinerer Natur ist, wollen wir nun diese Ableitungen auf $\Sigma^{1,0}(0)$ und $\Sigma^{0,1}(0)$ anwenden. Dazu benutzen wir die Übersicht

und erhalten zusammen mit der Tabelle (Ü1) die Relationen

$$\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\psi_c} \Sigma^{1,0}(0) = \Sigma^{1,1}(0) + \mu = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{0,1}(0)$$
(3.2.2a)

$$\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{1,0}(0) = \Sigma^{2,0}(0)$$
(3.2.2b)

$$\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\psi_c} \Sigma^{0,1}(0) = \Sigma^{0,2}(0).$$
(3.2.2c)

Wir erkennen somit, daß die vermutete Entsprechung von den Ableitungen und dem Anfügen von äußeren Beinen nicht ganz gegeben ist. Die Ursache für die auftretende Abweichung liegt letzten Endes in den Vertizes \leftarrow, \leftarrow . Trotzdem war es uns in diesem Abschnitt durch direkten Vergleich der graphischen Entwicklungen möglich, Differentialidentitäten der Selbstenergieanteile anzugeben. Allerdings besitzt die dazu durchgeführte Herangehensweise den entscheidenden Nachteil, daß sie diese Identitäten nur bis endlicher Ordnung (hier zweite Ordnung Störungsrechnung) aufzeigen kann. Somit stellt sich nun für uns die Frage, ob die angegebenen Beziehungen (3.2.1, 3.2.2) eine exakte Gültigkeit besitzen, und wie man dies gegebenenfalls beweist.

3.2.2 Exakte Herleitung

Im folgenden wollen wir die zuvor störungstheoretisch dargelegten Differentialidentitäten der Selbstenergieanteile beweisen. Dazu führen wir als erstes zwei Derivationen auf der Menge der Feynmangraphen ein. Betrachtet man bei letzteren nur die Abhängigkeit von ψ_c und $\overline{\psi}_c$, so läßt sich diese funktionale Abhängigkeit eines Graphen durch $f(\psi_c, \overline{\psi}_c, \gamma(\psi_c, \overline{\psi}_c), \overline{\gamma}(\psi_c, \overline{\psi}_c))$ beschreiben. Als Derivationen des Graphen definieren wir nun

$$Df := \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{df}{d\psi_c} + \frac{\mu}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial f}{\partial \gamma}$$
(3.2.3a)

$$\overline{\mathbf{D}}f := \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} + \frac{\mu}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial f}{\partial\overline{\gamma}},\tag{3.2.3b}$$

bestehend aus den totalen Ableitungen nach $\psi_c, \overline{\psi}_c$ und den partiellen Ableitungen nach $\gamma, \overline{\gamma}$. Diese Derivationen besitzen nun tatsächlich die graphische Entsprechung des Anfügens von äußeren Beinen mit p = 0. Denn für die einzelnen Vertizes gilt

$$D(\bullet) = \bigcup_{0}^{\bullet} D(\bullet) = 0$$

$$D(\bullet) = \bigcup_{0}^{\bullet} D(\bullet) = \bigcup_{0}^{\bullet} D(\bullet) = 0$$

$$D(\bullet) = \bigcup_{0}^{\bullet} D(\bullet) = 0$$

$$D(\bullet) = \bigcup_{0}^{\bullet} D(\bullet) = 0$$

Aus der Leibnizregel folgt dann, daß die Derivation D eines Graphen, der sich ja aus einzelnen Vertizes zusammensetzt, in der Summe resultiert, die sich aus dem ursprünglichen Graphen bildet, wenn man ein einlaufendes äußeres Bein mit p = 0 an alle möglichen Vertizes anfügt (und entsprechend für die Derivation \overline{D}). So gilt zum Beispiel

$$D\Big(\bullet\bullet\bullet\Big)=\overset{0}{\bullet\bullet}\bullet&\Big(\bullet\bullet\bullet&\bigcirc_{0}^{\bullet}.$$

Obwohl wir nun wissen, wie die Wirkung von D und \overline{D} bezüglich eines beliebigen Feynmangraphen aussieht, ist die Frage nach der Wirkung von D und \overline{D} auf beispielsweise $\Sigma^{0,0}$ nicht einfach. Dennoch können wir diese Frage beantworten.
Dazu nutzen wir die Schwinger-Dyson-Gleichung (3.1.3) für das erzeugende Funktional $Z[\overline{J}, J]$ und betrachten speziell den Fall p = 0. Unter Beachtung der Derivation (3.2.3b) und der Ergebnisse (3.2.4) erhalten wir

$$\begin{split} \frac{\delta}{\delta J(0)} Z[\overline{J}, J] &= \Delta(0) \left\{ -(\beta V)^{\frac{1}{2}} \gamma - 2U_0 |\psi_c|^2 \frac{\delta}{\delta \overline{J}(0)} - \psi_c^2 U_0 \frac{\delta}{\delta J(0)} \right. \\ &- \frac{\psi_c}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \sum_p \left(U_0 + U_p \right) \frac{\delta}{\delta J(p)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} - \frac{\overline{\psi}_c}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \sum_p U_p \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(-p)} \\ &- \frac{1}{2\beta V} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ = p_3}} \left(U_{p_1} + U_{p_2} \right) \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_1)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_2)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_3)} + J(0) \right\} Z[\overline{J}, J] \\ &= \Delta(0) \left\{ -\overline{D} \Big[\beta V \alpha + (\beta V)^{\frac{1}{2}} \overline{\gamma} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(0)} + (\beta V)^{\frac{1}{2}} \gamma \frac{\delta}{\delta J(0)} \\ &+ |\psi_c|^2 \sum_p \left(U_0 + U_p \right) \frac{\delta}{\delta J(p)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} + \frac{1}{2} \sum_p U_p \left\{ \psi_c^2 \frac{\delta}{\delta J(p)} \frac{\delta}{\delta J(-p)} + \overline{\psi}_c^2 \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(-p)} \right\} \\ &+ \frac{1}{2(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ = p_3}} \left(U_{p_1} + U_{p_2} \right) \left(\psi_c \frac{\delta}{\delta J(p_1)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_2)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_3)} + \overline{\psi}_c \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_1)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_2)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_3)} \right) \\ &+ \frac{1}{4\beta V} \sum_{\substack{p_1 + p_2 \\ = p_3 + p_4}} \left(U_{p_1 p_3} + U_{p_1 p_4} \right) \frac{\delta}{\delta J(p_1)} \frac{\delta}{\delta J(p_2)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_3)} \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p_4)} \Big] + J(0) \right\} Z[\overline{J}, J] \\ &= \Delta(0) \left\{ -\overline{D} S_I [\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \overline{J}}] + J(0) \right\} Z[\overline{J}, J]. \end{split}$$

Aufgrund unserer Kenntnis über die explizite Gestalt des in dieser Gleichung auftretenden Funktionals $Z[\overline{J}, J] = \frac{Z_0}{Z} e^{-S_I[\frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta J}]} e^{J\Delta \overline{J}}$, bei dem die ψ_c – und $\overline{\psi}_c$ – Abhängigkeit ja allein durch S_I gegeben ist, folgt

$$\frac{\delta}{\delta \overline{J}(0)} Z[\overline{J}, J] = \Delta(0) \left\{ \overline{\mathbf{D}} + J(0) \right\} Z[\overline{J}, J].$$
(3.2.6)

Gehen wir nun durch $Z[\overline{J}, J] = e^W e^{W[\overline{J}, J]}$ zum erzeugenden Funktional der zusammenhängenden Greenschen Funktionen über, so erhalten wir

$$\frac{\delta}{\delta \overline{J}(0)} W[\overline{J}, J] = \Delta(0) \overline{D} W[\overline{J}, J] + \Delta(0) J(0)$$
(3.2.7)

als Beziehung zwischen der von uns eingeführten Derivation und der funktionalen Ableitung. Durch Auswertung dieser Gleichung an der Stelle $\overline{J} = 0 = J$ bzw. vorheriger Ableitung nach J(0) oder $\overline{J}(0)$ ergeben sich die folgenden Differentialidentitäten der zusammenhängenden Greenschen Funktionen

$$G_c^{1,0}(0) = \Delta(0)\overline{\mathbf{D}}G_c^{0,0} \tag{3.2.8a}$$

$$G_c^{2,0}(0) = \Delta(0)\overline{\mathbf{D}}G_c^{1,0}(0)$$
(3.2.8b)

$$G_c^{1,1}(0) = \Delta(0)\overline{\mathbf{D}}G_c^{0,1} + \Delta(0), \qquad (3.2.8c)$$

wobei das separate $\Delta(0)$ in (3.2.8c) gerade den freien Propagator darstellt, der ja keine Vertizes enthält und somit auch nicht durch die Derivation \overline{D} erzeugt werden kann.

Aufgrund der graphischen Entsprechung wissen wir, daß \overline{D} nur reduzible auf reduzible und irreduzible auf irreduzible Graphen abbildet. Deshalb gelten die Gleichungen (3.2.8) auch getrennt für die reduziblen Anteile und die irreduziblen Anteile der Greenschen Funktionen $G_c^{m,n}$. Insbesondere folgt also

$$\begin{split} \Sigma^{1,0}(0) &= \overline{D}\Sigma^{0,0} & \Sigma^{0,1}(0) = D\Sigma^{0,0} \\ \Sigma^{2,0}(0) &= \overline{D}\Sigma^{1,0}(0) & \text{und entsprechend auch} & \Sigma^{0,2}(0) = D\Sigma^{0,1}(0) & (3.2.9) \\ \Sigma^{1,1}(0) &= \overline{D}\Sigma^{0,1}(0) & \Sigma^{1,1}(0) = D\Sigma^{1,0}(0). \end{split}$$

Betrachten wir an dieser Stelle noch einmal die Definition (3.2.3) der Derivationen D und \overline{D} . Wir sehen, daß neben der Ableitung nach ψ_c bzw. $\overline{\psi}_c$ noch die Ableitung nach γ bzw. $\overline{\gamma}$ vorhanden ist. Bei den Selbstenergien treten aber γ und $\overline{\gamma}$ beziehungsweise \leftrightarrow und

 \leftarrow nicht in Verbindung mit anderen Vertizes auf, da die resultierende Struktur reduzibel wäre. Damit verbleiben nur $\leftarrow \in \Sigma^{1,0}$ und $\leftarrow \in \Sigma^{0,1}$ selbst als die einzigen Graphen der Selbstenergieanteile, bei denen die Ableitung nach γ bzw. $\overline{\gamma}$ nicht verschwindet, und somit gilt

$$\Sigma^{1,0}(0) = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{0,0}$$
(3.2.10a)

$$\Sigma^{2,0}(0) = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{1,0}(0)$$
(3.2.10b)

$$\Sigma^{1,1}(0) = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{0,1}(0) + \frac{\mu}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial\overline{\gamma}} (\rightarrow)$$

$$= \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_c} \Sigma^{0,1}(0) - \mu$$
(3.2.10c)

sowie

$$\Sigma^{0,1}(0) = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\psi_c} \Sigma^{0,0}$$
(3.2.11a)

$$\Sigma^{0,2}(0) = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\psi_c} \Sigma^{0,1}(0)$$
(3.2.11b)

$$\Sigma^{1,1}(0) = \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{d}{d\psi_c} \Sigma^{1,0}(0) + \frac{\mu}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial \gamma} (\bullet \bullet \)$$

= $\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{d}{d\psi_c} \Sigma^{1,0}(0) - \mu.$ (3.2.11c)

Wir erkennen also, daß die von Popov störungstheoretisch begründeten Differentialidentitäten der Selbstenergieanteile (3.2.1, 3.2.2) aus den Schwinger-Dyson-Gleichungen folgen und somit exakt sind.

3.3 Beweis der HP-Relation

Nachdem wir im letzten Abschnitt die Identitäten der Selbstenergieanteile bewiesen haben, können wir uns nun dem eigentlichen Beweis der Hugenholtz-Pines-Relation zuwenden. Dazu gehen wir von der expliziten Darstellung der ψ_c , $\overline{\psi}_c$ -Abhängigkeit von $\Sigma^{0,0}$ aus, die gemäß (C.0.4) durch

$$\Sigma^{0,0} = h(|\psi_c|^2) \tag{3.3.1}$$

beschrieben werden kann. Verwenden wir an dieser Stelle die Differentialidentitäten (3.2.10, 3.2.11) so erhalten wir die Relation

$$\begin{split} \Sigma^{1,0}(0) &= \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_{c}} \Sigma^{0,0} \\ &= \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} h'(|\psi_{c}|^{2}) \psi_{c} \\ &= \frac{\psi_{c}}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \left(h'(|\psi_{c}|^{2}) + h''(|\psi_{c}|^{2}) \psi_{c} \overline{\psi}_{c} \right) - \frac{\overline{\psi}_{c}}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} h''(|\psi_{c}|^{2}) \psi_{c}^{2} \\ &= \psi_{c}(\beta V)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\psi_{c}} \Sigma^{1,0}(0) \right) - \overline{\psi}_{c}(\beta V)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\overline{\psi}_{c}} \Sigma^{1,0}(0) \\ &= (\beta V)^{\frac{1}{2}} \left[\psi_{c} \left(\Sigma^{1,1}(0) + \mu \right) - \overline{\psi}_{c} \Sigma^{2,0}(0) \right], \end{split}$$
(3.3.2)

die aufgrund ihrer einzelnen Terme eine Verbindung mir der HP-Relation vermuten läßt. Darüber hinaus tritt in der letzten Gleichung aber auch die bisher beliebige Konstante ψ_c auf. Diese wollen wir im folgenden durch

$$\psi_c \stackrel{!}{=} \frac{\langle \hat{\psi}(0) \rangle}{(\beta V)^{\frac{1}{2}}} \tag{3.3.3}$$

festlegen. Insbesondere können wir hierbei, analog zu den Ausführungen im Abschnitt 2.2, die Phase reell wählen [Bro92]. Damit erhält ψ_c^2 aufgrund von (2.3.14) die natürliche Bedeutung der Kondensatsdichte, d.h. $\psi_c = \sqrt{n_c}$.

Durch diese Festlegung von ψ_c folgt aus (3.3.2) die Relation

$$\Sigma^{1,0}(0) = (\beta V n_c)^{\frac{1}{2}} (\Sigma^{1,1}(0) + \mu - \Sigma^{2,0}(0)).$$
(3.3.4)

Mit der Bedingung $n_c \neq 0$, die bei der Betrachtung der bosonischen Kondensation sinnvoll ist⁴, zeigt sich damit, daß die HP-Relation mit der Aussage $\Sigma^{1,0} = 0$ äquivalent ist. Nutzen wir nun diese Äquivalenz zusammen mit der aus (3.3.3) folgenden Aussage über die Greensche Funktion $G^{1,0}$

$$0 = \langle \hat{\psi}(0) \rangle - (\beta V)^{\frac{1}{2}} \psi_c = \langle \hat{\chi}(0) \rangle = G^{1,0}(0)$$
(3.3.5)

und zusammen mit der Implikation (3.1.12), so folgt schließlich die Gültigkeit der bekannten Hugenholtz-Pines-Relation

$$\Sigma^{1,1}(0) + \mu = \Sigma^{2,0}(0). \tag{3.0.1}$$

bei endlichen Temperaturen. Wir betonen dabei, daß dieses Resultat nicht störungstheoretisch ist, da es auf den exakten Schwinger-Dyson-Gleichungen beruht.

Bereits am Anfang dieses Kapitels hatten wir darauf hingewiesen, daß unsere Herleitung der HP-Relation unter Benutzung des großkanonischen Ensembles durchgeführt wird, während Hugenholtz und Pines eine feste Teilchenzahl betrachteten. Dadurch ergibt sich ein interessanter Bedeutungswechsel jener Relation. Denn, wie bereits angesprochen, war für Hugenholtz und Pines (3.0.1) eine Konsistenzbeziehung für ein Modell des bosonischen Systems, die die Näherungen der Selbstenergien $\Sigma^{1,1}$ und $\Sigma^{2,0}$ mit dem daraus resultierenden Ergebnis $\frac{\partial E(T,V,N)}{\partial N} = \mu$ verglich. Im großkanonischen Ensemble hingegen ist die Relation

$$\left[\Sigma^{1,1}(0) - \Sigma^{2,0}(0)\right](T, V, \mu, n_c) + \mu = 0.$$
(3.3.6)

eine implizite Bestimmungsgleichung für die Kondensatsdichte $n_c(T, V, \mu)$. Dies wird uns im Kapitel 5 bei der Berechnung der "thermal depletion" eine große Hilfe sein. Insbesondere werden wir dann die äquivalente Darstellung der Hugenholtz-Pines-Relation

$$0 = + + 1/2 + 1/2 + 1/2 + (3.3.7)$$

benutzen, deren Gültigkeit aus der Äquivalenz zu $\Sigma^{1,0} = 0$ und aus der Darstellung (3.1.12) von $\Sigma^{1,0}$ folgt.

⁴Siehe dazu [Pop83, S. 128].

Nachdem es uns nun gelungen ist, die Hugenholtz-Pines-Relation für $T \neq 0$ zu beweisen, ist es angebracht, noch einmal auf den Unterschied zum von Popov durchgeführten Beweis einzugehen. Neben dem bereits erwähnten nur störungstheoretisch durchgeführten Nachweis der Differentialidentitäten, besteht der Schwachpunkt in Popovs Beweis in seiner Argumentation. Er setzt nämlich die Konstante ψ_c gleich am Anfang seines Beweises durch (3.3.3) fest, um $G^{1,0}(p) = 0$ zu erhalten, und begründet daraus, daß er sämtliche p = 0-Einschübe innerhalb der Greenschen Funktionen weglassen kann. Trotzdem differenziert er Teile dieser Greenschen Funktionen zur Ableitung der Differentialidentitäten nach $\psi_c, \overline{\psi}_c$. Dazu ist aber die Kenntnis der entsprechenden Funktionen in einer Umgebung der Stelle (3.3.3) notwendig, das heißt aber auch insbesondere, daß man die p = 0-Einschübe nicht weglassen darf! Popov entgeht aufgrund dessen die Relevanz des Selbstenergieanteils $\Sigma^{1,0}$ und auch die Bedeutung der Schwinger-Dyson-Gleichungen.

3 Die Hugenholtz-Pines-Relation

4 Die Dyson-Beliaev-Gleichungen

Wir hatten bereits im Abschnitt 2.4.1 eingesehen, daß die irreduziblen Selbstenergieanteile $\Sigma^{m,n}$ die Eigenschaften der Greenschen Funktionen $G^{m,n}$ vollständig bestimmen, da sich alle Feynmangraphen aus irreduziblen Anteilen zusammensetzen lassen. Allerdings stellt sich damit natürlich die Frage, wie man denn nun genau aus der Kenntnis der Selbstenergien Σ die zugehörigen Greenschen Funktionen *G* berechnet. Tatsächlich sind solche Beziehungen zwischen *G* und Σ zum Beispiel aus der Quantenelektrodynamik und der ϕ^4 -Theorie als Dyson-Gleichungen bekannt. Ihr entsprechendes Analogon für den von uns betrachteten Fall der bosonischen Kondensation geht zurück auf Beliaev, der die sogenannten Dyson-Beliaev-Gleichungen 1958 veröffentlicht hat [Bel58a]. Mit Hilfe dieser Gleichungen ist es zum Beispiel möglich, aus Näherungen der Selbstenergien Ausdrücke für die so wichtigen Greenschen Funktionen zu erhalten. Bedeutend ist dabei die Tatsache, daß die resultierende Approximation der $G^{m,n}$ eine nicht-störungstheoretische ist.

In diesem Kapitel werden wir eine Herleitung der Dyson-Beliaev-Gleichungen angeben, die nicht auf der sonst üblichen Entwicklung nach Feynmangraphen beruht, sie lösen und den aus den Lösungen ersichtlichen Zusammenhang mit der Hugenholtz-Pines-Relation darlegen. Dazu müssen wir uns nun aber erst einmal genauer mit den sogenannten Vertexfunktionen auseinandersetzen.

4.1 Das erzeugende Funktional der 1-Teilchen-irreduziblen Vertexfunktionen

Bereits im Kapitel 2 hatten wir die Selbstenergieanteile eingeführt und benutzt. Dabei beruhte deren Definition auf der topologischen Eigenschaft der 1-Teilchen-Irreduzibilität. Eine solche topologische Definition besitzt zwar den großen Vorteil der Anschaulichkeit, allerdings ist sie für algebraische Rechnungen ziemlich ungeeignet. Im Falle der auch zunächst topologisch definierten zusammenhängenden Greenschen Funktionen war es uns möglich, eine gleichwertige algebraische Definition durch das erzeugende Funktional $W[\overline{J}, J]$ anzugeben. Ist ein solcher Zugang nun auch für die Selbstenergien durchführbar?

Wie von Jona-Lasinio 1964 gezeigt wurde, ist dies in der Tat der Fall. Man kann ein erzeugendes Funktional von sogenannten Vertexfunktionen definieren, welche letztlich

die Selbstenergien darstellen. Dieses erzeugende Funktional erhält man durch Legendre-Transformation des Funktionals $W[\overline{J}, J]$. Um im folgenden diese Transformation durchzuführen, definieren wir als erstes die Abbildungen

$$\Phi[\cdot, \cdot] : \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4}, \mathbb{C}) \times \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4}, \mathbb{C}) \to \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4}, \mathbb{C}) (\overline{J}(p), J(p)) \mapsto \Phi[\overline{J}, J](p) = \frac{\delta}{\delta \overline{J}} W[\overline{J}, J]$$

$$(4.1.1a)$$

$$\overline{\Phi}[\cdot,\cdot]: \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4},\mathbb{C}) \times \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4},\mathbb{C}) \to \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4},\mathbb{C}) (\overline{J}(p),J(p)) \mapsto \overline{\Phi}[\overline{J},J](p) = \frac{\delta}{\delta J}W[\overline{J},J],$$
(4.1.1b)

welche die Funktionen $\overline{J}(p), J(p)$ in die Funktionen $\overline{\Phi}(p), \Phi(p)$ überführen. Wir nehmen an, daß diese Abbildungen umkehrbar sind, das heißt, es existieren zwei Abbildungen

$$J[\cdot, \cdot]: \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4}, \mathbb{C}) \times \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4}, \mathbb{C}) \to \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4}, \mathbb{C}) (\overline{\Phi}(p), \Phi(p)) \mapsto J[\overline{\Phi}, \Phi](p)$$
(4.1.2a)

$$\overline{J}[\cdot,\cdot]: \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4},\mathbb{C}) \times \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4},\mathbb{C}) \to \mathscr{C}^{\infty}(\mathbb{R}^{4},\mathbb{C}) (\overline{\Phi}(p),\Phi(p)) \mapsto \overline{J}[\overline{\Phi},\Phi](p),$$
(4.1.2b)

so daß für alle $\Phi, \overline{\Phi}, J$ und \overline{J} gilt $\Phi[\overline{J}[\overline{\Phi}, \Phi], J[\overline{\Phi}, \Phi]] = \Phi$ usw. Für die Gültigkeit dieser Annahme ist es unter anderem notwendig [IZ80], daß die Gleichungen

$$\frac{\delta}{\delta J} W[\overline{J}, J]|_{\overline{J}=0=J} = 0 \text{ und}$$
(4.1.3a)

$$\frac{\delta}{\delta J}W[\overline{J},J]|_{\overline{J}=0=J} = 0 \tag{4.1.3b}$$

gültig sind - diese Bedingungen sind aber gerade durch unsere Wahl von ψ_c (3.3.3) erfüllt.

Nachdem wir nun die Abbildungen (4.1.1) und (4.1.2) eingeführt haben, können wir das erzeugende Funktional der Vertexfunktionen durch

$$\Gamma[\overline{\Phi}, \Phi] = \left[-W[\overline{J}, J] + \sum_{p} \left(\overline{J}(p)\Phi(p) + \overline{\Phi}(p)J(p)\right)\right]_{\substack{J=J[\overline{\Phi}, \Phi]\\\overline{J}=\overline{J}[\overline{\Phi}, \Phi]}}$$
(4.1.4)

definieren¹, d.h. durch die Legendre-Transformation des Funktionals $W[\overline{J}, J]$. Daraus folgt unter Benutzung der Kettenregel

$$\frac{\delta\Gamma[\overline{\Phi},\Phi]}{\delta\Phi(p)} = \sum_{q} -\left(\frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta\overline{J}(q)} \frac{\delta\overline{J}[\overline{\Phi},\Phi](q)}{\delta\phi(p)} + \frac{\delta W[\overline{J},J]}{\delta J(q)} \frac{\delta J[\overline{\Phi},\Phi](q)}{\delta\phi(p)}\right) \\
+ \sum_{q} \left(\frac{\delta\overline{J}[\overline{\Phi},\Phi](q)}{\delta\Phi(p)} \Phi(q) + \frac{\delta J[\overline{\Phi},\Phi](q)}{\delta\Phi(p)} \overline{\Phi}(q) + \overline{J}[\overline{\Phi},\Phi](q)\delta_{p,q}\right) \\
\overset{(4.1.1)}{=} \overline{J}[\overline{\Phi},\Phi](p),$$
(4.1.5)

¹Vergleiche hierzu [Toy83]

was bedeutet, daß die angegebene Umkehrabbildung $\overline{J}[\overline{\Phi}, \Phi]$ einfach gegeben ist durch

$$\overline{J}[\overline{\Phi}, \Phi] = \frac{\delta\Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]}{\delta\Phi}.$$
(4.1.6a)

Entsprechend gilt

$$J[\overline{\Phi}, \Phi] = \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]}{\delta \overline{\Phi}}.$$
(4.1.6b)

Die Vertexfunktionen berechnen sich nun gemäß

$$\Gamma^{m,n}(p_1'\dots p_m'; p_1\dots p_n) = \frac{\delta^m}{\delta\overline{\Phi}(p_1')\dots\delta\overline{\Phi}(p_m')} \frac{\delta^n}{\delta\Phi(p_1)\dots\delta\Phi(p_n)} \Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]|_{\substack{\Phi[\overline{J}=0, J=0]\\\overline{\Phi}[\overline{J}=0, J=0]}}$$
(4.1.7)

aus dem erzeugenden Funktional $\Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]$, wobei die Auswertung aufgrund von $\overline{\Phi}[\overline{J} = 0, J = 0] = 0 = \Phi[\overline{J} = 0, J = 0]$ an der Stelle $\overline{\Phi} = 0 = \Phi$ erfolgt. Wie bereits erwähnt, stehen nun diese durch (4.1.7) definierten Vertexfunktionen mit den Selbstenergieanteilen in engem Zusammenhang, so daß uns nun auch von letzteren eine algebraische Bestimmung möglich ist. Es gilt [IZ80]

$$\Sigma^{m,n} = -\Gamma^{m,n} - \Delta^{-1} \delta_{m,1} \delta_{n,1}.$$
(4.1.8)

4.2 Herleitung der DB-Gleichungen ...

Mit Hilfe der algebraischen Bestimmungsgleichung der Selbstenergien (4.1.8) ist es nun möglich, Beziehungen zwischen diesen und den Greenschen Funktionen zu berechnen nämlich die von Beliaev gefundenen. Dazu betrachten wir die Ausdrücke

$$\frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]}{\delta \Phi(q)} |_{\overline{J}=0=J} \quad \text{und} \quad \frac{\delta}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]}{\delta \overline{\Phi}(q)} |_{\overline{J}=0=J}, \quad (4.2.1)$$

die wir zum einen direkt mit Hilfe von (4.1.6) und zum anderen unter Benutzung der Kettenregel ausrechnen können. Als Resultate erhalten wir die Gleichungen

$$\delta_{p,q} = \sum_{q'} \left(\frac{\delta \Phi[\overline{J},J](q')}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi},\Phi]}{\delta \Phi(q')\Phi(q)} + \frac{\delta \overline{\Phi}[\overline{J},J](q')}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi},\Phi]}{\delta \overline{\Phi}(q')\Phi(q)} \right) |_{\overline{J}=0=J}$$
(4.2.2a)

$$0 = \sum_{q'} \left(\frac{\delta \Phi[\overline{J}, J](q')}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]}{\delta \Phi(q') \overline{\Phi}(q)} + \frac{\delta \overline{\Phi}[\overline{J}, J](q')}{\delta \overline{J}(p)} \frac{\delta \Gamma[\overline{\Phi}, \Phi]}{\delta \overline{\Phi}(q') \overline{\Phi}(q)} \right) |_{\overline{J}=0=J},$$
(4.2.2b)

die wir unter Benutzung von (4.1.7, 4.1.1, 2.4.20) in die übersichtliche Form

$$\delta_{p,q} = \sum_{q'} \left(G_c^{2,0}(q',p;) \Gamma^{0,2}(;q',q) + G_c^{1,1}(p;q') \Gamma^{1,1}(q';q) \right)$$
(4.2.3a)

$$0 = \sum_{q'} \left(G_c^{2,0}(q',p;) \Gamma^{1,1}(q;q') + G_c^{1,1}(p;q') \Gamma^{2,0}(q,q';) \right)$$
(4.2.3b)

41

bringen können. Aufgrund der translatorischen Invarianz des homogenen Systems und der damit verbundenen Impulserhaltung lassen sich die auftretenden Größen durch

$$G_c^{1,1}(p;q') = \delta_{q',p} G_c^{1,1}(q')$$
(4.2.4a)

$$\Gamma^{1,1}(q';q) = \delta_{q',q} \Gamma^{1,1}(q)$$
(4.2.4b)

$$G_c^{2,0}(q',p;) = \delta_{q'+p,0} G_c^{2,0}(p)$$
(4.2.4c)

$$\Gamma^{2,0}(q,q';) = \delta_{q+q',0} \Gamma^{2,0}(q')$$
(4.2.4d)

$$\Gamma^{0,2}(;q',q) = \delta_{0,q'+q} \Gamma^{0,2}(q) \tag{4.2.4e}$$

geeignet schreiben. Damit ergeben sich die Gleichungen

$$1 = G_c^{2,0}(p)\Gamma^{0,2}(p) + G_c^{1,1}(p)\Gamma^{1,1}(p)$$
(4.2.5a)

$$0 = G_c^{2,0}(p)\Gamma^{1,1}(-p) + G_c^{1,1}(p)\Gamma^{2,0}(p), \qquad (4.2.5b)$$

die durch Übergang von den Vertexfunktionen zu den Selbstenergieanteilen gemäß (4.1.8) und nach Multiplikation mit $\Delta(p)$ bzw. $\Delta(-p)$ die Form

$$G_c^{1,1}(p) = \Delta(p) + \Delta(p)\Sigma^{0,2}(p)G_c^{2,0}(p) + \Delta(p)\Sigma^{1,1}(p)G_c^{1,1}(p)$$
(4.2.6a)

$$G_c^{2,0}(p) = \Delta(-p)\Sigma^{1,1}(-p)G_c^{2,0}(p) + \Delta(-p)\Sigma^{2,0}(p)G_c^{1,1}(p),$$
(4.2.6b)

annehmen. Da die in diesen Gleichungen, den Dyson-Beliaev-Gleichungen, auftretenden zusammenhängenden Greenschen Funktionen $G_c^{1,1}, G_c^{2,0}$ aufgrund unserer Wahl von ψ_c mit den Greenschen Funktionen $G^{1,1}, G^{2,0}$ übereinstimmen², gelten die Dyson-Beliaev-Gleichungen auch für diese normalen Greenschen Funktionen. Ihre graphische Darstellung ist gegeben durch

und wir erkennen daran sehr deutlich, daß wir es hier mit zwei impliziten Bestimmungsgleichungen für die Greenschen Funktionen zu tun haben.

Bevor wir uns nun der Berechnung der expliziten Lösungen zuwenden, ist zu bemerken, daß durch (4.2.7) ersichtlich ist, warum eine Approximation der Funktionen $G^{1,1}, G^{2,0}$ durch die Dyson-Beliav-Gleichungen ausgehend von einer Näherung der Selbstenergien eine nicht-störungstheoretische ist. Nähert man zum Beispiel die Selbstenergien durch ihre einfachsten Graphen

$$\Sigma^{1,1} \approx \longrightarrow$$
 (4.2.8a)

$$\Sigma^{2,0} \approx \quad \longleftrightarrow \quad , \tag{4.2.8b}$$

 $^{{}^{2}}G_{c}^{1,1} \stackrel{(2.4,21)}{=} G^{1,1} - G^{1,0}G^{0,1} \stackrel{(3.3.5)}{=} G^{1,1}$ $G_{c}^{2,0} \stackrel{(2.4,21)}{=} G^{2,0} - G^{1,0}G^{1,0} \stackrel{(3.3.5)}{=} G^{2,0}$

was der Näherung in der nullten Loopordnung entspricht, so erhält man durch iterative Lösung des Dyson-Beliaev-Gleichungssystems das Resultat

$$G^{1,1} \approx - + - + - + - + - + - + - + \dots$$
 (4.2.9a)

$$G^{2,0} \approx \longrightarrow + \longrightarrow + \longrightarrow + \dots$$
 (4.2.9b)

Das bedeutet, die Greenschen Funktionen werden komplett in nullter Loopordnung approximiert. Insbesondere ist diese Approximation nicht durch einfache Störungsrechnung bzw. durch Entwicklung in den Vertizes reproduzierbar. Dies ist eine überaus nützliche Eigenschaft der Gleichungen (4.2.7) und wird uns bei den Berechnungen zum verdünnen Bosegas sehr hilfreich sein.

Doch nun wollen wir die explizite Form zu Berechnung von $G^{1,1}$ und $G^{2,0}$ aus (4.2.6) herleiten. Dazu schreiben wir diese Gleichungen in kompakter Matrixschreibweise³ der Gestalt

$$\begin{pmatrix} G^{1,1}(p) \\ G^{2,0}(p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta(p)\Sigma^{1,1}(p) & \Delta(p)\Sigma^{0,2}(p) \\ \Delta(-p)\Sigma^{2,0}(p) & \Delta(-p)\Sigma^{1,1}(-p) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{1,1}(p) \\ G^{2,0}(p) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta(p) \\ 0 \end{pmatrix},$$
(4.2.10)

woraus sich die Lösung zu

$$\begin{pmatrix} G^{1,1}(p) \\ G^{2,0}(p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta(p)\Sigma^{1,1}(p) - 1 & \Delta(p)\Sigma^{0,2}(p) \\ \Delta(-p)\Sigma^{2,0}(p) & \Delta(-p)\Sigma^{1,1}(-p) - 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -\Delta(p) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.11)$$

und mit $D(p) = (\Sigma^{1,1}(p) - \Delta(p)^{-1}) (\Sigma^{1,1}(-p) - \Delta(-p)^{-1}) - \Sigma^{2,0}(p) \Sigma^{0,2}(p)$ zu

$$\begin{pmatrix} G^{1,1}(p) \\ G^{2,0}(p) \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta(p)\Delta(-p)D(p)} \begin{pmatrix} \Delta(-p)\Sigma^{1,1}(-p) - 1 & -\Delta(p)\Sigma^{0,2}(p) \\ -\Delta(-p)\Sigma^{2,0}(p) & \Delta(p)\Sigma^{1,1}(p) - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\Delta(p) \\ 0 \end{pmatrix}$$
(4.2.12)

ergibt. Daraus kann man leicht die einzelnen expliziten Formen der Greenschen Funktionen

$$G^{1,1}(p) = \frac{\Delta(-p)^{-1} - \Sigma^{1,1}(-p)}{D(p)}$$
(4.2.13a)

$$G^{2,0}(p) = \frac{\Sigma^{2,0}(p)}{D(p)}$$
(4.2.13b)

ablesen. Damit sind wir nun in der Lage die Greenschen Funktionen und damit viele Eigenschaften des Systems in einfacher Weise aus einer Näherung der Selbstenergieanteile zu gewinnen.

³Diese ist zu unterscheiden von der Matrixdarstellung der Greenschen Funktionen [FW03].

4.3 ... und ihr Zusammenhang mit der HP-Relation

In Kapitel 3 hatten wir darauf hingewiesen, daß die Hugenholtz-Pines-Relation ein Energiespektrum vorhersagt, daß "gapless" ist, daß also die Energie möglicher Anregungen bei verschwindendem Impuls selbst verschwindet. Dies können wir nun mit Hilfe von (4.2.13) leicht einsehen, indem wir ausnutzen, daß die Polstellen von $G^{1,1}(p)$ bezüglich p^0 nach analytischer Fortsetzung das Energiespektrum $E(\mathbf{p})$ der möglichen Anregungen des Systems, Quasipartikel genannt, wiedergeben. Dazu betrachten wir die Nullstellen des Nenners von $G^{1,1}(p)$

$$0 = \left(\Sigma^{1,1}(p) + i\mathsf{p}^0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu\right) \left(\Sigma^{1,1}(-p) - i\mathsf{p}^0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu\right) - \Sigma^{2,0}(p)\Sigma^{0,2}(p)$$
(4.3.1)

und führen die Substitution $ip^0 \rightarrow E(\mathbf{p})$ durch, mit der für das Energiespektrum der Quasipartikel

$$E(\mathbf{p})^{2} = \left(\Sigma^{1,1}(p) - \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} + \mu\right) \left(\Sigma^{1,1}(-p) - \frac{\mathbf{p}^{2}}{2m} + \mu\right) - \Sigma^{2,0}(p)\Sigma^{0,2}(p)$$
(4.3.2)

folgt. Unter expliziter Benutzung der Hugenholtz-Pines-Relation (3.0.1) ergibt sich damit speziell für den Fall $\mathbf{p} = 0$ das Resultat

$$E(0) = \sqrt{\left(\Sigma^{1,1}(0) + \mu\right)^2 - \Sigma^{2,0}(0)\Sigma^{0,2}(0)} = \sqrt{\left(\Sigma^{2,0}(0)\right)^2 - \left(\Sigma^{2,0}(0)\right)^2} = 0, \quad (4.3.3)$$

was bedeutet, daß das Anregungsspektrum eines kondensierten bosonischen Systems tatsächlich lückenlos im oben genannten Sinne ist - wie von Hugenholtz und Pines behauptet.

5 Das verdünnte, schwach wechselwirkende Bosegas

Das Problem des nicht idealen Bosegases im Zusammenhang mit der Bose-Einstein-Kondensation wurde zum ersten Mal erfolgreich 1947 von Bogoliubov behandelt, der damit eine mikroskopische Erklärung für das superfluide Verhalten des 4-Helium geben wollte. Die Schwierigkeit, die er zu überwinden hatte, lag vor allem darin, daß eine normale Störungstheorie aufgrund der Existenz eines Kondensats nicht anwendbar war. Bogoliubov konnte diese Schwierigkeit aber beheben, indem er das Kondensat in seinen Berechnungen explizit behandelte. Weiterhin mußte er zum Zwecke der analytischen Durchführbarkeit die Näherung des verdünnten Gases mit schwacher Zweiteilchenwechselwirkung annehmen. Während also in früheren Zeiten das verdünnte, schwach wechselwirkende Bosegas nur als grobe Näherung für das stark wechselwirkende, superfluide Helium verwandt wurde, hat es in den letzten 10 Jahren aufgrund neuerer Experimente [AEM⁺95, DMA⁺95, BSTH95] eine Bedeutung fern jeglicher Approximation erhalten.

Deshalb wollen wir im folgenden ebenfalls dieses spezielle Bosegas behandeln und uns dabei der in den letzten Kapiteln entwickelten Theorie bedienen. Im Gegensatz zu Bogoliubov werden wir uns somit funktionalintegraler Methoden bedienen, und vor allem werden wir uns nicht auf den Fall T = 0 beschränken, sondern Aussagen über die Temperaturabhängigkeit einzelner Größen machen. Uns wird dabei das Temperaturverhalten der Nichtkondensatsdichte beschäftigen, da sich Popovs Berechnungen in diesem Fall sehr von den in der Literatur üblichen Angaben unterscheiden, und insbesondere werden wir mit Hilfe der Hugenholtz-Pines-Relation die thermische Abhängigkeit der Kondensatsdichte, die sogenannte "thermal depletion", in erster Loopnäherung berechnen. Dabei beschränken wir uns natürlich auf den interessanten Fall, bei dem sich die Temperatur innerhalb des kritischen Bereiches für die Bose-Einstein-Kondensation befindet.

Mit der Betrachtung eines sehr kalten, verdünnten Gases sind einige Eigenschaften verbunden, die uns bei den nachfolgenden Berechnungen von Nutzen sein werden. So ist aufgrund der geringen Dichte *n* die Reichweite r_0 der interatomaren Wechselwirkungen viel kleiner als der durchschnittliche Abstand $d = n^{-1/3}$ der Teilchen untereinander. Das erlaubt es, uns nur auf Paarwechselwirkungen zu beschränken, da die gleichzeitige Interaktion von drei oder mehr Teilchen vernachlässigt werden kann.

Weiterhin wird aufgrund der geringen thermischen Anregung die kinetische Energie so

klein sein, daß die aus der Streutheorie bekannte Ungleichung $kr_0 \ll 1$ erfüllt ist. Dadurch ist es uns bei den auftretenden Streuprozessen möglich, statt mit der impuls- und winkelabhängigen Streuamplitude $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ mit der konstanten Streulänge a_s zu rechnen. Diese Streulänge spielt, wie wir noch sehen werden, als entscheidender Wechselwirkungsparameter eine sehr wichtige Rolle innerhalb der Theorie kondensierter Bosegase.

Zur Berechnung der gewünschten Eigenschaften des Bosegases werden wir uns der Möglichkeiten bedienen, die uns die Greensche Funktion $G^{1,1}(p)$ zur Verfügung stellt. Dazu müssen wir diese aber erst einmal berechnen. Das werden wir in den folgenden Abschnitten angehen, indem wir zuallererst die zugehörigen Selbstenergieanteile $\Sigma^{1,1}(p)$ und $\Sigma^{2,0}(p)$ innerhalb einer passenden Approximation bestimmen werden und diese im Anschluss mit Hilfe des Dyson-Beliaev-Gleichungssystems auswerten werden.

5.1 Die Selbstenergieanteile

Wie wir in früheren Kapiteln bereits gesehen haben, bestehen die Selbstenergieanteile $\Sigma^{1,1}(p)$ und $\Sigma^{2,0}(p)$ jeweils aus einer unendlichen Reihe von zusammenhängenden, 1-Teilchen-irreduziblen Diagrammen. Eine exakte Berechnung würde verlangen, all diese auszurechnen und aufzusummieren - ein sicher hoffnungsloses Unterfangen. Allerdings ist es bei Betrachtung eines verdünnten Gases möglich, in einer gewissen Näherung einen Großteil der Diagramme zu vernachlässigen. Dies beruht auf folgenden zwei Eigenschaften, die den Beitrag von Diagrammen zu den Selbstenergieanteilen verringern:

- 1. Das Auftreten von 2- bzw. 3-Teilchen-Vertizes innerhalb eines Diagramms führt zur Multiplikation mit Faktoren $\psi_c^2 = n_c$ bzw. $\psi_c = n_c^{1/2}$. Diese Faktoren verringern aufgrund der geringen Dichte *n* und $n_c < n$ den Beitrag zur Selbstenergie.
- 2. Das Vorkommen von Schleifen, entlang derer eine feste Pfeilrichtung gegeben ist, verringert den Beitrag zur Selbstenergie. Dies liegt an den Faktoren $(e^{\beta \varepsilon(\mathbf{k})} 1)^{-1}$, die nach Ausführung der Frequenzsummen zurückbleiben, und die den Summationsbereich der Impulse auf den Bereich $k \leq T^{1/2}$ beschränken.

Verwenden wir im Zuge dieser Eigenschaften also nur Diagramme, die entweder maximal eine von den angesprochenen Schleifen enthält oder höchstens ein 2-Teilchen-Vertex bzw. zwei 3-Teilchen-Vertizes besitzen, dann lassen sich die Selbstenergieanteile näherungsweise durch

$$\begin{array}{c} \bullet \textcircled{} \textcircled{} \textcircled{} \end{array} = \bullet & + \frac{1}{2} \bullet & + \frac{1}{4} \bullet &$$

ausdrücken. Man kann anhand der übriggebliebenen Graphen erkennen, daß die von uns gemachte Näherung die sogenannte "ladder approximation" darstellt [FW03, Mat92], eine Näherung innerhalb der Vielteilchentheorie, die unter anderem für verdünnte Gase Anwendung findet. Diese genäherten Ausdrücke bestehen zwar immer noch aus einer unendlichen Reihe von Graphen. Sie haben allerdings den großen Vorteil, daß sie sich durch Benutzung des T-Diagramms

$$T = X + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \dots$$
 (5.1.2)

entscheidend vereinfachen lassen. Denn mit Hilfe des letzteren werden die Gleichungen (5.1.1) zu

$$\underbrace{\epsilon}_{20} \rightarrow = \underbrace{\epsilon}_{1/2} \underbrace{\epsilon}_{T} \rightarrow . \qquad (5.1.3b)$$

Um nun die Selbstenergieanteile tatsächlich auszurechnen, ist es also notwendig, daß wir das T-Diagramm genauer betrachten und letztlich bestimmen.

5.1.1 Die Integralgleichung des T-Diagramms

Zur Berechnung des T-Diagramms ziehen wir Gleichung (5.1.2) heran und nutzen die Eigenschaft, daß die darin enthaltende Summation durch das T-Diagramm selbst ausgedrückt und somit durch

$$T = + \frac{1}{2} \quad (5.1.4)$$

ersetzt werden kann.

Um die Lösung dieser bisher graphischen Gleichung zu bestimmen, definieren wir die T-Matrix durch

$$T(p_1, p_2; p_3, p_4)\delta_{p_1+p_2, p_3+p_4} \equiv \sum_{p_2}^{p_1} \prod_{p_3}^{p_4},$$
(5.1.5)

wobei wir die z.B. aus (5.1.2) ersichtliche Impulserhaltung explizit durch das Kronecker-Delta berücksichtigen. Zusammen mit der zur Abkürzung nützlichen Definition $v(\mathbf{k}) := -\frac{U(\mathbf{k})}{BV}$ erhalten wir die zu (5.1.4) äquivalente Gleichung¹

$$T(p_1, p_2; p_3, p_4) = \{v(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) + v(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4)\} + \frac{1}{2} \sum_{q,q'} \{v(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) + v(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q'})\} T(q, q'; p_3, p_4) \Delta(q) \Delta(q') \delta_{q+q', p_1+p_2}.$$
(5.1.6)

Aus dieser Gleichung wollen wir im Folgenden $T(p_1, p_2; p_3, p_4)$ bestimmen. Dazu nutzen wir die Symmetrie² $T(p_1, p_2; p_3, p_4) = T(p_2, p_1; p_3, p_4)$, womit

$$T(p_{1}, p_{2}; p_{3}, p_{4}) = \{v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{3}) + v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{4})\} + \sum_{q,q'} v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{q})T(q, q'; p_{3}, p_{4})\Delta(q)\Delta(q')\delta_{q+q', p_{1}+p_{2}} = \{v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{3}) + v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{p}_{4})\} + \sum_{q} v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{q})T(q, p_{1} + p_{2} - q; p_{3}, p_{4})\Delta(q)\Delta(p_{1} + p_{2} - q) + \sum_{q} v(\mathbf{p}_{1} - \mathbf{q})T(q, p_{1} + p_{2} - q; p_{3}, p_{4})\Delta(q)\Delta(p_{1} + p_{2} - q)$$
(5.1.7)

folgt.

Da der erste Term der linken Seite noch die Summe zweier Potentiale enthält, bietet sich die Separation

$$T(p_1, p_2; p_3, p_4) = \Gamma(p_1, p_2; p_3, p_4) + \Gamma'(p_1, p_2; p_3, p_4)$$
(5.1.8a)

zusammen mit den Definitionsgleichungen

$$\Gamma(p_1, p_2; p_3, p_4) = \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3) + \sum_q \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q})\Gamma(q, p_1 + p_2 - q; p_3, p_4)\Delta(q)\Delta(p_1 + p_2 - q)$$
(5.1.8b)

$$\Gamma'(p_1, p_2; p_3, p_4) = \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4) + \sum_q \nu(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q})\Gamma'(q, p_1 + p_2 - q; p_3, p_4)\Delta(q)\Delta(p_1 + p_2 - q)$$
(5.1.8c)

¹Vgl. Abschnitt über Feynmanregeln

²Vergleiche wieder mit (5.1.2)

an. Durch Vergleich dieser letzten beiden Gleichungen erkennen wir $\Gamma'(p_1, p_2; p_3, p_4) = \Gamma(p_1, p_2; p_4, p_3)$ und erhalten somit

$$T(p_1, p_2; p_3, p_4) = \Gamma(p_1, p_2; p_3, p_4) + \Gamma(p_1, p_2; p_4, p_3).$$
(5.1.9)

Wir können also im weiteren Verlauf die einfachere Gleichung (5.1.8b) betrachten, um die T-Matrix zu bestimmen.

Dazu nutzen wir die bereits angesprochene Impulserhaltung aus, indem wir eine Variablentransformation von den Einzelimpulsen zum Gesamtimpuls und den Relativimpulsen durchführen. Entsprechend definieren wir

$$P:=p_1+p_2=p_3+p_4, (5.1.10a)$$

$$k := \frac{p_1 - p_2}{2} \tag{5.1.10b}$$

und

$$k' := \frac{p_3 - p_4}{2}.\tag{5.1.10c}$$

Damit transformiert sich (5.1.8b) unter Benutzung von $\Gamma(p_1, p_2; p_3, p_4) \equiv \Gamma(k, k', P)$ zu

$$\Gamma(k,k',P) = v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \sum_{q} v(\frac{\mathbf{P}}{2} + \mathbf{k} - \mathbf{q})\Gamma(q - \frac{P}{2},k',P)\Delta(q)\Delta(P - q)$$

bzw. nach Änderung des Summations
index $q \to q + \frac{P}{2}$ zu

$$\Gamma(k,k',P) = v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \sum_{q} v(\mathbf{k} - \mathbf{q})\Gamma(q,k',P)\Delta(\frac{P}{2} + q)\Delta(\frac{P}{2} - q).$$
(5.1.11)

Für spätere Zwecke drücken wir auch noch das gesuchte T-Diagramm bzw. sein algebraisches Äquivalent in den neuen Variablen aus. Es gilt

$$T(p_1, p_2; p_3, p_4) \equiv T(k, k', P) = \Gamma(k, k', P) + \Gamma(k, -k', P).$$
(5.1.12)

Lösen wir die Gleichung (5.1.11) iterativ, so erhalten wir als Resultat unter anderem die Erkenntnis, daß $\Gamma(\{\mathbf{k}, k^0\}, \{\mathbf{k}', {k'}^0\}, \{\mathbf{P}, \mathbf{P}^0\})$ allein von \mathbf{P}^0 abhängt, nicht aber von k^0 und ${k'}^0$! Aufgrund dessen und der Tatsache, daß in dem Potential auch keine vierte Komponente eingeht, schreiben wir

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', P) = v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \sum_{q} v(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}', P) \Delta(\frac{P}{2} + q) \Delta(\frac{P}{2} - q)$$

= $v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{q}} \left(v(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}', P) \sum_{q^0} \Delta(\frac{P}{2} + q) \Delta(\frac{P}{2} - q) \right).$ (5.1.13)

49

Im letzten Schritt haben wir die vorherige Einsicht dazu benutzt, die Summation aufzuspalten.

Dies ist sehr nützlich, denn wir erkennen nun in der Summe über q^0 eine doppelte Frequenzsumme, die wir gemäß Gleichung (A.2.3) auswerten können. Dazu ersetzen wir $\Delta(q) = (-iq^0 + \frac{q^2}{2m} - \mu)^{-1}$ und erhalten

$$\sum_{q^{0}} \Delta(\frac{P}{2} + q) \Delta(\frac{P}{2} - q) = \sum_{q^{0}} \frac{1}{-iq^{0} - i\frac{P^{0}}{2} + \frac{(\frac{P}{2} + q)^{2}}{2m} - \mu} \cdot \frac{1}{iq^{0} - i\frac{P^{0}}{2} + \frac{(\frac{P}{2} - q)^{2}}{2m} - \mu}$$
$$= \frac{\beta}{\frac{q^{2}}{m} + \frac{P^{2}}{4m} - iP^{0} - 2\mu} \Omega(P, \mathbf{q})$$
(5.1.14)

mit

$$\Omega(P,\mathbf{q}) = \frac{1}{e^{\beta\left(-i\frac{\mathbf{p}0}{2} + \frac{(\frac{\mathbf{p}}{2}+\mathbf{q})^2}{2m} - \mu\right)} - 1} - \frac{1}{e^{\beta\left(i\frac{\mathbf{p}0}{2} - \frac{(\frac{\mathbf{p}}{2}-\mathbf{q})^2}{2m} + \mu\right)} - 1}$$

Wir berücksichtigen nun (5.1.14) in Gleichung (5.1.13) und führen die Ersetzung $\sum_{\mathbf{q}} \ldots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \ldots$ durch, die für große Volumina gültig ist. Daraus resultiert letztlich die Integralgleichung

$$\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{k}',P) = v(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + \frac{V\beta}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{q} \frac{v(\mathbf{k}-\mathbf{q})\Gamma(\mathbf{q},\mathbf{k}',P)}{\frac{\mathbf{q}^2}{m} + \frac{\mathbf{P}^2}{4m} - i\mathbf{P}^0 - 2\mu} \Omega(P,\mathbf{q}), \tag{5.1.15}$$

die wir zur Bestimmung der T-Matrix nutzen werden. Diese Integralgleichung, eine inhomogene Fredholmgleichung zweiter Art, kann nicht allgemein für ein beliebiges Potential gelöst werden. Allerdings ist es möglich, die Lösung durch Terme der Streuamplitude auszudrücken. Und dies wird für unsere Zwecke sehr fruchtbar sein.

5.1.2 Eine approximative Lösung der T-Matrix

Wie bereits angedeutet, wollen wir in diesem Abschnitt der Möglichkeit nachgehen, die gesuchte T-Matrix näherungsweise durch die Streuamplitude darzustellen. Dazu betrachten wir die Integralgleichung der letzteren. Nach (B.0.12) gilt für die Streuamplitude bei der 2-Teilchen-Streuung

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{4\pi} U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{m}{4\pi} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\mathbf{p} \frac{U(\mathbf{k}' - \mathbf{p}) 4\pi f(\mathbf{k}, \mathbf{p})}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{p}^2}.$$
 (5.1.16)

Führen wir die Größe $\tilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') := -\frac{4\pi}{m} f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ ein, können wir diese Gleichung umformen und erhalten

$$U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \tilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{p})\tilde{f}(\mathbf{p}, \mathbf{k}')}{\frac{\mathbf{k}'^2}{m} - \frac{\mathbf{p}^2}{m}}$$
(5.1.17)
= $\mathscr{L}[\tilde{f}](\mathbf{k}, \mathbf{k}'),$

wobei wir im letzten Schritt den linearen Operator ${\mathscr L}$ eingeführt haben, den wir durch

$$\mathscr{L}: \mathscr{F}(\mathbb{R}^{3} \times \mathbb{R}^{3}, \mathbb{R}) \to \mathscr{F}(\mathbb{R}^{3} \times \mathbb{R}^{3}, \mathbb{R})$$
$$h(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \mapsto \mathscr{L}[h](\mathbf{k}, \mathbf{k}') = h(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int \mathrm{d}\mathbf{p} \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{p})h(\mathbf{p}, \mathbf{k}')}{\frac{\mathbf{k}'^{2}}{m} - \frac{\mathbf{p}^{2}}{m}}$$
(5.1.18)

definieren [AGD65, S. 231].

Dieser lineare Operator \mathscr{L} besitzt die Eigenschaft ker $(\mathscr{L}) = \{0 \in \mathscr{F}\}$, denn die Gleichung $\mathscr{L}[h](\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 0$ wird nur von $h = 0 \in \mathscr{F}$ für alle \mathbf{k}, \mathbf{k}' gelöst. Damit ist \mathscr{L} injektiv und auf dessen Bildmenge existiert ein linearer inverser Operator \mathscr{L}^{-1} .

Den Zusammenhang zwischen der T-Matrix und der Streuamplitude können wir nun deutlich machen, indem wir (5.1.15) heranziehen und dabei $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', P)$ bei festem *P* betrachten

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', P) = -\frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\beta V} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{q})\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}', P)}{\frac{\mathbf{q}^2}{2m} + \frac{\mathbf{P}^2}{8m} - i\mathbf{P}^0 - 2\mu} \Omega(P, \mathbf{q}).$$
(5.1.19)

Denn wenden wir nun den Operator \mathscr{L} auf $\Gamma(\cdot, \cdot, P)$ an, erhalten wir

$$\mathscr{L}[\Gamma](\mathbf{k},\mathbf{k}',P) = \Gamma(\mathbf{k},\mathbf{k}',P) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \frac{U(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{k}',P)}{\frac{\mathbf{k}'^2}{m} - \frac{\mathbf{p}^2}{m}}.$$
 (5.1.20)

Zusammen mit (5.1.19) folgt daraus

$$\mathscr{L}[\Gamma](\mathbf{k},\mathbf{k}',P) = -\frac{U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{\beta V} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \ U(\mathbf{k}-\mathbf{p})\Gamma(\mathbf{p},\mathbf{k}',P) \\ \times \left(\frac{1}{\frac{\mathbf{k}'^2}{m} - \frac{\mathbf{p}^2}{m}} + \frac{\Omega(P,\mathbf{q})}{\frac{\mathbf{q}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^2}{8m} - i\mathbf{P}^0 - 2\mu}\right).$$
(5.1.21)

Schließlich wenden wir auf die letzte Gleichung \mathscr{L}^{-1} an, und unter Berücksichtigung von (5.1.17) erhalten wir die Beziehung

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', P) = -\frac{\tilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\beta V} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \ \tilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{k}', P) \left(\frac{1}{\frac{\mathbf{k}'^2}{m} - \frac{\mathbf{p}^2}{m}} + \frac{\Omega(P, \mathbf{q})}{\frac{\mathbf{q}^2}{2m} + \frac{\mathbf{P}^2}{8m} - i\mathbf{P}^0 - 2\mu}\right),$$

die bei schwacher Wechselwirkung die Approximation $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', P) = \frac{4\pi f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{m\beta V}$ aufzeigt.

Da wir uns bei unseren Rechnungen zusätzlich im Bereich geringer kinetischer Energie befinden, können wir die verwendete Streuamplitude durch die konstante Streulänge ersetzen. Damit ergibt sich die Näherung

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', P) \approx -\frac{4\pi a_s}{m\beta V} =: -\frac{\Gamma}{\beta V},$$
(5.1.23)

und es gilt für unser gesuchtes T-Diagramm aufgrund von (5.1.12) die Approximation

$$\sum_{p_2} \prod_{p_3} \sum_{p_3} \sum_{p_4} \sum_{p_3} \sum_{p_4} \sum_{p$$

Es ist wichtig zu bemerken, daß die Streulänge a_s und damit auch die soeben eingeführte Größe Γ aufgrund der repulsiven Wechselwirkung der Bosonen positiv sind. Diese repulsive Wechselwirkung kann im allgemeinen nur bei der Betrachtung der Kondensation eines nicht eingeschlossenen Bosegases angenommen werden [EGZL96, Sto94, RHB95, BSTH95].

5.1.3 Die eigentliche Näherung der Selbstenergieanteile

Da uns im letzten Abschnitt eine näherungsweise Bestimmung des T-Diagramms gelungen ist, können wir nun die Berechnung der Selbstenergieanteile weiterführen. Dazu benutzen wir die Gleichungen (5.1.3) zusammen mit dem letzten Ergebnis (5.1.24) und erhalten

$$\begin{split} \Sigma^{1,1}(p) &= & \longrightarrow + \frac{1}{2} \longrightarrow + \frac{1}{4} \longrightarrow + \frac{1}{4$$

Diese Ausdrücke sind für eine weitere analytische Betrachtung weitestgehend ungeeignet, doch besteht die Möglichkeit, sie weiter zu vereinfachen. Denn die vorliegende schwache Wechselwirkung erlaubt die Benutzung der Bornschen Näherung, in der die Beziehung

$$U(\mathbf{p}) \approx \frac{4\pi a_s}{m} = \Gamma \tag{5.1.25}$$

zwischen Potential und Streulänge existiert³. Mit Hilfe dieser Gleichung und der Bedingung, daß sowohl die thermische als auch die Wechselwirkungsenergie klein sind, ergeben

³Vgl. (5.1.17)

sich die Selbstenergieanteile zu

$$\Sigma^{1,1}(p) \approx -2n_c \Gamma - \frac{2\Gamma}{\beta V} \sum_q \Delta(q)$$
(5.1.26a)

$$\Sigma^{2,0}(p) \approx -n_c \Gamma. \tag{5.1.26b}$$

Die in diesen Gleichungen noch angeführte *p*-Abhängigkeit tritt dabei gar nicht mehr auf, weshalb wir sie im folgenden auch nicht mehr angeben werden.

Der Ausdruck $\frac{1}{\beta V} \sum_{q} \Delta(q)$ stellt nach (2.3.14) die erste Näherung der Dichte des nicht kondensierten Anteils vom Bosegas dar. Somit schreiben wir die Gleichungen (5.1.26) letztendlich in der Form

$$\Sigma^{1,1} \approx -2n\Gamma \tag{5.1.27a}$$

$$\Sigma^{2,0} \approx -n_c \Gamma. \tag{5.1.27b}$$

Diese Näherungen der Selbstenergieanteile werden wir im folgenden für die Berechnung der Greenschen Funktionen verwenden. Doch zuvor gehen wir nochmal kurz auf (5.1.27) als Approximation ein. Denn es ist sehr interessant einzusehen, wie sich die gemachten Näherungen, insbesondere die Bornsche Näherung, auf die ursprünglich betrachteten Selbstenergien auswirken.

Betrachtet man nämlich letztere und untersucht, welche Graphen bei den jeweiligen Näherungen wegfallen, dann kann man erkennen, daß in (5.1.27) letztlich nur drei Diagramme Verwendung finden. Es gilt

$$\Sigma^{1,1} \approx \longrightarrow + \longrightarrow (5.1.27a')$$

$$\Sigma^{2,0} \approx \quad \longleftrightarrow \quad (5.1.27b')$$

Dies entspricht im Endeffekt der ersten Ordnung in der Entwicklung nach Vertizes bzw. in der Entwicklung nach der Kopplungskonstanten. Wie bereits im Abschnitt 4.2 erläutert, sind die daraus resultierenden Ergebnisse für die Greenschen Funktionen dennoch von nicht störungstheoretischer Art!

5.2 Die Greensche Funktion $G^{1,1}$

Die Kenntnis der Selbstenergien $\Sigma^{1,1}$ und $\Sigma^{2,0}$ erlaubt uns die Berechnung der vollen Greenschen Funktion $G^{1,1}(p)$, aus der sich dann wichtige physikalische Informationen, wie z.B. Energiespektrum und Teilchendichte gewinnen lassen. Die Berechnung können wir mit Hilfe der Dyson-Beliaev-Gleichungen (4.2.13) auf sehr einfache Weise durchführen. Nutzen wir von letzteren die Gleichung

$$G^{1,1}(p) = \frac{\Delta(-p)^{-1} - \Sigma^{1,1}}{D(p)} \text{ mit}$$

$$D(p) = \left(\Delta(-p)^{-1} - \Sigma^{1,1}\right) \left(\Delta(p)^{-1} - \Sigma^{1,1}\right) - \Sigma^{2,0} \overline{\Sigma^{2,0}},$$
(5.2.1)

so scheint auf den ersten Blick eine Notwendigkeit für die Benutzung beider von uns berechneter Selbstenergieanteile zu bestehen. Doch tatsächlich ist dem nicht so. Denn mit Hilfe der Hugenholtz-Pines-Relation $\mu + \Sigma^{1,1}(0) = \Sigma^{2,0}(0)$ erkennen wir, unter der expliziten Benutzung der freien Greenschen Funktion $\Delta(p) = (-i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu)^{-1}$, daß $G^{1,1}(p)$ nur noch von $\Sigma^{2,0}$ abhängt

$$G^{1,1}(p) = \frac{i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma^{2,0}}{D(p)} \text{ mit}$$

$$D(p) = \left(i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma^{2,0}\right) \left(-i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma^{2,0}\right) - \Sigma^{2,0} \overline{\Sigma^{2,0}}.$$
(5.2.2)

Dieses etwas merkwürdige Resultat erklärt sich aber sehr einfach durch die impulsunabhängige Näherung der Selbstenergien, so daß in diesem Fall die nur für p = 0 gültige Hugenholtz-Pines-Relation Anwendung findet.

Für die weitere Berechnung der gesuchten Greenschen Funktion benutzen wir nun (5.1.27b). Damit ergibt sich

$$D(p) = \left(i\mathbf{p}^{0} + \varepsilon(\mathbf{p}) + n_{c}\Gamma\right)\left(-i\mathbf{p}^{0} + \varepsilon(\mathbf{p}) + n_{c}\Gamma\right) - n_{c}^{2}\Gamma^{2}$$

= $(\mathbf{p}^{0})^{2} + E(\mathbf{p})^{2}$ mit $E(\mathbf{p}) := \sqrt{\varepsilon(\mathbf{p})^{2} + 2n_{c}\varepsilon(\mathbf{p})\Gamma}$ (5.2.3)

und folglich

$$G^{1,1}(p) = \frac{i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) + n_c \Gamma}{(\mathbf{p}^0)^2 + E(\mathbf{p})^2}.$$
(5.2.4)

Diese Form der Greenschen Funktion erlaubt nach analytischer Fortsetzung zu reellen Frequenzen [FW03] die Bestimmung des Energiespektrums der Quasiteilchen durch Betrachtung der Polstellen. Wir erhalten das bekannte Bogoliubovspektrum

$$E(\mathbf{p}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{p})^2 + 2n_c \varepsilon(\mathbf{p})\Gamma},$$
(5.2.5)

das für kleine Impulse annähernd linear verläuft und damit Eigenschaften wie das superfluide Verhalten des Bosegases (siehe aber dazu [Leg99]) oder die T^3 -Abhängigkeit der Wärmekapazität erklärt.

Für spätere Rechnungen ist es von Nutzen, die erwähnten Pole der Gleichung (5.2.4) aufzuspalten. Als Ergebnis erhalten wir

$$G^{1,1}(p) = \frac{u(\mathbf{p})^2}{-ip^0 + E(\mathbf{p})} + \frac{v(\mathbf{p})^2}{ip^0 + E(\mathbf{p})},$$
(5.2.6)

wobei die Größen

$$u(\mathbf{p})^2 = \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) + n_c \Gamma}{2E(\mathbf{p})} + \frac{1}{2}$$
(5.2.7a)

$$v(\mathbf{p})^2 = \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) + n_c \Gamma}{2E(\mathbf{p})} - \frac{1}{2}$$
(5.2.7b)

schon aus der von Bogoliubov verwendeten kanonischen Transformation bekannt sind [PN99].

5.3 Die Temperaturabhängigkeit des Nichtkondensats

Wir werden im folgenden untersuchen, wie die Dichte des nicht kondensierten Anteils des Bosegases von der Temperatur abhängt. Dies ist aus folgendem Grund interessant. In der Literatur wird für die entsprechende Temperaturabhängigkeit beim nicht idealen Bosegas meist eine Proportionalität zu T^2 angegeben [Fet98, FW03, PS03], die für tiefe Temperaturen gültig sein soll. Dagegen zeigt Popov eine lineare Abweichung bezüglich der Temperaturabhängigkeit des idealen Bosegases auf [Pop83, Pop87, PY88]. Wie ist dies zu vereinbaren?

Um diese Frage zu beantworten und die gewünschte Temperaturabhängigkeit der Nichtkondensatsdichte zu erhalten, berechnen wir letztere gemäß (2.3.14) durch

$$n'(T) = \lim_{\eta \to +0} \frac{1}{\beta V} \sum_{q} e^{iq^0 \eta} G^{1,1}(q).$$
(5.3.1)

Unter Verwendung der Greenschen Funktion (5.2.6) und Auswertung der auftretenden Frequenzsumme mit Hilfe von (A.1.4) erhalten wir

$$n'(T) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{u(\mathbf{q})^2}{e^{\beta E(\mathbf{q})} - 1} - \frac{v(\mathbf{q})^2}{e^{-\beta E(\mathbf{q})} - 1} \right).$$
(5.3.2)

Dieser Ausdruck läßt einen Vergleich mit den Berechnungen des verdünnten, schwach wechselwirkenden Bosegases bei T = 0 zu, welche schon mehrfach durchgeführt wurden

[Bog47, Bel58b, HP59]. Dabei ist entsprechend den Erwartungen eine Übereinstimmung mit

$$n'(0) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q})^2$$
(5.3.3)

gegeben. Durch den Übergang von der Summe zum Integral gemäß $\sum_{\mathbf{q}} \ldots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \ldots$ und nach Einführung von Kugelkoordinaten und entsprechender Ausführung der Winkelintegration verbleibt

$$n'(0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \, v(\mathbf{q})^2$$

= $\frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{q} \, q^2 \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{q}) + n_c \Gamma}{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{q})^2 + 2n_c \varepsilon(\mathbf{q})\Gamma}} - 1 \right)$
= $\frac{(2mn_c \Gamma)^{3/2}}{4\pi^2} \int d\mathbf{x} \, \mathbf{x}^2 \left(\frac{x^2 + 1}{\sqrt{x^4 + 2x^2}} - 1 \right)$
= $\frac{(mn_c \Gamma)^{3/2}}{3\pi^2}.$ (5.3.4)

Dieser Wert von n'(0) gibt die sogenannte "quantum depletion" an. Damit wird die Erhöhung der Nichtkondensatsdichte bezeichnet, die aufgrund der Teilchenwechselwirkungen zustande kommt. Da dieser Effekt allerdings nicht in die Betrachtungen zur Temperaturabhängigkeit gehört, wird für uns im folgenden die Bestimmung der Differenz

$$n'(T) - n'(0) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{u(\mathbf{q})^2}{e^{\beta E(\mathbf{q})} - 1} - \frac{v(\mathbf{q})^2}{e^{-\beta E(\mathbf{q})} - 1} - v(\mathbf{q})^2 \right)$$

= $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{u(\mathbf{q})^2 + v(\mathbf{q})^2}{e^{\beta E(\mathbf{q})} - 1}$ (5.3.5)

von Nutzen sein.

Um diese Bestimmung durchzuführen, verwenden wir die Gleichungen (5.2.7) und gehen wieder von der Summe zum Integral über. Nach kurzer Berechnung folgt

$$n'(T) - n'(0) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int dq \, q^2 \frac{\varepsilon(q) + n_c \Gamma}{\sqrt{\varepsilon(q)^2 + 2n_c \varepsilon(q)\Gamma}} \left(e^{\beta \sqrt{\varepsilon(q)^2 + 2n_c \varepsilon(q)\Gamma}} - 1 \right)^{-1}$$

$$\stackrel{\Gamma \neq 0}{=} \frac{(2mn_c \Gamma)^{3/2}}{2\pi^2} \mathscr{I}_1(\beta n_c \Gamma)$$
(5.3.6)

unter Benutzung der Funktion

$$\mathscr{I}_{\tau}(a) := \int \mathrm{d} x \, x^2 \frac{x^2 + \tau}{\sqrt{x^4 + 2x^2}} \Big(e^{a\sqrt{x^4 + 2x^2}} - 1 \Big)^{-1}. \tag{5.3.7}$$

Tatsächlich ist in Gleichung (5.3.6) zu berücksichtigen, daß $n_c = n_c(T)$ gilt. Für das verdünnte, schwach wechselwirkende Bosegas gilt aber angenähert $n_c(T) \approx n_c(0)^4$. Unabhängig davon ist die Temperaturabhängigkeit des auftretenden Integrals in jedem Fall nur durch den dimensionslosen Parameter $\beta n_c \Gamma$ bestimmt.

Um einen einfachen Näherungsausdruck für (5.3.6) zu erhalten, werden wir uns nun den Fällen zuwenden, in denen dieser Parameter zum einen als groß zum anderen als klein angenommen wird.

Näherung für $\beta n_c \Gamma$ groß Trotz Betrachtung eines verdünnten Gases mit schwacher Wechselwirkung gilt für entsprechend geringe Temperaturen die Abschätzung $\beta n_c \Gamma \gg 1$. Dies erlaubt uns, die verwendete Funktion (5.3.7) zu vereinfachen. Denn für große Argumente wird der effektive Integrationsbereich des Integrals durch den Faktor $\left(e^{a\sqrt{x^4+2x^2}}-\right)$

1)⁻¹ auf einen Bereich [0,c] mit $c \ll 1$ eingeschränkt, und in diesem gilt für den Integranden

$$x^{2} \frac{x^{2} + 1}{\sqrt{x^{4} + 2x^{2}}} \left(e^{a\sqrt{x^{4} + 2x^{2}}} - 1 \right)^{-1} \approx \frac{x}{\sqrt{2}} \left(e^{a\sqrt{2}x} - 1 \right)^{-1}.$$
 (5.3.8)

Damit folgt für die Temperaturabhängigkeit des Nichtkondensats bei $\beta n_c \Gamma \gg 1$ unter Verwendung der Riemannschen Zetafunktion

$$n'(T) - n'(0) = \frac{(2mn_c\Gamma)^{3/2}}{2\pi^2} \mathscr{I}_1(\beta n_c\Gamma)$$

= $\frac{(2mn_c\Gamma)^{3/2}}{2\pi^2} \int_0^c dx \frac{x}{\sqrt{2}} \left(e^{\beta n_c\Gamma\sqrt{2}x} - 1\right)^{-1}$
 $\approx \frac{(2mn_c\Gamma)^{3/2}}{2\pi^2} \int dx \frac{x}{\sqrt{2}} \left(e^{\beta n_c\Gamma\sqrt{2}x} - 1\right)^{-1}$
= $\frac{m}{12c} (k_BT)^2 \text{ mit } c^2 = \frac{n_c\Gamma}{m}.$ (5.3.9)

Näherung für $\beta n_c \Gamma$ klein Bei Betrachtung eines verdünnten, schwach wechselwirkenden Bosegases bei nicht zu geringer Temperatur gilt die Abschätzung $\beta n_c \Gamma \ll 1$. Dies erlaubt uns wiederum, die verwendete Funktion (5.3.7) zu vereinfachen. Denn bezeichnen wir mit M_I das positive Maximum des Integranden, so ergibt sich für kleine Argumente,

⁴Siehe dazu Abschnitt 5.4

wieder unter Verwendung der Riemannschen Zetafunktion, die Näherung

$$\begin{aligned} \mathscr{I}_{1}(a) &= \int \mathrm{dx} \, \mathrm{x}^{2} \frac{\mathrm{x}^{2} + 1}{\sqrt{\mathrm{x}^{4} + 2\mathrm{x}^{2}}} \left(e^{a\sqrt{\mathrm{x}^{4} + 2\mathrm{x}^{2}}} - 1 \right)^{-1} \\ &\approx \int_{0}^{M_{I}} \mathrm{dx} \, \frac{\mathrm{x}^{4} + \mathrm{x}^{2}}{a(\mathrm{x}^{4} + 2\mathrm{x}^{2})} + \int_{M_{I}}^{\infty} \mathrm{dx} \, \frac{\mathrm{x}^{2}}{e^{a\mathrm{x}^{2}} - 1} \\ &\approx \int_{0}^{M_{I}} \mathrm{dx} \, \frac{\mathrm{x}^{4} + \mathrm{x}^{2}}{a(\mathrm{x}^{4} + 2\mathrm{x}^{2})} + \int \mathrm{dx} \, \frac{\mathrm{x}^{2}}{e^{a\mathrm{x}^{2}} - 1} - \int_{0}^{M_{I}} \mathrm{dx} \, \frac{1}{a} \end{aligned} \tag{5.3.10} \\ &\approx -\frac{1}{a} \int \mathrm{dx} \, \frac{\mathrm{x}^{2}}{\mathrm{x}^{4} + 2\mathrm{x}^{2}} + \int \mathrm{dx} \, \frac{\mathrm{x}^{2}}{e^{a\mathrm{x}^{2}} - 1} \\ &= -\frac{\pi}{2\sqrt{2}a} + \frac{\sqrt{\pi}\zeta(\frac{3}{2})}{4a^{3/2}}. \end{aligned}$$

Damit folgt für die Temperaturabhängigkeit des Nichtkondensats bei $\beta n_c \Gamma \ll 1$

$$n'(T) - n'(0) = \frac{(2mn_c\Gamma)^{3/2}}{2\pi^2} \mathscr{I}_1(\beta n_c\Gamma)$$

= $(\frac{m}{2\pi})^{3/2} \zeta(\frac{3}{2}) (k_B T)^{3/2} - \frac{m^{3/2} \sqrt{n_c\Gamma}}{2\pi} k_B T.$ (5.3.11)

Tatsächlich sind dies die eingangs erwähnten Ergebnisse, die in der Literatur angegeben wurden. Wir erkennen also, daß Popov bei seinen Betrachtungen eine Näherung für einen anderen Temperaturbereich angegeben hat als z.B. Fetter. Deutlich wird dies insbesondere durch die Abbildungen 5.1-5.3, die die angegebenen Näherungen von $\mathscr{I}_1(a)$ mit der exakten Funktion darstellen.

Die unterschiedlichen Näherungen lassen natürlich die Frage zu, welche dieser Approximationen denn für die betrachteten Bosegase die geeignetere ist. Oder anders ausgedrückt, welcher Bereich des Parameters $\beta n_c \Gamma$ ist für verdünnte, schwach wechselwirkende Bosegase experimentell zugänglich? Dazu berechnen wir aus den Daten typischer Experimente [AEM⁺95, DMA⁺95] die uns interessierende Größe (Tabelle 5.1). Ersichtlicherweise schließt der Bereich des Parameters $\beta n_c \Gamma$, der experimentell realisiert wird, keine der Näherungen eindeutig aus. Vielmehr hängt es von den jeweiligen experimentellen Umständen ab, welche Näherung als theoretische Vergleichsmöglichkeit mit dem nicht eingeschlossenen Bosegas verwendet werden muß.



Abbildung 5.1: Der exakte und der approximative Verlauf der Funktion $\mathscr{I}_1(\beta n_c \Gamma)$ im Bereich $\beta n_c \Gamma \ll 1$ aufgetragen über $\frac{1}{\beta n_c \Gamma}$.



Abbildung 5.2: Der exakte und der approximative Verlauf der Funktion $\mathscr{I}_1(\beta n_c \Gamma)$ im Bereich $\beta n_c \Gamma \approx 1$ aufgetragen über $\frac{1}{\beta n_c \Gamma}$.



Abbildung 5.3: Der exakte und der approximative Verlauf der Funktion $\mathscr{I}_1(\beta n_c \Gamma)$ im Bereich $\beta n_c \Gamma \gg 1$ aufgetragen über $\frac{1}{\beta n_c \Gamma}$.

Größe	Anderson et. al	Anderson et. al	Davis et al.
	vor Expansion	nach Expansion	
a_s	$5, 3 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$	$5, 3 \cdot 10^{-6} \text{ cm}$	$4,9 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$
Т	170 nK	20 nK	2 μΚ
m	$1,4 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$	$1,4 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$	$3,8 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$
n_c	$2,6 \cdot 10^{12} \mathrm{~cm}^{-3}$	$1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
$\beta n_c \Gamma$	$6,3 \cdot 10^{-3}$	$2,1 \cdot 10^{1}$	$7,0 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 5.1: Parameter von experimentellen Bose-Einstein-Kondensaten mit ${}^{87}Rb$, ${}^{87}Rb$ und ${}^{23}Na$ entsprechend

5.4 Die Temperaturabhängigkeit des Kondensats: "Thermal Depletion"

Nachdem wir im letzten Abschnitt die Abhängigkeit der Nichtkondensatsdichte von der Temperatur berechnet haben, wollen wir im folgenden die sogenannte "thermal depletion" bestimmen. Darunter versteht man die Abnahme der Kondensatsdichte aufgrund steigender Temperatur. Um nun dieses Programm durchzuführen, nutzen wir die Erkenntnisse des Kapitels 3. Denn in der dortigen Diskussion zur Hugenholtz-Pines-Relation hatten wir ja eingesehen, daß deren Bedeutung gerade als implizite Bestimmungsgleichung der nun gesuchten Kondensatsdichte gegeben ist. Wir könnten also diese Relation zusammen mit den bereits bestimmten Selbstenergieanteilen (5.1.26) verwenden, um eine Näherung der "thermal depletion" zu berechnen. Das Ergebnis wäre

$$n_{c}(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{2}{\beta V} \sum_{q} \Delta(q)$$

$$\approx \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{1}{\pi^{2}} \int dq \frac{q^{2}}{e^{\beta(\varepsilon(q) - \mu)} - 1}.$$
(5.4.1)

Dieses Ergebnis hat Popov als erste Näherung der Kondensatsdichte angegeben [Pop83, Pop87, PY88]. Allerdings ist das darin auftretende Integral fast immer divergent. Nur für den Fall des idealen Gases, nämlich falls $\mu = 0$ gilt, ergibt die verwendete Approximation ein endliches Resultat. Dann gilt nämlich

$$n_c(T) \approx \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{1}{\sqrt{2}} \zeta(\frac{3}{2}) (\frac{m}{\pi\beta})^{3/2}$$
 (5.4.2)

entsprechend der "thermal depletion" des idealen Gases. Da die Näherungen der Selbstenergien in der Form (5.1.26) bei der Berechnung der Kondensatsdichte also nur das Ergebnis des Bosegases ohne Wechselwirkung liefern, wollen wir im folgenden eine für den jetzigen Zweck bessere Approximation verwenden - die erste Loopnäherung bzw. die erste Näherung in der Potenzentwicklung nach \hbar [IZ80].

In der folgende Berechnung werden wir dabei nicht mit der eigentlichen Hugenholtz-Pines-Relation arbeiten, sondern mit der dazu äquivalenten Gleichung [vgl. (3.3.7)]

Der Grund dafür liegt einfach in der Tatsache, daß mit Hilfe der Schwinger-Dyson-Gleichung (5.4.3) eine einfachere und schnellere Berechnung der "thermal depletion" in der von uns gemachten ersten Loopnäherung möglich ist. Diese schon angesprochene erste Loopnäherung berücksichtigt nur Graphen, die maximal eine Schleife besitzen. Deshalb ergibt sich in dieser Approximation aus (5.4.3) die Gleichung

$$0 = + 0, + 1/2 0, + 1/2 0, + (5.4.4)$$

wobei \bigcirc die entsprechende zusammenhängende Greensche Funktion in nullter Loopordnung, d.h. ohne Schleifen, darstellt. Anzumerken ist hierbei, daß die angeführten graphischen Gleichungen implizit die Auswertung an der Stelle p = 0 ausdrücken.

Es ist also als erstes notwendig, die Greenschen Funktionen (5.4.4) die Berechnung von $n_c(\beta, V, \mu)$ durchzuführen. Um nun die Greenschen Funktionen zu erhalten, benutzen wir (3.1.7) und (3.1.8) - ebenfalls in nullter Loopordnung - und erhalten das Gleichungssystem

Dies entspricht aber gerade dem Dyson-Beliaev-Gleichungssystem (4.2.7), bei dem die Selbstenergieanteile auf die nullte Loopordnung beschränkt sind. Mit

$$\longmapsto = -n_c \left(U(\mathbf{0}) + U(\mathbf{p}) \right) \approx -2\Gamma n_c \tag{5.4.6a}$$

$$\longleftrightarrow = -n_c U(\mathbf{p}) \approx -\Gamma n_c \tag{5.4.6b}$$

folgen daher aus (4.2.13) die Lösungen $G_{c,0}^{1,1}(p), G_{c,0}^{2,0}(p)$ für die zusammenhängenden Greenschen Funktionen in nullter Loopordnung zu

$$G_{c,0}^{1,1}(p) = \frac{ip^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_c\Gamma}{D(p)}$$
(5.4.7a)

$$G_{c,0}^{2,0}(p) = \frac{-n_c \Gamma}{D(p)},$$
(5.4.7b)

wobei

$$D(p) = \left(-i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_c\Gamma\right)\left(i\mathbf{p}^0 + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_c\Gamma\right) - n_c^2\Gamma^2.$$
 (5.4.7c)

Nun können wir diese expliziten Ausdrücke mit (5.4.4) verwenden und erhalten die folgende implizite Gleichung zur Bestimmung der Kondensatsdichte

$$n_{c} = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{2}{\beta V} \sum_{p} \left(G_{c,0}^{1,1}(p) + \frac{1}{2} G_{c,0}^{2,0}(p) \right)$$

$$= \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{2}{\beta V} \sum_{p} \frac{ip^{0} + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + \frac{3}{2} n_{c} \Gamma}{\left(-ip^{0} + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_{c} \Gamma\right) \left(ip^{0} + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_{c} \Gamma\right) - n_{c}^{2} \Gamma^{2}}$$

$$= \frac{\mu}{\Gamma}$$

$$- \frac{2}{\beta V} \sum_{p} \frac{ip^{0} + \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + \frac{3}{2} n_{c} \Gamma}{\left(-ip^{0} + \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_{c} \Gamma)^{2} - n_{c}^{2} \Gamma^{2}}\right) \left(ip^{0} + \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_{c} \Gamma)^{2} - n_{c}^{2} \Gamma^{2}}\right)}.$$
(5.4.8)

Führen wir nun die darin enthaltene Frequenzsumme gemäß (A.3.2) aus und machen den Übergang von der Summe zum Integral, dann erhalten wir nach Ausführung der Winkelintegration eine Integralgleichung für die Kondensatsdichte

$$n_c(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{1}{\pi^2} \int d\mathbf{p} \, \mathbf{p}^2 \left(\frac{u'^2(\mathbf{p})}{e^{\beta E'(\mathbf{p})} - 1} - \frac{v'^2(\mathbf{p})}{e^{-\beta E'(\mathbf{p})} - 1} \right),\tag{5.4.9}$$

wobei wir die Größen

$$E'(\mathbf{p}) = \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + 2n_c\Gamma)^2 - n_c^2\Gamma^2}$$
(5.4.10a)

$$u'^{2}(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + \frac{3}{2}n_{c}\Gamma}{2E'(\mathbf{p})} + \frac{1}{2}$$
(5.4.10b)

$$v^{\prime 2}(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu + \frac{3}{2}n_c\Gamma}{2E^{\prime}(\mathbf{p})} - \frac{1}{2}$$
(5.4.10c)

in Anlehung an die Bezeichnungen (5.2.7) definiert haben.

Entgegen dem sehr ähnlichen Ausdruck (5.3.2), den wir bereits ausgewertet haben, hat die Gleichung (5.4.9) den entscheidenen Nachteil, daß sie divergent ist. Dies sieht man beispielsweise bei der direkten Betrachtung von

$$n_c(0) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{1}{\pi^2} \int d\mathbf{p} \, \mathbf{p}^2 v'^2(\mathbf{p}), \qquad (5.4.11)$$

da der auftretende Integrand die Eigenschaft

$$\lim_{p \to \infty} p^2 v'^2(p) \neq 0$$
 (5.4.12)

besitzt. Dieses Resultat ist aber nicht verwunderlich, da es auf der ersten Loopnäherung basiert und diese Näherung automatisch Divergenzen hervorbringt [Mag05]. Man kann aber trotzdem aus der Berechnung ein physikalisch sinnvolles Ergebnis gewinnen, denn die auftretende Divergenz ist eine alleinige Eigenschaft von $n_c(0)$ und nicht der Temperaturabhängigkeit der Kondensatsdichte zuzuordnen, welche uns ja eigentlich interessiert. Benutzen wir aus diesem Grund die nullte Näherung von (5.4.11), d.h. $n_c(0) \approx \frac{\mu}{\Gamma}$, vermeiden also damit das Auftreten von Unendlichkeiten, dann erhalten wir

$$n_{c}(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{1}{\pi^{2}} \int dp \, p^{2} \left(\frac{u^{\prime 2}(p)}{e^{\beta E^{\prime}(p)} - 1} - \frac{v^{\prime 2}(p)}{e^{-\beta E^{\prime}(p)} - 1} - v^{\prime 2}(p) \right) + \frac{1}{\pi^{2}} \int dp \, p^{2} v^{\prime 2}(p)$$

$$= n_{c}(0) - \frac{1}{\pi^{2}} \int dp \, p^{2} \frac{u^{\prime 2}(p) + v^{\prime 2}(p)}{e^{\beta E^{\prime}(p)} - 1}$$

$$\stackrel{!}{=} \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{1}{\pi^{2}} \int dp \, p^{2} \frac{u^{\prime 2}(p) + v^{\prime 2}(p)}{e^{\beta E^{\prime}(p)} - 1}.$$
(5.4.13)

Und schließlich folgt durch Benutzung der Größen (5.4.10) und durch die Substitution $y(p) = \frac{p}{\sqrt{2mn_c\Gamma}}$ die divergenzfreie Integralgleichung der Kondensatsdichte

$$n_{c}(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2mn_{c}\Gamma)^{3/2}}{\pi^{2}} \int dy \, y^{2} \frac{y^{2} - \frac{\mu}{n_{c}\Gamma} + \frac{3}{2}}{\sqrt{(y^{2} - \frac{\mu}{n_{c}\Gamma} + 2)^{2} - 1}} \left(e^{\beta n_{c}\Gamma}\sqrt{(y^{2} - \frac{\mu}{n_{c}\Gamma} + 2)^{2} - 1} - 1\right)^{-1}.$$
(5.4.14)

Da sie zu lösen allgemein nicht möglich ist, benutzen wir nun eine iterative Approximation und erhalten in erster Ordnung

$$n_{c}(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2m\mu)^{3/2}}{\pi^{2}} \int dy \, y^{2} \frac{y^{2} - 1 + \frac{3}{2}}{\sqrt{(y^{2} - 1 + 2)^{2} - 1}} \left(e^{\beta \mu \sqrt{(y^{2} - 1 + 2)^{2} - 1}} - 1 \right)^{-1}$$

$$= \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2m\mu)^{3/2}}{\pi^{2}} \mathscr{I}_{\frac{1}{2}}(\beta \mu),$$
(5.4.15)

wobei wir die bereits durch (5.3.7) definierte Funktion $\mathscr{I}_{\tau}(a)$ benutzt haben. Entsprechend dem Vorgehen bei der Berechnung der Nichtkondensatsdichte werden wir uns im folgenden auch hier den beiden Fälle des Integralparameters, nämlich $\beta \mu \ll 1$ und $\beta \mu \gg 1$, zuwenden.

Näherung für $\beta\mu$ groß Nehmen wir bei der Betrachtung der Gleichung (5.4.15) den auftretenden Parameter $\beta\mu$ als sehr groß an, so vereinfacht sich die auftretende Funktion $\mathscr{I}_{\frac{1}{2}}(\beta\mu)$, da in diesem Fall der effektive Integrationsbereich des Integrals durch den Faktor $(e^{\beta\mu\sqrt{x^4+2x^2}}-1)^{-1}$ auf einen Bereich [0,c] mit $c \ll 1$ eingeschränkt wird. In diesem gilt für den Integranden

$$y^{2} \frac{y^{2} + \frac{1}{2}}{\sqrt{y^{4} + 2y^{2}}} \left(e^{\beta \mu \sqrt{y^{4} + 2y^{2}}} - 1\right)^{-1} \approx \frac{y}{\sqrt{8}} \left(e^{\beta \mu \sqrt{2}y} - 1\right)^{-1}.$$
 (5.4.16)

Damit können wir die Temperaturabhängigkeit des Kondensats bei $\beta \mu \gg 1$ berechnen, und das Resultat ist

$$n_{c}(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2m\mu)^{3/2}}{\pi^{2}} \mathscr{I}_{\frac{1}{2}}(\beta\mu)$$

$$= \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2m\mu)^{3/2}}{\pi^{2}} \int_{0}^{c} dy \frac{y}{\sqrt{8}} \left(e^{\beta\mu\sqrt{2}y} - 1\right)^{-1}$$

$$\approx \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2mn_{c}\Gamma)^{3/2}}{2\pi^{2}} \int dy \frac{y}{\sqrt{2}} \left(e^{\beta\mu\sqrt{2}y} - 1\right)^{-1}$$

$$= \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{m}{12c} (k_{B}T)^{2} \operatorname{mit} c^{2} = \frac{\mu}{m} = \frac{n_{c}(0)\Gamma}{m}.$$

(5.4.17)

64

Dies stimmt mit Betrachtungen aus der Literatur überein [FW03], deren Berechnungen allerdings der Bedingung konstanter Teilchenzahl unterliegen und deshalb einfach aus den Ergebnissen der Nichtkondensatsdichte folgen. Tatsächlich können wir durch Vergleich mit dem Ergebnis aus der Berechnung der Nichtkondensatsdichte (5.3.9) erkennen, daß für das großkanonische Ensemble diese in diesem Fall nichttriviale Aussage ebenfalls gilt:

$$n(T) = n_c(T) + n'(T) = n_c(0) + n'(0) = \frac{\mu}{\Gamma} + \frac{(m\mu)^{3/2}}{3\pi^2},$$
 (5.4.18)

d.h. die Gesamtdichte ist für den Fall $k_B T \ll \mu$ konstant.

Näherung für $\beta\mu$ klein Auch für den Fall, daß $\beta\mu \ll 1$ können wir unser Resultat (5.4.15) vereinfachen. Denn bezeichnen wir mit M_I das positive Maximum des auftretenden Integranden, so folgt unter Verwendung der Riemannschen Zetafunktion die Näherung

$$\begin{aligned} \mathscr{I}_{\frac{1}{2}}(\beta\mu) &= \int dx \, x^2 \frac{x^2 + \frac{1}{2}}{\sqrt{x^4 + 2x^2}} \Big(e^{\beta\mu\sqrt{x^4 + 2x^2}} - 1 \Big)^{-1} \\ &\approx \int_{0}^{M_{I}} dx \, \frac{x^4 + \frac{1}{2}x^2}{\beta\mu(x^4 + 2x^2)} + \int_{M_{I}}^{\infty} dx \, \frac{x^2}{e^{\beta\mu x^2} - 1} \\ &\approx \int_{0}^{M_{I}} dx \, \frac{x^4 + \frac{1}{2}x^2}{\beta\mu(x^4 + 2x^2)} + \int dx \, \frac{x^2}{e^{\beta\mu x^2} - 1} - \int_{0}^{M_{I}} dx \, \frac{1}{\beta\mu} \end{aligned}$$
(5.4.19)
$$&\approx -\frac{3}{2\beta\mu} \int dx \, \frac{x^2}{x^4 + 2x^2} + \int dx \, \frac{x^2}{e^{\beta\mu x^2} - 1} \\ &= -\frac{3\pi}{4\sqrt{2}\beta\mu} + \frac{\sqrt{\pi}\zeta(\frac{3}{2})}{4(\beta\mu)^{3/2}}. \end{aligned}$$

Damit folgt für die "thermal depletion" bei $\beta \mu \ll 1$ das Resultat

$$n_{c}(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - \frac{(2m\mu)^{3/2}}{\pi^{2}} \mathscr{I}_{\frac{1}{2}}(\beta\mu)$$

$$= \frac{\mu}{\Gamma} - 2(\frac{m}{2\pi})^{3/2} \zeta(\frac{3}{2})(k_{B}T)^{3/2} + 3\frac{m^{3/2}\sqrt{\mu}}{2\pi}k_{B}T.$$
 (5.4.20)

Tatsächlich zeigt sich in dieser Näherung, wie es eigentlich beim großkanonischen Ensemble zu erwarten ist, nämlich, daß die Gesamtdichte nicht immer erhalten sein muß. Denn es folgt mit (5.3.11)

$$n(T) = n_c(T) + n'(T) = \frac{\mu}{\Gamma} - (\frac{m}{2\pi})^{3/2} \zeta(\frac{3}{2}) (k_B T)^{3/2} + \frac{m^{3/2} \sqrt{\mu}}{\pi} k_B T.$$
(5.4.21)

Diese Resultate (5.4.20, 5.4.21) stimmen mit den von Popov angegebenen Ergebnissen [Pop83] überein, wenngleich die Berechnung eine grundlegend andere war. So hat Popov die freien Propagatoren in den ursprünglichen Gleichungen der Selbstenergieanteile durch die bereits in erster Näherung berechneten Greenschen Funktionen ersetzt, um so die Selbstenergien in einer zweiten Näherung zu berechnen. Aus diesen konnte er mit Hilfe der Hugenholtz-Pines-Relation die Kondensatsdichte berechnen. Allerdings mußte er sich dazu schon von Anfang an auf den von ihm betrachteten Temperaturbereich beschränken.

Uns hingegen ist es gelungen, die Hugenholtz-Pines-Relation in einer neuen Formulierung zu benutzen, um so in erster Loopnäherung eine für den vollen Temperaturbereich gültige Integralgleichung der Kondensatsdichte angeben zu können. Diese haben wir dann iterativ in erster Näherung gelöst.

6 Zusammenfassung

Zum Schluß bleibt die Feststellung, daß die in dieser Arbeit dargelegten funktionalen Methoden auch für die Theorie der Bose-Einstein-Kondensation einen idealen Zugang bieten. Aufgebaut auf einem mächtigen und sehr effizienten Formalismus ermöglichen sie insbesondere einen korrekten Beweis für die so wichtige nicht-störungstheoretische Hugenholtz-Pines-Relation

$$\Sigma^{1,1}(0) + \mu = \Sigma^{2,0}(0)$$

- und zwar bei endlichen Temperaturen. Die für den Beweis entscheidenden Schwinger-Dyson-Gleichungen ergeben sich dabei in naheliegender Weise aus dem Funktionalintegral.

Auf der Basis der Schwinger-Dyson-Gleichungen ist es zudem auch möglich, die äquivalente Formulierung

$$\bullet \bullet + \bullet + \frac{1}{2} \bullet \bullet + \frac{1}{2} \bullet \bullet = 0$$

der Hugenholtz-Pines-Relation zu begründen. Diese kompakte Formulierung erlaubt es im Gegensatz zur ursprünglichen Darstellung, die Temperaturabhängigkeit der Kondensatsdichte in erster Loopnäherung auf dem gesamten Temperaturbereich zu berechnen.

Die gewonnenen Erkenntnisse bestätigen in überzeugender Weise, welche fundamentale Bedeutung der Funktionalintegralformalismus auch bei der Untersuchung der Bose-Einstein-Kondensation besitzt. Seine weitere Anwendung auf diesem Gebiet wird gewiß weitere neue Einsichten mit sich bringen. Um mit den Worten Popovs zu schließen [Pop83, S.3]:

"If there's a possibility of a [...] solution, the method of functional integration gives a simple way of obtaining it".

6 Zusammenfassung
A Frequenzsummen

Für die in dieser Diplomarbeit auftretenden doppelten Frequenzsummen ist es möglich, eine analytische Lösung anzugeben. Diese werden wir in den folgenden Abschnitten herleiten. Um dies zu bewerkstelligen, ist es sehr hilfreich, zuvor noch einmal den gängigen Lösungsweg [FW03] für einfache Frequenzsummen zu betrachten.

A.1 Die Berechnung einfacher Frequenzsummen

Das Auftreten von Summen der Form

$$\lim_{\eta \to +0} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_n \eta}}{i\omega_n - x} \text{ mit } \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta} \text{ und } x \neq i\omega_n, \tag{A.1.1}$$

sogenannten Frequenzsummen, ist typisch für Vielteilchentheorien. Damit solche Summen aber überhaupt konvergieren, ist es wichtig, sie mit Hilfe von konvergenzerzeugenden Faktoren, in diesem Falle $e^{i\omega_n\eta}$, zu regularisieren. Damit ist ihre Berechnung möglich und kann mit Hilfe der komplexen Kurvenintegration durchgeführt werden.

Dazu benutzen wir die meromorphe Funktion $f(z) \mapsto \frac{\beta}{e^{\beta z}-1}$, die (einfache) Pole bei $z_n = \frac{i2\pi n}{\beta} = i\omega_n$ besitzt. Die zugehörigen Residuen ergeben sich zu

$$\operatorname{Res}\{f(z)\}|_{z=z_{n}} = \lim_{z \to z_{n}} \{(z - z_{n})f(z)\}$$

= $\beta \lim_{z \to z_{n}} \left\{\frac{z - z_{n}}{e^{\beta z} - 1}\right\}$ (A.1.2)
= 1.

Dadurch ist es uns nun möglich, die Frequenzsumme durch ein Umlaufintegral zu ersetzen. Denn wählen wir als Umlaufweg \mathscr{C} den Pfad mit positivem Umlauf, der nur die Imaginärachse einschließt, dann ergibt sich mit Hilfe des Residuensatzes

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathscr{C}} dz \ f(z) \frac{e^{\eta z}}{z - x} = 2\pi i \sum_{n} \operatorname{Res} \left\{ \frac{1}{2\pi i} f(z) \frac{e^{\eta z}}{z - x} \right\} \Big|_{z = z_{n}}$$

$$\stackrel{(A.1.2)}{=} \sum_{n} \frac{e^{\eta z_{n}}}{z_{n} - x}$$

$$= \sum_{n} \frac{e^{i\omega_{n}\eta}}{i\omega_{n} - x}.$$
(A.1.3)



Abbildung A.1: Deformierung des Umlaufweges \mathscr{C} nach $\mathscr{D} \cup \mathscr{E}$

Um die Frequenzsumme zu bestimmen, müssen wir also das Umlaufintegral auswerten. Das ist möglich, indem wir den Weg \mathscr{C} entspechend der Abbildung A.1 durch die Summe der Wege \mathscr{D} und \mathscr{E} darstellen, wobei wir an \mathscr{E} die Bedingung $|z| \to \infty$ stellen. Dadurch ist gewährleistet, daß das Umlaufintegral entlang \mathscr{E} verschwindet. Somit verbleibt nur das Umlaufintegral entlang \mathscr{D} , welches wir mit Hilfe von Cauchys Integralformel berechnen können. Dabei ist allerdings auf den richtigen Umlaufisinn der Kontouren zu achten. Es gilt also

$$\sum_{n} \frac{e^{i\omega_{n}\eta}}{i\omega_{n} - x} \stackrel{(A.1.3)}{=} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathscr{C}} dz \ f(z) \frac{e^{\eta z}}{z - x}$$
$$\int_{\mathscr{C}} = 0 \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathscr{D}} dz \ f(z) \frac{e^{\eta z}}{z - x}$$
$$\stackrel{\text{C.I.}}{=} -f(x)e^{\eta x}$$
$$= -\frac{\beta e^{\eta x}}{e^{\beta x} - 1}.$$

Damit ist die Berechnung der Frequenzsumme gelungen, und wir erhalten das Ergebnis

$$\lim_{\eta \to +0} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_n \eta}}{i\omega_n - x} = -\frac{\beta}{e^{\beta x} - 1}.$$
(A.1.4)

A.2 Die Berechnung doppelter Frequenzsummen erster Art

Unter Benutzung des letzten Abschnitts über einfache Frequenzsummen lassen sich nun auch doppelte Frequenzsummen auswerten. Dabei unterscheiden wir doppelte Frequenz-



Abbildung A.2: Deformierung des Umlaufweges \mathscr{C} in $\mathscr{D} \cup \mathscr{E}$

summen erster Art von denen zweiter Art. Die ersteren sind Ausdrücke der Form

$$\lim_{\eta \to +0} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_n \eta}}{(i\omega_n - x)(i\omega_n - y)} \text{ mit } \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta} \text{ und } x, y \neq i\omega_n,$$
(A.2.1)

und diese lassen sich mit Hilfe der Partialbruchzerlegung gemäß

$$\frac{1}{(i\omega_n - x)(i\omega_n - y)} = \frac{1}{x - y} \left(\frac{1}{i\omega_n - x} - \frac{1}{i\omega_n - y}\right)$$
(A.2.2)

in einfache Frequenzsummen aufspalten. Wir erhalten deshalb mit (A.1.4)

$$\lim_{\eta \to +0} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_{n}\eta}}{(i\omega_{n} - x)(i\omega_{n} - y)} = -\frac{\beta}{x - y} \left(\frac{1}{e^{\beta x} - 1} - \frac{1}{e^{\beta y} - 1}\right).$$
 (A.2.3)

A.3 Die Berechnung doppelter Frequenzsummen zweiter Art

Die bereits erwähnten doppelten Frequenzsummen zweiter Art besitzen die Gestalt

$$\lim_{\eta \to +0} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_n \eta} (i\omega_n + x)}{(i\omega_n - y)(i\omega_n + y)} \text{ mit } \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta} \text{ und } x, y \neq i\omega_n.$$
(A.3.1)

Nutzen wir zur Auswertung wieder die meromorphe Funktion $f(z) \mapsto \frac{\beta}{e^{\beta z}-1}$ und ihre Residuen (A.1.2) sowie eine Zerlegung des in dem vorherigen Abschnitt angegebenen

Weges \mathscr{C} gemäß Abbildung A.2, erhalten wir

$$\begin{split} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_{n}\eta}(i\omega_{n}+x)}{(i\omega_{n}-y)(i\omega_{n}+y)} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathscr{C}} \mathrm{d}z \ f(z) \frac{e^{\eta z}(z+x)}{(z-y)(z+y)} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathscr{D}} \mathrm{d}z \ f(z) \frac{e^{\eta z}(z+x)}{(z-y)(z+y)} \\ &= -\operatorname{Res} \Big\{ f(z) \frac{e^{\eta z}(z+x)}{(z-y)(z+y)} \Big\} \Big|_{z=y} - \operatorname{Res} \Big\{ f(z) \frac{e^{\eta z}(z+x)}{(z-y)(z+y)} \Big\} \Big|_{z=-y} \\ &= -f(y) \frac{e^{\eta y}(y+x)}{2y} - f(-y) \frac{e^{-\eta y}(-y+x)}{-2y} \\ &= -\beta \Big\{ \frac{e^{\eta y}(\frac{x}{2y} + \frac{1}{2})}{e^{\beta y} - 1} - \frac{e^{-\eta y}(\frac{x}{2y} - \frac{1}{2})}{e^{-\beta y} - 1} \Big\}. \end{split}$$

Damit können wir als Ergebnis für die doppelte Frequenzsumme zweiter Art

$$\lim_{\eta \to +0} \sum_{n} \frac{e^{i\omega_{n}\eta}(i\omega_{n}+x)}{(i\omega_{n}-y)(i\omega_{n}+y)} = -\beta \left\{ \frac{\frac{x}{2y} + \frac{1}{2}}{e^{\beta y} - 1} - \frac{\frac{x}{2y} - \frac{1}{2}}{e^{-\beta y} - 1} \right\}$$
(A.3.2)

.

.

angeben.

B Die Integralgleichung der Streuamplitude

Wie wir in unseren Berechnungen zum verdünnten Bosegas gesehen haben, führt das Auftreten von Streuprozessen der 2-Teilchenstreuung automatisch zur Benutzung von Größen und Resultaten aus der Streutheorie. Insbesondere die aus dieser Theorie stammende Streuamplitude ist für unsere Berechnungen relevant. Deshalb wollen wir im folgenden die zugehörige Integralgleichung ableiten.

Um einen Ausdruck für die Streuamplitude bei der 2-Teilchenstreuung zu erhalten, betrachten wir durch den Übergang in das Schwerpunktsystem das äquivalente Problem der 1-Teilchenstreuung an einem Potential, wobei dann bei letzterem die reduzierte Masse $\tilde{m} = \frac{mm}{m+m} = \frac{m}{2}$ zu verwenden ist. In dem von uns betrachteten zeitunabhängigen Fall ist demnach erst einmal die Lösung der Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2\tilde{m}} + U(\mathbf{r})\right)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
(B.0.1)

gesucht. Da wir den Fall der Streuung betrachten, ist die Energie positiv und kann als $E_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2\tilde{m}}$ geschrieben werden. Die daraus resultierende Gleichung kann als inhomogene Differentialgleichung

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 2\tilde{m}U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$
(B.0.2)

geschrieben werden, deren Lösung sich mit Hilfe der entsprechenden Greenschen Funktion ausdrücken läßt. Diese Greensche Funktion kann man mit Hilfe der Fouriertransformation und des Residuensatzes bestimmen, und sie lautet¹

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$
(B.0.3)

Damit folgt für die gesuchte Wellenfunktion die Integralgleichung

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{\tilde{m}}{2\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \qquad (B.0.4)$$

¹Die zweite noch existierende Greensche Funktion wird aufgrund ihrer Folgerung von Kugelwellen, die auf das Streuzentrum einfallen, als physikalisch nicht relevant ausgeschlossen. Die auftretenden Kugelwellen müssen auslaufend sein [BD02].

wobei $\psi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ eine homogene Lösung der Differentialgleichung ist. Für große Abstände vom Streuzentrum, d.h. $\mathbf{r} \gg \mathbf{r}'$, gelten die Näherungen

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'} \approx r \left(1 - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2}\right) \approx r \tag{B.0.5}$$

$$e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx e^{ikr} e^{-ik\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r}} =: e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}$$
(B.0.6)

und damit nimmt (B.0.4) die asymptotische Form

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \left(-\frac{\tilde{m}}{2\pi} \int \mathrm{d}\,\mathbf{r}'\,\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}\,U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \right) \tag{B.0.7}$$

an. Vergleicht man dies nun mit der für große Abstände gültigen Gleichung

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + f(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{e^{ikr}}{r},$$
(B.0.8)

die $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ definiert, so erhält man als Gleichung für die Streuamplitude

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{\tilde{m}}{2\pi} \int \mathrm{d}\mathbf{r}' \,\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \,U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \tag{B.0.9}$$

Um daraus die gesuchte Integralgleichung zu erhalten, müssen wir im folgenden die in der letzten Gleichung auftretende $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$ -Abhängigkeit durch die Streuamplitude selbst ausdrücken. Dazu benutzen wir den zu (B.0.7) fouriertransformierten Ausdruck

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{p}) - \frac{4\pi f(\mathbf{k}, \mathbf{p})}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{p}^2}$$
(B.0.10)

und erhalten mit (B.0.9)

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{\tilde{m}}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{p} \, U(\mathbf{k}'-\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})$$

= $-\frac{\tilde{m}}{2\pi} U(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) + \frac{\tilde{m}}{2\pi} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \frac{U(\mathbf{k}'-\mathbf{p})4\pi f(\mathbf{k},\mathbf{p})}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{p}^2}.$ (B.0.11)

Damit folgt für die 2-Teilchenstreuung folgende Integralgleichung für die Streuamplitude

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{4\pi} U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{m}{4\pi} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \frac{U(\mathbf{k}' - \mathbf{p}) 4\pi f(\mathbf{k}, \mathbf{p})}{\mathbf{k}^2 - \mathbf{p}^2}.$$
 (B.0.12)

C Topologische Betrachtungen zur $\psi_c, \overline{\psi}_c$ -Abhängigkeit von $\Sigma^{0,0}$

Bei dem in dieser Arbeit vorgelegten Beweis der Hugenholtz-Pines-Relation benutzten wir eine spezielle Darstellung der Größe $\Sigma^{0,0}$ in Abhängigkeit der Felder ψ_c und $\overline{\psi}_c$. Diese Darstellung wollen wir im folgenden durch eine Analyse von Feynmangraphen begründen.

Betrachten wir dazu einen Graphen $T_i^{m,n}$ mit *m* ausgehenden und *n* eingehenden Beinen der Ordnung *i*, das heißt, er besitzt *i* Vertizes v_1, \ldots, v_i , und jeder dieser Vertizes $v_j \in \{v_1, \ldots, v_i\}$ besitzt e_j Eingänge und a_j Ausgänge. Zusätzlich bezeichnen wir mit *l* die Anzahl der inneren Linien. Da nun alle Vertexaus- bzw. eingänge entweder durch solche inneren Linien verknüpft sind oder aber mit aus- bzw. eingehenden Beinen des Graphen belegt sind, folgt

$$\sum_{j=1}^{l} e_j = l + n \tag{C.0.1a}$$

$$\sum_{j=1}^{i} a_j = l + m.$$
 (C.0.1b)

Betrachtet wir nun die einzelnen Feynmanregeln unseres bosonischen Systems. Wir erkennen, daß die ψ_c - und $\overline{\psi}_c$ -Abhängigkeit einzelner Graphen $T_i^{m,n}$ nur durch die Regel III_F, also nur durch die Vertizes v_j bestimmt wird, wobei letztere die Form

$$v_j(\psi_c, \overline{\psi}_c) = f_j(|\psi_c|^2) \psi_c^{a_j} \overline{\psi}_c^{e_j}$$
(C.0.2)

besitzen. Für den Graphen selbst ergibt sich deshalb die Abhängigkeit zu

$$T_{i}^{m,n}(\psi_{c},\overline{\psi}_{c}) = \prod_{j} \left(f_{j}(|\psi_{c}|^{2})\psi_{c}^{a_{j}}\overline{\psi}_{c}^{e_{j}} \right)$$
$$= g(|\psi_{c}|^{2})\prod_{j} \left(\psi_{c}^{a_{j}}\overline{\psi}_{c}^{e_{j}} \right)$$
$$= g(|\psi_{c}|^{2})\psi_{c}^{\sum_{j}a_{j}}\overline{\psi}_{c}^{\sum_{j}e_{j}}$$
$$= \tilde{g}(|\psi_{c}|^{2})\psi_{c}^{m}\overline{\psi}_{c}^{n}$$
(C.0.3)

75

Damit folgt speziell für die Summe der irreduziblen Graphen $\Sigma^{0,0}$, daß die gesuchte Abhängigkeit durch

$$\Sigma^{0,0} = h(|\psi_c|^2)$$
 (C.0.4)

beschrieben werden kann.

Literaturverzeichnis

- [AEM⁺95] 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(5221):198, 1995.
- [AGD65] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, and I.Ye. Dzyaloshinskii. *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*. Pergamon Press, 2. edition, 1965.
- [And04] J.O. Andersen. Theory of the weakly interacting bose gas. *Reviews of Modern Physics*, 76(2):599–639, 2004.
- [BD02] J.-L. Basdevant and J. Dalibard. *Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, 2002.
- [Bel58a] S.T. Beliaev. Applications of the methods of quantum field theory to a system of bosons. *Soviet Physics JETP*, 7(2):289–299, 1958.
- [Bel58b] S.T. Beliaev. Energy-spectrum of a non-ideal bose gas. *Soviet Physics JETP*, 7(2):299–307, 1958.
- [Bog47] N.N. Bogoliubov. On the theory of superfluidity. *Journal of Physics*, 11(1):23–32, 1947.
- [Bro92] L.S. Brown. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 1992.
- [BSTH95] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet. Evidence of boseeinstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, 75(9):1687, 1995.
- [DMA⁺95] 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. *Physical Review Letters*, 75(22):3969, 1995.
- [Eco83] E.N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer-Verlag, 2. edition, 1983.
- [EGZL96] B.D. Esry, C.H. Greene, Y. Zhou, and C.D. Lin. Role of the scattering length in three-boson dynamics and bose-einstein condensation. *Journal of Physics B*, 29(2):L51–L57, 1996.

[EOY05]	H. Enomoto, M. Okumura, and Y. Yamanaka. Goldstone theorem, hugenholtz-pines theorem and ward-takahashi relation in finite volume bose-einstein condensed gases. <i>arXiv:cond-mat/0512294</i> , 2005.
[Fad76]	L.D. Faddeev. Introduction to functional methods. In R. Balian and J. Zinn-Justin, editors, <i>Methods in Field Theory</i> . North-Holland Publishing, 1976.
[Fet98]	A.L. Fetter. Theory of a dilute low-temperature trapped bose condensate. <i>arXiv:cond-mat/9811366 v1</i> , 1998.
[FW03]	A.L. Fetter and J.D. Walecka. <i>Quantum Theory of Many Particle Systems</i> . Dover Publications, 7. cor. edition, 2003.
[Gre04]	G. Grensing. <i>Einführung in die Quantenfeldtheorie</i> . Vorlesungsmitschrift, 2003/04.
[Gri96]	A. Griffin. Conserving and gapless approximations for an inhomogeneous bose gas at finite temperatures. <i>Physical Review B</i> , 53(14):9341–9347, 1996.
[GSS95]	A. Griffin, D.W. Snoke, and S. Stringari. <i>Bose-Einstein Condensation</i> . Cambridge University Press, 1995.
[Hig74]	P.W. Higgs. Spontaneous symmetry breaking. In R.L. Crawford and R. Jen- nings, editors, <i>Phenomenology of Particles at High Energies</i> . Academic Press, 1974.
[HM65]	P.C. Hohenberg and P.C. Martin. Microscopic theory of superfluid helium. <i>Annals of Physics</i> , 34:291–359, 1965.
[HP59]	N.M. Hugenholtz and D. Pines. Ground-state energy and excitation spectrum of a system of interacting bosons. <i>Physical Review</i> , 116(3):489–506, 1959.
[IZ80]	C. Itzykson and JB. Zuber. Quantum Field Theory. McGraw-Hill, 1980.
[Leg99]	A.J. Leggett. Superfluidity. Reviews of Modern Physics, 71(2):S318, 1999.
[LY58]	T.D. Lee and C.N. Yang. Low-temperature behavior of a dilute bose system of hard spheres. i. equilibrium properties. <i>Physical Review</i> , 112(5):1419–1429, 1958.
[LY59]	T.D. Lee and C.N. Yang. Low-temperature behavior of a dilute bose system of hard spheres. ii. nonequilibrium properties. <i>Physical Review</i> , 113(6):1406–1413, 1959.
[Mag05]	M. Maggiore. A Modern Introduction to Quantum Field Theory. Oxford University Press, 2005.

- [Mat92] R.D. Mattuck. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body-Problem*. Dover Publications, 2. edition, 1992.
- [Nas78] C. Nash. *Relativistic Quantum Fields*. Academic Press, 1978.
- [NO94] J.W. Negele and H. Orland. *Quantum Many-Particle Systems*. Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [PF64] V.N. Popov and L.D. Faddeev. An approach to the theory of the low-temperature bose gas. *Soviet Physics JETP*, 47:1315–1321, 1964.
- [Pin62] D. Pines. *The Many-Body Problem*. W.A. Benjamin, 1962.
- [PN99] D. Pines and P. Nozières. *The Theory of Quantum Liquids*, volume 2. Perseus Books, 1999.
- [Pop83] V.N. Popov. Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics. D. Reidel Publishing Company, 1983.
- [Pop87] V.N. Popov. *Functional Integrals and Collective Excitations*. Cambridge University Press, 1987.
- [PS02] C.J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [PS03] L. Pitaevskii and S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. Oxford Science Publications, 2003.
- [PY88] V.N. Popov and V.S. Yarunin. *Collective Effects in Quantum Statistics of Radiation and Matter*. Kluwer Academic Publishers, 1988.
- [RHB95] P.A. Ruprecht, M.J. Holland, and K. Burnett. Time-dependent solution of the nonlinear schrödinger equation for bose-condensed trapped neutral atoms. *Physical Review A*, 51(6):4704–4711, 1995.
- [Riv87] R.J. Rivers. *Path Integral Methods in Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 1987.
- [Ryd03] L.H. Ryder. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 2. edition, 2003.
- [Sch97] F. Schwabl. *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*. Springer-Verlag, 1997.
- [Sto94] H.T.C. Stoof. Atomic bose gas with a negative scattering length. *Physical Review A*, 49(2):3824–3830, 1994.

[Toy82]	T. Toyoda. Theory of lambda transition. <i>Annals of Physics</i> , 141(1):154–178, 1982.
[Toy83]	T. Toyoda. Theory of lambda transition, ii. <i>Annals of Physics</i> , 147(1):244–266, 1983.
[Vas98]	A.N. Vasiliev. Functional Methods in Quantum Field Theory and Statistical

[ZJ02] J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 4. edition, 2002.

Physics. Gordon and Breach Science Publishers, 1998.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Personen bedanken, die mich während meines Studiums und bei der Erstellung dieser Diplomarbeit unterstützt haben.

Ganz besonderer Dank gebührt in diesem Zusammenhang meinem Betreuer Gerhard Grensing für die zahlreichen Hinweise, Gespräche und Diskussionen, mit denen er mich das letzte Jahr stets begleitet hat.

Auch meiner Familie bin ich sehr dankbar - vor allem meiner Frau Jenny, deren Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit ich nicht hoch genug einschätzen kann, meinem Sohn Yannick für sein Talent Probleme aller Art vergessen zu lassen und meiner Schwester Ines, die den Text dieser Arbeit durchgesehen hat.

Abschließend gilt mein Dank Michael Becker, Dennis Wilken und Martin Ziegler für ihre Hilfe bei Fragen jedweder Art und für die Einsichten und Erkenntnisse, die sie mir zuteil werden ließen.

Eidesstattliche Erklärung

Die vorliegende Arbeit ist von mir selbständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt worden.

Kiel, den23.01. 2006(Ort)(Datum)

(Unterschrift)