

Vorüberlegung: Wann ist Störungstheorie möglich?



- ▶ mittleres Volumen pro Teilchen: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3}$

Vorüberlegung: Wann ist Störungstheorie möglich?



► mittleres Volumen pro Teilchen: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \equiv \frac{4\pi}{3} r_0^3$

→ typische Längenskala: $r_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{k_F} \Leftrightarrow k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$

Vorüberlegung: Wann ist Störungstheorie möglich?

- ▶ mittleres Volumen pro Teilchen: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \equiv \frac{4\pi}{3} r_0^3$
→ typische Längenskala: $r_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{k_F} \Leftrightarrow k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$
- ▶ dimensionslose Größen: $\vec{r} \equiv \frac{\vec{r}}{r_0}$, $\vec{V} \equiv \frac{V}{r_0^3} = \frac{4\pi}{3} N$, $\vec{k} \equiv \vec{k} r_0$, ...
Zustände: $|\vec{k}, s\rangle \equiv |\vec{k}, s\rangle \Rightarrow a_{\vec{k},s} = a_{\vec{k},s}, a_{\vec{k},s}^\dagger = a_{\vec{k},s}^\dagger \dots$

Vorüberlegung: Wann ist Störungstheorie möglich?



► mittleres Volumen pro Teilchen: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \equiv \frac{4\pi}{3} r_0^3$

→ typische Längenskala: $r_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{k_F} \Leftrightarrow k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$

► dimensionslose Größen: $\vec{r} \equiv \frac{\vec{r}}{r_0}$, $\vec{V} \equiv \frac{V}{r_0^3} = \frac{4\pi}{3} N$, $\vec{k} \equiv \vec{k} r_0$, ...

Zustände: $|\vec{k}, s\rangle \equiv |\vec{k}, s\rangle \Rightarrow a_{\vec{k},s}^\dagger = a_{\vec{k},s}^\dagger$, $a_{\vec{k},s} = a_{\vec{k},s}$...

$$\Rightarrow H = \frac{\hbar^2}{mr_0^2} \left(\sum_{\vec{k},s} \frac{\vec{k}^2}{2} a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} + \frac{me^2}{\hbar^2} r_0 \frac{1}{V} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}' \\ \vec{q}\neq\vec{0}}} \sum_{s,s'} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q},s'}^\dagger a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s} \right)$$

Vorüberlegung: Wann ist Störungstheorie möglich?

▶ mittleres Volumen pro Teilchen: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \equiv \frac{4\pi}{3} r_0^3$

→ typische Längenskala: $r_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{k_F} \Leftrightarrow k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$

▶ dimensionslose Größen: $\vec{r} \equiv \frac{\vec{r}}{r_0}$, $\vec{V} \equiv \frac{V}{r_0^3} = \frac{4\pi}{3} N$, $\vec{k} \equiv \vec{k} r_0$, ...

Zustände: $|\vec{k}, s\rangle \equiv |\vec{k}, s\rangle \Rightarrow a_{\vec{k},s}^\dagger = a_{\vec{k},s}^\dagger$, $a_{\vec{k},s}^\dagger = a_{\vec{k},s}^\dagger$...

$$\Rightarrow H = \frac{\hbar^2}{mr_0^2} \left(\sum_{\vec{k},s} \frac{\vec{k}^2}{2} a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} + \frac{me^2}{\hbar^2} r_0 \frac{1}{V} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}' \\ \vec{q}\neq\vec{0}}} \sum_{s,s'} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q},s'}^\dagger a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s} \right)$$

→ relative Wichtigkeit des Potentials zur kinetischen Energie:

$$r_s \equiv \frac{me^2}{\hbar^2} r_0 = \frac{r_0}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (\text{Bohr'scher Radius})$$

Vorüberlegung: Wann ist Störungstheorie möglich?

▶ mittleres Volumen pro Teilchen: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \equiv \frac{4\pi}{3} r_0^3$

→ typische Längenskala: $r_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{k_F} \Leftrightarrow k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$

▶ dimensionslose Größen: $\vec{r} \equiv \frac{\vec{r}}{r_0}$, $\vec{V} \equiv \frac{V}{r_0^3} = \frac{4\pi}{3} N$, $\vec{k} \equiv \vec{k} r_0$, ...

Zustände: $|\vec{k}, s\rangle \equiv |\vec{k}, s\rangle \Rightarrow a_{\vec{k},s}^\dagger = a_{\vec{k},s}^\dagger$, $a_{\vec{k},s}^\dagger = a_{\vec{k},s}^\dagger$...

$$\Rightarrow H = \frac{\hbar^2}{m r_0^2} \left(\sum_{\vec{k},s} \frac{\vec{k}^2}{2} a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} + \frac{m e^2}{\hbar^2} r_0 \frac{1}{V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \vec{q} \neq \vec{0}}} \sum_{s,s'} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q},s}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q},s'}^\dagger a_{\vec{k}',s'} a_{\vec{k},s} \right)$$

→ relative Wichtigkeit des Potentials zur kinetischen Energie:

$$r_s \equiv \frac{m e^2}{\hbar^2} r_0 = \frac{r_0}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \quad (\text{Bohr'scher Radius})$$

→ Störungstheorie gut für kleine $r_s \Leftrightarrow$ hohe Dichten

Störungstheoretische Berechnung der Grundzustandsenergie



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

▶ **Hamilton-Operator:** $H = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}'_{\text{el}}$

- ▶ \hat{T}_{el} = ungestörter Hamilton-Operator: $\hat{T}_{\text{el}}|\phi_0\rangle = E^{(0)}|\phi_0\rangle$,
ungestörter Grundzustand = Fermikugel: $|\phi_0\rangle = \prod_{|\vec{k}| \leq k_F} \prod_s a_{\vec{k},s}^\dagger |0\rangle$
- ▶ \hat{V}'_{el} = „Störung“

Störungstheoretische Berechnung der Grundzustandsenergie

- ▶ **Hamilton-Operator:** $H = \hat{T}_{\text{el}} + \hat{V}'_{\text{el}}$
 - ▶ \hat{T}_{el} = ungestörter Hamilton-Operator: $\hat{T}_{\text{el}}|\phi_0\rangle = E^{(0)}|\phi_0\rangle$,
ungestörter Grundzustand = Fermikugel: $|\phi_0\rangle = \prod_{|\vec{k}| \leq k_F} \prod_s a_{\vec{k},s}^\dagger |0\rangle$
 - ▶ \hat{V}'_{el} = „Störung“
- ▶ **Grundzustandsenergie in 1. Ordnung Störungstheorie:** $E \approx E^{(0)} + E^{(1)}$
 - ▶ $E^{(0)} = \langle \phi_0 | \hat{T}_{\text{el}} | \phi_0 \rangle$ (s.o.)
 - ▶ $E^{(1)} = \langle \phi_0 | \hat{V}'_{\text{el}} | \phi_0 \rangle$



$$\blacktriangleright E^{(0)} = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s}$$



$$\begin{aligned} \blacktriangleright E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s} \\ &\longrightarrow 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\blacktriangleright E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s} \\ &\longrightarrow 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk k^4\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\blacktriangleright E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s} \\ &\longrightarrow 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk k^4 = \frac{V k_F^3}{5\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}\end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \blacktriangleright E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s} \\ &\longrightarrow 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk k^4 = \frac{V k_F^3}{5\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F, \quad \varepsilon_F \equiv \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (\text{Fermi-Energie}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\blacktriangleright E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s} \\ &\longrightarrow 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk k^4 = \frac{V k_F^3}{5\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F, \quad \varepsilon_F \equiv \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (\text{Fermi-Energie})\end{aligned}$$

► mittlere Energie pro Teilchen:

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F$$

$$\begin{aligned} \blacktriangleright E^{(0)} &= \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \phi_0 | a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k},s} \\ &\longrightarrow 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk k^4 = \frac{V k_F^3}{5\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F, \quad \varepsilon_F \equiv \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (\text{Fermi-Energie}) \end{aligned}$$

► mittlere Energie pro Teilchen:

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F = \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \underbrace{\frac{e^2}{2a_0}}_{13,6 \text{ eV}} \frac{1}{r_s^2} \approx 2,210 \frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{r_s^2}$$

13,6 eV (Bindungsenergie im Wasserstoffgrundzustand)



$$\blacktriangleright E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \vec{q} \neq \vec{0}}} \sum_{s, s'} \frac{4\pi}{\vec{q}^2} \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}', -\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle$$

Korrektur durch das Potenzial

$$\blacktriangleright E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \vec{q} \neq \vec{0}}} \sum_{s, s'} \frac{4\pi}{\vec{q}^2} \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle$$

$$\blacktriangleright \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle = \underbrace{(\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}} \delta_{\vec{k}'-\vec{q}, \vec{k}'})}_{=0 \text{ (da } \vec{q} \neq \vec{0})} - \underbrace{\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}'-\vec{q}, \vec{k}}}_{=\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}'}} \delta_{s', s} n_{\vec{k}, s} n_{\vec{k}', s'}$$

Korrektur durch das Potenzial

$$\blacktriangleright E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \vec{q} \neq \vec{0}}} \sum_{s, s'} \frac{4\pi}{\vec{q}^2} \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}', -\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle$$

$$\blacktriangleright \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}', -\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle = \underbrace{(\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}} \delta_{\vec{k}', -\vec{q}, \vec{k}'})}_{=0 \text{ (da } \vec{q} \neq \vec{0})} - \underbrace{\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}', -\vec{q}, \vec{k}}}_{=\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}'}} \delta_{s', s} n_{\vec{k}, s} n_{\vec{k}', s'}$$

$$\Rightarrow E^{(1)} = -\frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{q} \neq \vec{0}}} \sum_s \frac{4\pi}{\vec{q}^2} n_{\vec{k}, s} n_{\vec{k}+\vec{q}, s}$$



$$\blacktriangleright E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \vec{q} \neq \vec{0}}} \sum_{s, s'} \frac{4\pi}{\vec{q}^2} \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}', -\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle$$

$$\blacktriangleright \langle \phi_0 | a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{k}', -\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{k}', s'} a_{\vec{k}, s} | \phi_0 \rangle = \underbrace{(\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}} \delta_{\vec{k}', -\vec{q}, \vec{k}'})}_{=0 \text{ (da } \vec{q} \neq \vec{0})} - \underbrace{\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}', -\vec{q}, \vec{k}}}_{=\delta_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}'}} \delta_{s', s} n_{\vec{k}, s} n_{\vec{k}', s'}$$

$$\Rightarrow E^{(1)} = -\frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq \vec{0}} \sum_s \frac{4\pi}{\vec{q}^2} n_{\vec{k}, s} n_{\vec{k}+\vec{q}, s}$$

$$\longrightarrow -\frac{4\pi e^2}{2V} 2V^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\vec{k}|) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\vec{q}^2} \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|)$$

- Bei der \vec{q} -Integration brauchen wir $\vec{q} = \vec{0}$ nicht explizit ausschließen, da der Integrand dort endlich ist: $\int d^3 q \frac{1}{\vec{q}^2} \propto \int q^2 dq \frac{1}{q^2} = \int dq 1$.
Der Punkt ist daher für den Wert des Integrals irrelevant.



$$\Rightarrow E^{(1)} = -4\pi e^2 V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\vec{k}|) \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} \theta(k_F - |\vec{k}'|)$$



$$\begin{aligned}\Rightarrow E^{(1)} &= -4\pi e^2 V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\vec{k}|) \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} \theta(k_F - |\vec{k}'|) \\ &= -\frac{e^2 V}{2\pi^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\theta}\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\Rightarrow E^{(1)} &= -4\pi e^2 V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\vec{k}|) \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} \theta(k_F - |\vec{k}'|) \\ &= -\frac{e^2 V}{2\pi^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\theta} \\ &= \dots = -\frac{e^2 V}{4\pi^3} k_F^4 = -\frac{3N}{4\pi} e^2 k_F\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\Rightarrow E^{(1)} &= -4\pi e^2 V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\vec{k}|) \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\vec{k}' - \vec{k})^2} \theta(k_F - |\vec{k}'|) \\ &= -\frac{e^2 V}{2\pi^3} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_{-1}^1 d\cos\theta \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\theta} \\ &= \dots = -\frac{e^2 V}{4\pi^3} k_F^4 = -\frac{3N}{4\pi} e^2 k_F\end{aligned}$$

► mittlere Energie pro Teilchen:

$$\frac{E^{(1)}}{N} = -\frac{3}{4\pi} e^2 k_F = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{0,916}{r_s} \quad \text{„Austauschenergie“}$$

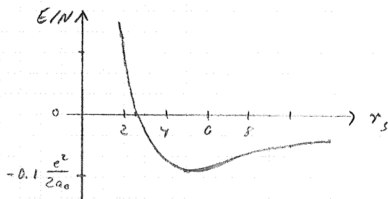
(negativ wegen Vertauschung $\vec{k} \leftrightarrow \vec{k}'$)



► mittlere Energie pro Teilchen:
$$\frac{E^{(0)}+E^{(1)}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{2,210}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right)$$

► mittlere Energie pro Teilchen:
$$\frac{E^{(0)}+E^{(1)}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{2,210}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right)$$

- hohe Dichte (kleine r_s):
 $E^{(0)}$ dominiert → E/N positiv
- niedrige Dichte (große r_s):
 $E^{(1)}$ dominiert → E/N negativ



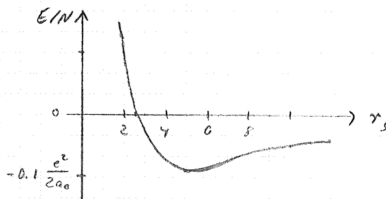
► mittlere Energie pro Teilchen:
$$\frac{E^{(0)}+E^{(1)}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{2,210}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right)$$

- hohe Dichte (kleine r_s):

$E^{(0)}$ dominiert → E/N positiv

- niedrige Dichte (große r_s):

$E^{(1)}$ dominiert → E/N negativ

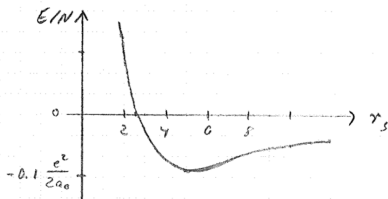


- Minimum mit negativer Energie:

$$\frac{d}{dr_s} \left(\frac{2,210}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right) \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad r_s = 4,83, \quad \frac{E}{N} = -0,095 \frac{e^2}{2a_0} = -1,29 \text{ eV}$$

▶ mittlere Energie pro Teilchen:
$$\frac{E^{(0)}+E^{(1)}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{2,210}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right)$$

- ▶ hohe Dichte (kleine r_s):
 $E^{(0)}$ dominiert $\rightarrow E/N$ positiv
- ▶ niedrige Dichte (große r_s):
 $E^{(1)}$ dominiert $\rightarrow E/N$ negativ



→ Minimum mit negativer Energie:

$$\frac{d}{dr_s} \left(\frac{2,210}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right) \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad r_s = 4,83, \quad \frac{E}{N} = -0,095 \frac{e^2}{2a_0} = -1,29 \text{ eV}$$

▶ empirischer Wert für Natrium: $r_s = 3,96, \quad \frac{E}{N} = -1,13 \text{ eV}$

recht gute Übereinstimmung, obwohl außerhalb des (naiven)
Gültigkeitsbereichs der Störungstheorie!

4.8 Nichtwechselwirkende Bosonen (Spin-0)



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

4.8 Nichtwechselwirkende Bosonen (Spin-0)



► **wichtigster Unterschied zu Fermionen:**

Alle Zustände können beliebig oft besetzt sein.

4.8 Nichtwechselwirkende Bosonen (Spin-0)



- ▶ **wichtigster Unterschied zu Fermionen:**
Alle Zustände können beliebig oft besetzt sein.
- ▶ Sei im Folgenden $|\phi\rangle = |n_{\vec{k}_1}, n_{\vec{k}_2}, \dots\rangle$

4.8 Nichtwechselwirkende Bosonen (Spin-0)

- ▶ **wichtigster Unterschied zu Fermionen:**

Alle Zustände können beliebig oft besetzt sein.

- ▶ Sei im Folgenden $|\phi\rangle = |n_{\vec{k}_1}, n_{\vec{k}_2}, \dots\rangle$

In den Übungen wird gezeigt:

- ▶ **Teilchendichte:** $\langle n(\vec{x}) \rangle = \langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | \phi \rangle = \frac{N}{V} \equiv n$ unabhängig von \vec{x}

4.8 Nichtwechselwirkende Bosonen (Spin-0)



- ▶ **wichtigster Unterschied zu Fermionen:**

Alle Zustände können beliebig oft besetzt sein.

- ▶ Sei im Folgenden $|\phi\rangle = |n_{\vec{k}_1}, n_{\vec{k}_2}, \dots\rangle$

In den Übungen wird gezeigt:

- ▶ **Teilchendichte:** $\langle n(\vec{x}) \rangle = \langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | \phi \rangle = \frac{N}{V} \equiv n$ unabhängig von \vec{x}
- ▶ **Paarverteilungsfunktion:**

$$\begin{aligned} g(\vec{x} - \vec{x}') &= \frac{\langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}') \psi(\vec{x}') \psi(\vec{x}) | \phi \rangle}{\langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | \phi \rangle \langle \phi | \psi^\dagger(\vec{x}') \psi(\vec{x}') | \phi \rangle} \\ &= 1 + \frac{1}{N^2} \left| \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} n_{\vec{k}} \right|^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - 1) \end{aligned}$$



$$g(\vec{x} - \vec{x}') = 1 + \frac{1}{N^2} \left| \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} n_{\vec{k}} \right|^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - 1)$$



$$g(\vec{x} - \vec{x}') = 1 + \frac{1}{N^2} \left| \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} n_{\vec{k}} \right|^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - 1)$$

► Beispiel 1:

Alle Teilchen im gleichen Zustand $|\vec{k}_0\rangle$: $n_{\vec{k}} = N \delta_{\vec{k}, \vec{k}_0}$

(z.B. $|\vec{k}_0 = \vec{0}\rangle \hat{=}$ Grundzustand bei $T = 0$, „Bose-Einstein-Kondensat“)



$$g(\vec{x} - \vec{x}') = 1 + \frac{1}{N^2} \left| \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} n_{\vec{k}} \right|^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - 1)$$

► Beispiel 1:

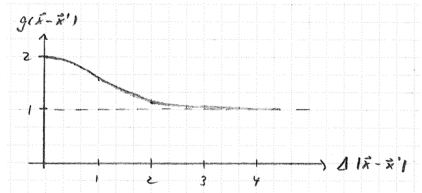
Alle Teilchen im gleichen Zustand $|\vec{k}_0\rangle$: $n_{\vec{k}} = N \delta_{\vec{k}, \vec{k}_0}$

(z.B. $|\vec{k}_0 = \vec{0}\rangle \hat{=}$ Grundzustand bei $T = 0$, „Bose-Einstein-Kondensat“)

$$\Rightarrow g(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{N-1}{N} \quad \text{vollkommen unkorreliert}$$

- Beispiel 2: Gauß-förmige Verteilung: $n_{\vec{k}} \propto e^{-(\vec{k}-\vec{k}_0)^2/\Delta^2}$
 $\Rightarrow g(\vec{x} - \vec{x}') = 1 + e^{-\frac{\Delta^2}{2}(\vec{x}-\vec{x}')^2}, \quad g(0) = 2$

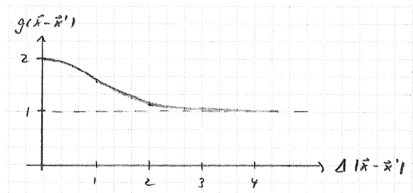
→ Bei kleinen Abständen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit erhöht.





- Beispiel 2: Gauß-förmige Verteilung: $n_{\vec{k}} \propto e^{-(\vec{k}-\vec{k}_0)^2/\Delta^2}$
 $\Rightarrow g(\vec{x}-\vec{x}') = 1 + e^{-\frac{\Delta^2}{2}(\vec{x}-\vec{x}')^2}, \quad g(0) = 2$

→ Bei kleinen Abständen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit erhöht.



- thermische Verteilung:

$$n_{\vec{k}} \propto \frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/k_B T} - 1} \quad E_{\vec{k}} \gg k_B T \quad \approx \quad e^{-\frac{E_{\vec{k}}}{k_B T}} = e^{-\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m k_B T}} \quad \Rightarrow \quad \Delta^2 = \frac{2m k_B T}{\hbar^2}$$

4.9 Schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-Gase (Bogoliubov-Theorie)



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

4.9 Schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-Gase (Bogoliubov-Theorie)

- ▶ Hamilton-Operator in Impulsdarstellung:

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

4.9 Schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-Gase (Bogoliubov-Theorie)

- ▶ Hamilton-Operator in Impulsdarstellung:

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

- ▶ Grundzustand für $\tilde{V} = 0$ (bei $T = 0$): alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$

4.9 Schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-Gase (Bogoliubov-Theorie)



- ▶ Hamilton-Operator in Impulsdarstellung:

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

- ▶ Grundzustand für $\tilde{V} = 0$ (bei $T = 0$): alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$
- ▶ tiefe Temperaturen, schwaches Potenzial:

- ▶ fast alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$: $\langle \phi | a_0^\dagger a_0 | \phi \rangle = N_0$, $\frac{N - N_0}{N} \ll 1$

4.9 Schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-Gase (Bogoliubov-Theorie)



- ▶ Hamilton-Operator in Impulsdarstellung:

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

- ▶ Grundzustand für $\tilde{V} = 0$ (bei $T = 0$): alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$
- ▶ tiefe Temperaturen, schwaches Potenzial:
 - ▶ fast alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$: $\langle \phi | a_0^\dagger a_0 | \phi \rangle = N_0$, $\frac{N - N_0}{N} \ll 1$
 - Wechselwirkungen zwischen zwei Teilchen in angeregten Zuständen können vernachlässigt werden.

4.9 Schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-Gase (Bogoliubov-Theorie)

- ▶ Hamilton-Operator in Impulsdarstellung:

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

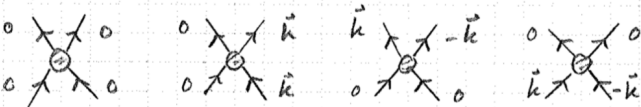
- ▶ Grundzustand für $\tilde{V} = 0$ (bei $T = 0$): alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$
- ▶ tiefe Temperaturen, schwaches Potenzial:
 - ▶ fast alle Teilchen im Zustand $|\vec{k} = \vec{0}\rangle$: $\langle \phi | a_0^\dagger a_0 | \phi \rangle = N_0$, $\frac{N - N_0}{N} \ll 1$
 - Wechselwirkungen zwischen zwei Teilchen in angeregten Zuständen können vernachlässigt werden.
 - Betrachte nur Wechselwirkungsterme mit mindestens zwei Indizes $\vec{k} = \vec{0}$,



$$\rightarrow H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

$$\approx \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \tilde{V}(\vec{0}) a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (2\tilde{V}(\vec{0}) + \tilde{V}(\vec{k}) + \tilde{V}(-\vec{k})) a_0^\dagger a_0 a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \right. \\ \left. + \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$

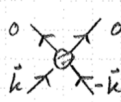
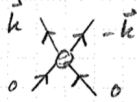
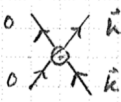
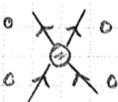




$$\rightarrow H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

$$\approx \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \tilde{V}(\vec{0}) a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (2\tilde{V}(\vec{0}) + \tilde{V}(\vec{k}) + \tilde{V}(-\vec{k})) a_0^\dagger a_0 a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \right. \\ \left. + \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$



► spiegelsymmetrisches Potenzial: $V(\vec{x}) = V(-\vec{x}) \Leftrightarrow \tilde{V}(\vec{k}) = \tilde{V}(-\vec{k})$

- ▶ makroskopische Teilchenzahl im Kondensat: $N_0 \sim 10^{23}$

- ▶ makroskopische Teilchenzahl im Kondensat: $N_0 \sim 10^{23}$
- ▶ physikalische Erwartung:
Ein Teilchen mehr oder weniger im Kondensat sollte die Eigenschaften des Systems nicht merklich ändern.

- ▶ makroskopische Teilchenzahl im Kondensat: $N_0 \sim 10^{23}$
- ▶ physikalische Erwartung:
Ein Teilchen mehr oder weniger im Kondensat sollte die Eigenschaften des Systems nicht merklich ändern.

$$a_0 |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle$$

$$a_0^\dagger |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0 + 1} |N_0, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle$$

- ▶ makroskopische Teilchenzahl im Kondensat: $N_0 \sim 10^{23}$
- ▶ physikalische Erwartung:
Ein Teilchen mehr oder weniger im Kondensat sollte die Eigenschaften des Systems nicht merklich ändern.

$$a_0 |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle$$

$$a_0^\dagger |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0 + 1} |N_0, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle$$

- ▶ Das entspricht einer Ersetzung von Operatoren durch c-Zahlen:

$$a_0 \rightarrow \sqrt{N_0}, \quad a_0^\dagger \rightarrow \sqrt{N_0} \quad \text{„Bogoliubov-Ersetzung“}$$

- ▶ makroskopische Teilchenzahl im Kondensat: $N_0 \sim 10^{23}$
- ▶ physikalische Erwartung:
Ein Teilchen mehr oder weniger im Kondensat sollte die Eigenschaften des Systems nicht merklich ändern.

$$a_0 |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle$$

$$a_0^\dagger |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0 + 1} |N_0, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, \dots\rangle$$

- ▶ Das entspricht einer Ersetzung von Operatoren durch c-Zahlen:

$$a_0 \rightarrow \sqrt{N_0}, \quad a_0^\dagger \rightarrow \sqrt{N_0} \quad \text{„Bogoliubov-Ersetzung“}$$

- ▶ formale Realisierung durch „kohärente Zustände“

= Zustände mit unbestimmter Besetzungszahl $\phi = \prod_{\vec{k}} f_{\vec{k}}(a_{\vec{k}}^\dagger) |0\rangle$

z.B. $f_0(a_0^\dagger) = e^{\alpha a_0^\dagger} \Rightarrow a_0 |\phi\rangle = \alpha |\phi\rangle$



► Bogoliubov-Ersetzung im Hamilton-Operator:

$$H \approx \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N_0^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0})$$
$$+ \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (\tilde{V}(\vec{0}) + \tilde{V}(\vec{k})) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$



► Bogoliubov-Ersetzung im Hamilton-Operator:

$$H \approx \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N_0^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0}) \\ + \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (\tilde{V}(\vec{0}) + \tilde{V}(\vec{k})) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$

► $N_0 = N - \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$



► Bogoliubov-Ersetzung im Hamilton-Operator:

$$H \approx \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N_0^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0}) \\ + \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (\tilde{V}(\vec{0}) + \tilde{V}(\vec{k})) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$

► $N_0 = N - \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$

Vernachlässige wieder Terme mit mehr als zwei Operatoren für $\vec{k} \neq 0$

$$\Rightarrow N_0^2 \approx N^2 - 2N \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}, \quad \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \dots \approx \frac{N}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \dots$$



► Bogoliubov-Ersetzung im Hamilton-Operator:

$$H \approx \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N_0^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0}) \\ + \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ (\tilde{V}(\vec{0}) + \tilde{V}(\vec{k})) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$

► $N_0 = N - \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$

Vernachlässige wieder Terme mit mehr als zwei Operatoren für $\vec{k} \neq 0$

$$\Rightarrow N_0^2 \approx N^2 - 2N \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}, \quad \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \dots \approx \frac{N}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \dots$$

$$\Rightarrow H \approx \frac{N^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0}) + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}(\vec{k}) \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{N}{2V} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right\}$$



▶ $H \approx H_0 + H_1 + H'_1$

▶ $H_0 = \frac{N^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0})$

konstanter Beitrag zur Energie

▶ $H_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}(\vec{k}) \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$

diagonal in der Impulsbasis

▶ $H'_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{N}{2V} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}})$

nicht diagonal in der Impulsbasis



- ▶ $H \approx H_0 + H_1 + H'_1$
 - ▶ $H_0 = \frac{N^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0})$ konstanter Beitrag zur Energie
 - ▶ $H_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}(\vec{k}) \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$ diagonal in der Impulsbasis
 - ▶ $H'_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{N}{2V} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}})$ nicht diagonal in der Impulsbasis
- ▶ **Störungstheorie:** $\langle \phi_0 | H'_1 | \phi_0 \rangle = 0$
(mit dem nichtwechselwirkenden Grundzustand $|\phi_0\rangle = |N_0 = N, 0, 0, 0, \dots\rangle$)



- ▶ $H \approx H_0 + H_1 + H'_1$
 - ▶ $H_0 = \frac{N^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0})$ konstanter Beitrag zur Energie
 - ▶ $H_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}(\vec{k}) \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$ diagonal in der Impulsbasis
 - ▶ $H'_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{N}{2V} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}})$ nicht diagonal in der Impulsbasis
- ▶ **Störungstheorie:** $\langle \phi_0 | H'_1 | \phi_0 \rangle = 0$
(mit dem nichtwechselwirkenden Grundzustand $|\phi_0\rangle = |N_0 = N, 0, 0, 0, \dots\rangle$)
aber: Störungstheorie inkonsistent zur Bogoliubov-Ersetzung,
die von einem kohärenten Zustand ausgeht!



- ▶ $H \approx H_0 + H_1 + H'_1$
 - ▶ $H_0 = \frac{N^2}{2V} \tilde{V}(\vec{0})$ konstanter Beitrag zur Energie
 - ▶ $H_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}(\vec{k}) \right) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$ diagonal in der Impulsbasis
 - ▶ $H'_1 = \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{N}{2V} \tilde{V}(\vec{k}) (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}})$ nicht diagonal in der Impulsbasis
 - ▶ **Störungstheorie:** $\langle \phi_0 | H'_1 | \phi_0 \rangle = 0$
(mit dem nichtwechselwirkenden Grundzustand $|\phi_0\rangle = |N_0 = N, 0, 0, 0, \dots\rangle$)
aber: Störungstheorie inkonsistent zur Bogoliubov-Ersetzung,
die von einem kohärenten Zustand ausgeht!
- exakte Diagonalisierung des (genäherten) Hamilton-Operators