

Zur Superfluidität eines Bose-Systems

Von WOLFGANG WELLER

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Leipzig
(Z. Naturforsch. **18 a**, 79—85 [1963]; eingegangen am 26. September 1962)

Es wird ein BOSE-System mit einem einfachen abstoßenden Wechselwirkungspotential mit Hilfe von thermodynamischen GREENSchen Funktionen betrachtet. Das Kondensat wird nach der Methode von BOGOLJUBOV abgetrennt. Dabei werden die Fälle behandelt, bei denen die Teilchen des Kondensats in gleichförmiger bzw. in wirbelförmiger Bewegung sind. Bei der wirbelförmigen Bewegung erweist sich die Zirkulation als quantisiert.

1. Einleitung

Flüssiges He⁴ zeigt die Erscheinung der Superfluidität bei Abkühlung unter den „λ-Punkt“ von 2,17 °K. Für die wechselwirkenden He⁴-Atome liegt dabei eine Kondensation vor, die der bekannten BOSE-EINSTEIN-Kondensation des idealen BOSE-Gases ähnlich ist. Ein Einteilchenzustand ist mit einer dem Volumen proportionalen Zahl von Teilchen besetzt und bildet das Kondensat. Wenn die Flüssigkeit ruht, dann entspricht der Kondensatzzustand ruhenden Teilchen. Bewegt sich die Flüssigkeit als Ganzes, dann muß der Kondensatzzustand bewegten Teilchen entsprechen. Die Bewegung des Kondensats ist von Anregungen (Phonenen) begleitet.

Diese Verhältnisse sollen mit Hilfe von thermodynamischen GREENSchen Funktionen für ein einfaches wechselwirkendes BOSE-System untersucht werden. Das Wechselwirkungspotential soll abstoßend sein. Wir betrachten ein δ-förmiges Potential, das dem von HUANG und YANG¹ eingeführten Pseudopotential entspricht.

Im 2. Abschnitt wird die Methode von BOGOLJUBOV² zur Abtrennung des Kondensats auf bewegte Kondensatzzustände angewandt. Die außerhalb des Kondensats befindlichen Teilchen werden durch thermodynamische GREENSche Funktionen beschrieben³. Es ergibt sich ein Gleichungssystem für die GREENSchen Funktionen, das dem von GORKOV⁴ für die Supraleitung benutzten ähnlich ist. Durch die Verwendung thermodynamischer GREENScher Funk-

tionen sind die Rechnungen auch für Temperaturen $T > 0$ gültig. Zur Vereinfachung wird immer angenommen, daß sich die überwiegende Mehrheit der Teilchen im Kondensat befindet. Die Überlegungen sind folglich auf Temperaturen beschränkt, die wesentlich unterhalb des „λ-Punktes“ liegen.

Im 3. Abschnitt betrachten wir ein gleichförmig bewegtes Kondensat und berechnen die Verteilung der Teilchen auf die Zustände. Daraus ergibt sich die Temperaturabhängigkeit des Rückflusses. Bei $T = 0$ bewegen sich alle Teilchen im Mittel ebenso wie das Kondensat, bei $T > 0$ setzt ein Rückfluß ein.

Im 4. Abschnitt wird ein wirbelförmig bewegtes Kondensat behandelt. Dabei zeigt sich in Übereinstimmung mit den Ideen von ONSAGER⁵ und FEYNMAN⁶ und den Experimenten von VINEN⁷, daß die Zirkulation quantisiert ist:

$$\oint \mathbf{v} d\mathbf{r} = s h/m, \quad (s \text{ ganzzahlig}). \quad (1.1)$$

\mathbf{v} ist die Geschwindigkeit der Teilchen, m die Masse eines Teilchens. Die quantisierte Wirbelbewegung im BOSE-System wurde kürzlich von GROSS⁸ mit Hilfe kanonischer Transformationen für $T = 0$ behandelt. Unsere Ergebnisse stimmen (im Grenzfall $T \rightarrow 0$) mit den dort erhaltenen überein.

Die Zustände mit bewegtem Kondensat müssen als metastabile Zustände betrachtet werden. Bei den thermodynamischen Mittelungen für die GREENSchen Funktionen muß darauf Rücksicht genommen werden; die Mittelungen dürfen nicht über die vollständige große kanonische Gesamtheit erfolgen.

¹ K. HUANG u. C. N. YANG, Phys. Rev. **105**, 767 [1957].

² N. N. BOGOLJUBOV, Phys. Abhandl. SU **6**, 1, 118, 229 [1962].

³ GREENSche Funktionen für $T = 0$ wurden von S. T. BELJAEV, J. Exp. Theor. Phys., USSR **34**, 417 [1958] und von N. M. HUGENHOLTZ u. D. PINES, Phys. Rev. **116**, 489 [1959] für das wechselwirkende BOSE-System verwandt.

⁴ L. P. GORKOV, J. Exp. Theor. Phys., USSR **34**, 735 [1958].

⁵ L. ONSAGER, Nuovo Cim. **6**, Suppl. **2**, 249 [1949].

⁶ R. P. FEYNMAN, Progr. Low Temp. Phys. Vol. **1**, 17 (Amsterdam) 1955.

⁷ W. F. VINEN, Physica Suppl. **24**, 13 [1958]; Progr. Low Temp. Phys. Vol. **3**, 1 (Amsterdam) 1961.

⁸ E. P. GROSS, Nuovo Cim. **20**, 454 [1961].



2. Bewegungsgleichungen

Wir benutzen den HAMILTON-Operator

$$\begin{aligned} H = & \int \Psi^+(\mathbf{r}) h_0 \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ & + \frac{1}{2} \int \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi^+(\mathbf{r}_1) \Psi^+(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2, \\ h_0 = & -(\hbar^2/2m) \Delta - \mu. \end{aligned} \quad (2.1)$$

$\Psi(\mathbf{r})$ ist das quantisierte Feld der spinlosen Bose-Teilchen, μ ist das chemische Potential. $\Phi(\mathbf{r})$ ist das abstoßende Wechselwirkungspotential, für das wir zur Vereinfachung ein δ -förmiges Potential ansetzen,

$$\Phi(\mathbf{r}) = V \delta(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

Ein solches δ -Potential entspricht dem von HUANG und YANG¹ eingeführten Pseudopotential. Für ein Bose-System, dessen Teilchen aus „harten Kugeln“ bestehen, erhalten diese Autoren

$$V = 8\pi \alpha \hbar^2/m; \quad \alpha \text{ ist der Kugelradius.} \quad (2.2a)$$

Wir gehen mit Ψ in die HEISENBERG-Darstellung und entwickeln das Bose-Feld nach einem vollständigen orthogonalen und normierten System von Zuständen φ_λ .

$$\Psi(1) = \sum_\lambda a_\lambda(t_1) \varphi_\lambda(\mathbf{r}_1); \quad 1 \equiv (\mathbf{r}_1 t_1). \quad (2.3)$$

Wir legen das Kondensat in den Zustand $\varphi_0(\mathbf{r})$. In den folgenden Abschnitten soll φ_0 ein gleichförmig bewegtes und ein wirbelförmig bewegtes Kondensat beschreiben. Wir erwarten dabei die folgenden Verhältnisse: Die Bewegung des Kondensats ist von Anregungen (Phononen) begleitet. Das Bose-System befindet sich dabei in einem metastabilen Zustand. Betrachten wir den Übergang $T \rightarrow 0$. Dann verringert sich die Zahl der angeregten Phononen, das Kondensat bleibt aber in Bewegung. Das System geht beim Übergang $T \rightarrow 0$ nicht in den Grundzustand mit ruhendem Kondensat über. Bei der thermodynamischen Mittelung eines Operators

$$\langle O \rangle \equiv \frac{\sum_r (C_r | O e^{-\beta H} | C_r)}{\sum_r (C_r | e^{-\beta H} | C_r)}, \quad (2.4)$$

($\beta = 1/\kappa T$, κ BOLTZMANN-Konstante) muß deshalb die Summe über die Vielteilenzustände C_r des Bose-Systems eingeschränkt werden, d. h. der Operator O darf nicht über die vollständige große kanonische Gesamtheit gemittelt werden. Es kommen nur

der „metastabile Grundzustand“ (bewegtes Kondensat mit begleitenden Phononen) und benachbarte Phononenanregungen in Frage. Diese Phononenanregungen werden alle positive Energie haben. Alle anderen Zustände, z. B. der „wirkliche Grundzustand“ oder Zustände mit anderen Bewegungen des Kondensats, werden bei der thermodynamischen Mittelung fortgelassen. Der Weg zu diesen Zuständen führt über komplizierte Vielteilchenanregungen, die den Umbau des betrachteten metastabilen Zustandes in diese Zustände bewirken. Wir nehmen an, daß diese Wege dem System nicht zugänglich sind, und diskutieren hier nicht die Frage nach der Stabilität der betrachteten Zustände.

Bei der Abtrennung des Kondensats gehen wir ähnlich vor wie BOGOLJUBOV². In Mittelwerten bzw. Quasimittelwerten behandeln wir a_0 als c -Zahl,

$$\langle a_0^\dagger a_0 \rangle = \langle a_0^\dagger \rangle \langle a_0 \rangle = N_0,$$

und setzen

$$\begin{aligned} \Psi(1) &= \varphi_0(\mathbf{r}_1) a_0 + \Psi'(1) = \varphi_0(\mathbf{r}_1) VN_0 + \Psi'(1), \\ \Psi'(1) &= \sum_\lambda' a_\lambda(t_1) \varphi_\lambda(\mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (2.5)$$

N_0 ist die Zahl der Teilchen im Kondensat. Der Strich am Summenzeichen bedeutet Summation über $\lambda \neq 0$. Wir stellen zunächst die Bewegungsgleichung für das Kondensat auf.

$$\begin{aligned} i\hbar(\partial/\partial t_1) a_0 &= a_0 H - H a_0 \\ &= \int \varphi_0^*(\mathbf{r}) h_0 \Psi(\mathbf{r} t_1) d^3\mathbf{r} \\ &\quad + V \int \varphi_0^*(\mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1) d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Die Zahl der Teilchen im Kondensat soll zeitlich unveränderlich sein.

$$\begin{aligned} 0 &= i\hbar(\partial/\partial t_1) \langle a_0 \rangle \\ &= \int \varphi_0^*(\mathbf{r}) h_0 \langle \Psi(\mathbf{r} t_1) \rangle d^3\mathbf{r} \\ &\quad + V \int \varphi_0^*(\mathbf{r}) \langle \Psi^+(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1) \rangle d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Nach (2.5) schreiben wir für die Mittelwerte

$$\langle \Psi(\mathbf{r} t_1) \rangle = f(\mathbf{r}), \quad (2.8a)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi^+(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1) \rangle &= f^*(\mathbf{r}) f^2(\mathbf{r}) + f^*(\mathbf{r}) \langle \Psi'(\mathbf{r} t_1) \Psi'(\mathbf{r} t_1) \rangle \\ &\quad + 2 f(\mathbf{r}) \langle \Psi'^+(\mathbf{r} t_1) \Psi'(\mathbf{r} t_1) \rangle. \end{aligned} \quad (2.8b)$$

wobei $f(\mathbf{r}) = \varphi_0(\mathbf{r}) \sqrt{N_0}$.

Da wir annehmen, daß sich die überwiegende Mehrheit der Teilchen im Kondensat befindet, können wir die beiden letzten Terme auf der rechten

Seite von (2.8b) gegen den ersten vernachlässigen. Aus (2.7) ergibt sich dann für $f(\mathbf{r})$ die Bestimmungsgleichung

$$\{h_0 + V f^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\} f(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.9)$$

Für die übrigen Funktionen $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ verwenden wir die normierten Eigenfunktionen von

$$\{h_0 + V f^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r})\} \varphi_\lambda(\mathbf{r}) = \varepsilon_\lambda \varphi_\lambda(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

$(\lambda \neq 0).$

Wir behandeln nun die außerhalb des Kondensats befindlichen Teilchen mit Hilfe retardierter und avancierter GREENScher Funktionen, die in folgender Weise (für Bose-Statistik) definiert sind⁹:

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_{r,a}(t_1 t_2) &\equiv \langle \langle A(t_1); B(t_2) \rangle \rangle \\ &= -i \frac{\Theta(t_1 - t_2)}{i \Theta(t_2 - t_1)} \langle A(t_1) B(t_2) - B(t_2) A(t_1) \rangle, \\ \Theta(t) &= \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0, \\ 0 & \text{für } t < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.11)$$

A und B sind beliebige Operatoren. Die thermodynamische Mittelung erfolgt im obigen eingeschränkten Sinne.

Für die zeitliche FOURIER-Transformierte

$$\mathfrak{G}_{r,a}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{G}_{r,a}(t) e^{i\omega t} dt, \quad (t = t_1 - t_2), \quad (2.12)$$

gilt die Spektraldarstellung

$$\mathfrak{G}_{r,a}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\beta \hbar \omega'} - 1) I(\omega') \frac{d\omega'}{\omega - \omega' \pm i\varepsilon}. \quad (2.13)$$

$I(\omega)$ ist die Spektralfunktion. Diese Spektraldarstellung ist auch für die hier verwendete eingeschränkte thermodynamische Mittelung gültig¹⁰. $\mathfrak{G}(\omega)$ lässt sich in die komplexe ω -Ebene fortsetzen. Die retardierte (avancierte) GREENsche Funktion kann somit als Grenzwert einer analytischen Funktion für reelles ω von der oberen (unteren) Halbebene her aufgefaßt werden. Wir werden deshalb die Indizes r, a im folgenden fortlassen.

Die Kenntnis der GREENschen Funktion gestattet es auch, die Mittelwerte von einfachen Operatorprodukten zu berechnen. Aus der Spektraldarstellung folgt⁹

$$\langle B(t_2) A(t_1) \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathfrak{G}(\omega + i\varepsilon) - \mathfrak{G}(\omega - i\varepsilon)}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} e^{-i\omega(t_1 - t_2)} d\omega; \quad (\varepsilon \rightarrow +0). \quad (2.14)$$

Wir stellen nun die Bewegungsgleichungen für die GREENschen Funktionen auf. Entsprechend der Definition (2.11) gilt

$$\begin{aligned} i\hbar(\partial/\partial t_1) \langle \langle \Psi'(1); \Psi''(2) \rangle \rangle &= \hbar \delta(t_1 - t_2) \langle \Psi'(1) \Psi''(2) - \Psi''(2) \Psi'(1) \rangle \\ &\quad + \langle \langle (\Psi'(1) H - H \Psi'(1)); \Psi''(2) \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die Berechnung der Kommutatoren ergibt

$$\begin{aligned} i\hbar(\partial/\partial t_1) \langle \langle \Psi'(1); \Psi''(2) \rangle \rangle &= \hbar \delta(t_1 - t_2) \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) + \int \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}) h_0(\mathbf{r}) \langle \langle \Psi(\mathbf{r} t_1); \Psi''(2) \rangle \rangle d^3\mathbf{r} \\ &\quad + V \int \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}) \langle \langle \Psi^+(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1); \Psi''(2) \rangle \rangle d^3\mathbf{r}, \quad (2.16) \\ \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) &= \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\lambda}^*(\mathbf{r}_2). \end{aligned}$$

Für die Zweiteilchenfunktion auf der rechten Seite von (2.16) erhalten wir mit Hilfe von (2.5)

$$\begin{aligned} \langle \langle \Psi^+(\mathbf{r} t_1) \Psi(\mathbf{r} t_1); \Psi''(2) \rangle \rangle &= 2 f^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \langle \langle \Psi'(\mathbf{r} t_1); \Psi''(2) \rangle \rangle \\ &\quad + f(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \langle \langle \Psi''(\mathbf{r} t_1); \Psi''(2) \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (2.17)$$

⁹ Vgl. z. B. D. N. ZUBAREV, Uspechi Fiz. Nauk **71**, 71 [1960]; deutsche Übers. in Fortschr. Phys. **9**, 275 [1961].

¹⁰ Vgl. die analoge Diskussion für den Fall der Supraleitung; W. WELLER, phys. stat. sol. **2**, 1342 [1962].

wobei wieder Terme, die weniger Kondensatanteile enthalten, vernachlässigt worden sind. Damit bekommen wir

$$(i\hbar(\partial/\partial t_1) - h_0(\mathbf{r}_1) - V f^*(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_1)) G(1, 2) = \hbar \delta(t_1 - t_2) \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) + V \int \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}) f^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) G(\mathbf{r} t_1, 2) d^3 \mathbf{r} + V \int \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) F^*(\mathbf{r} t_1, 2) d^3 \mathbf{r}, \quad (2.18)$$

wobei $G(1, 2) = \langle \langle \Psi'(1); \Psi''(2) \rangle \rangle$, $F^*(1, 2) = \langle \langle \Psi'^*(1); \Psi''(2) \rangle \rangle$.

Die GREENSche Funktion $F^*(1, 2)$ ist als Quasimittelwert im Sinne BOGOLJUBOV² aufzufassen. In analoger Weise ergibt sich die Bewegungsgleichung für F^* .

$$(i\hbar(\partial/\partial t_1) + h_0(\mathbf{r}_1) + V f^*(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_1)) F^*(1, 2) = -V \int \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}) f^*(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) F^*(\mathbf{r} t_1, 2) d^3 \mathbf{r} - V \int \tilde{\delta}(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}) f^*(\mathbf{r}) f^*(\mathbf{r}) G(\mathbf{r} t_1, 2) d^3 \mathbf{r}. \quad (2.19)$$

Durch die gekoppelten Gln. (2.18) und (2.19) ist das Verhalten der Teilchen außerhalb des Kondensats bestimmt. Für ruhendes Kondensat und $T=0$ sind diese Gleichungen äquivalent den Gleichungen für die GREENSchen Funktionen von BELJAEV³ und HUGENHOLTZ und PINES³, wenn man dort die Selbstenergieterme in erster Ordnung berechnet.

3. Gleichförmig bewegtes Kondensat

Wir betrachten ein gleichförmig bewegtes Kondensat mit Impuls $\hbar \mathbf{k}_0$ pro Teilchen. Die Beziehungen (2.9) und (2.10) liefern dann

$$f(\mathbf{r}) = \sqrt{\varrho_0} \exp\{i \mathbf{k}_0 \mathbf{r}\}, \quad (\hbar^2 \mathbf{k}_0^2 / 2m) - \mu + V \varrho_0 = 0 \quad (3.1)$$

$$\text{und} \quad \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{\Omega}) \exp\{i \mathbf{k} \mathbf{r}\}; \quad (\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_0). \quad (3.2)$$

Ω ist das Quantisierungsvolumen, $\varrho_0 = N_0/\Omega$.

Für die GREENSchen Funktionen machen wir den Ansatz

$$\begin{aligned} G(1, 2) &= \exp\{i \mathbf{k}_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\} \hat{G}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t_1 - t_2), \\ F^*(1, 2) &= \exp\{-i \mathbf{k}_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\} \hat{F}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t_1 - t_2) \end{aligned} \quad (3.3)$$

und entwickeln

$$\hat{G}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t_1 - t_2) = \sum'_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{G}(\mathbf{k} \omega) \frac{1}{\Omega} \exp\{i \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - i \omega t\}, \quad (3.4)$$

$$\hat{F}^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t_1 - t_2) = \sum'_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \hat{F}^*(\mathbf{k} \omega) \frac{1}{\Omega} \exp\{i \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - i \omega t\}; \quad (t = t_1 - t_2).$$

Der Strich am Summenzeichen bedeutet Summation über $\mathbf{k} \neq 0$. Einsetzen in die Bewegungsgleichungen (2.18) und (2.19) liefert

$$\begin{aligned} (\hbar \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^+) \hat{G}(\mathbf{k} \omega) &= \hbar/2\pi + V \varrho_0 \hat{F}^*(\mathbf{k} \omega), \quad (\hbar \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-) \hat{F}^*(\mathbf{k} \omega) = -V \varrho_0 \hat{G}(\mathbf{k} \omega), \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\pm} &= (\hbar^2/2m) (\mathbf{k} \pm \mathbf{k}_0)^2 - \mu + 2V \varrho_0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Die Auflösung von (3.5) ergibt in Übereinstimmung mit der Spektraldarstellung (2.13)

$$\hat{G}(\mathbf{k} \omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\hbar \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-}{(\hbar \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-)(\hbar \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^+) + V^2 \varrho_0^2} \quad (\mathbf{k} \neq 0). \quad (3.6)$$

Wir berechnen noch mit Hilfe von (2.14) die Verteilungsfunktion

$$n_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} = \langle a_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0}^\dagger a_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} \rangle = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon) - \hat{G}(\mathbf{k}, \omega - i\varepsilon)}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} e^{-i\omega t} d\omega \quad (t \rightarrow +0). \quad (3.7)$$

Den Integrationsweg können wir durch einen Halbkreis in der unteren Halbebene ergänzen und das Integral mit dem Residuensatz berechnen. Die Nullstellen des Nenners $\exp(\beta \hbar \omega) - 1$ geben keinen Beitrag.

$$n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(e^{\beta \varepsilon_1} - 1)} + \frac{\varepsilon_2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-}{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(e^{\beta \varepsilon_2} - 1)}. \quad (3.8)$$

ε_1 und ε_2 sind die Pole der GREENSchen Funktion \hat{G} .

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^+ - \varepsilon_{\mathbf{k}}^-}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^+ + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-}{2}\right)^2 - V^2 \varrho_0^2} = a \pm b. \quad (3.9)$$

Die Forderung, daß $n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0} \geq 0$ sein muß, führt auf die Bedingung $|a| < b$, die ausgeschrieben lautet

$$(\hbar^2/m) \mathbf{k}_0^2 < V \varrho_0 \quad (\text{s. Anm. } 11). \quad (3.10)$$

Die hierdurch definierte kritische Geschwindigkeit ist bekanntlich zu hoch, da schon bei wesentlich geringeren Geschwindigkeiten turbulente Bewegung einsetzt.

Das Anregungsspektrum (Phononenspektrum) unseres Systems wird durch den positiven Pol ε_1 der GREENSchen Funktion gegeben.

$$\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2 \mathbf{k} \mathbf{k}_0}{m} + \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}\right)^2 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} 2 V \varrho_0}. \quad (3.11)$$

Für $\mathbf{k}_0 = 0$ reduziert sich das auf das bekannte Anregungsspektrum von BOGOLJUBOV¹². Die hier benutzten Methoden sind offenbar nur anwendbar bei abstoßendem Wechselwirkungspotential ($V > 0$), andernfalls treten komplexe Anregungsenergien auf, die den Analytizitätseigenschaften der GREENSchen Funktionen widersprechen und auf Instabilitäten hinweisen¹³.

Die Verteilungsfunktion $n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}$ ist im allgemeinen nicht symmetrisch beim Übergang $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$.

Wir teilen auf

$$n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0} = n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(1)} + n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(2)}, \quad (3.12)$$

wo $n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(1)}$ der symmetrische und $n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(2)}$ der antisymmetrische Anteil ist. Für den letzteren ergibt sich

$$n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{e^{\beta(a+b)} - 1} - \frac{1}{e^{\beta(-a+b)} - 1} \right). \quad (3.13)$$

Für sehr niedrige Temperaturen erhalten wir

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(2)} &\approx -e^{-\beta b} \Im \sin(\beta a) \\ &= -\exp \left[-\beta \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}\right)^2 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{m} V \varrho_0} \right] \\ &\quad \cdot \Im \sin(\beta \hbar^2 \mathbf{k} \mathbf{k}_0 / m). \end{aligned} \quad (3.14)$$

¹¹ Diese Bedingung wurde von N. N. BOGOLJUBOV, V. V. TOLMACHOV u. D. V. SCHIRKOV, Fortschr. Phys. **6**, 605 [1958] auf anderem Wege aus der Forderung nach positiver Anregungsenergie abgeleitet.

Die Verteilungsfunktion ist für $T=0$ symmetrisch ($n_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_0}^{(2)}=0$), es gibt dann keinen Rückfluß. Für $T>0$ ergibt sich ein Rückfluß der Teilchen, da zu \mathbf{k}_0 antiparallele Impulsanteile bevorzugt werden. Der Gesamtimpuls des Systems ist folglich $N \hbar \mathbf{k}_0$ für $T=0$ (N Zahl der Teilchen), für höhere Temperaturen verringert er sich.

4. Wirbelförmig bewegtes Kondensat

Wir betrachten jetzt ein wirbelförmig bewegtes Kondensat. Die Wellenfunktion für das Kondensat ist wieder durch die Beziehung (2.9) bestimmt.

$$\{ -(\hbar^2/2m) \Delta - \mu + V |f(\mathbf{r})|^2 \} f(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.1)$$

Wir benutzen Zylinderkoordinaten r, z, φ . f wird als von z unabhängig betrachtet, da sich das Kondensat nicht in z -Richtung bewegen soll. Es soll nun zunächst die φ -Abhängigkeit von f untersucht werden. Der HAMILTON-Operator (2.1) ist gegenüber Drehungen um die z -Achse und Verschiebungen längs der z -Achse invariant, folglich gilt

$$\langle \Psi^+(\mathbf{r} z \varphi_1 t) \Psi(\mathbf{r} z \varphi_2 t) \rangle = K(r, \varphi_1 - \varphi_2). \quad (4.2)$$

Wir vernachlässigen auch hier die Beiträge der Teilchen außerhalb des Kondensats gegen den Beitrag der Kondensatteilchen und erhalten

$$\langle \Psi^+(\mathbf{r}_1 t) \Psi(\mathbf{r}_2 t) \rangle = f^*(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_2). \quad (4.3)$$

Gl. (4.3) ist wegen des Prinzips der verschwindenden Korrelation² auch unabhängig von dieser Näherung richtig im Grenzfall $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$. Setzen wir (4.3) in (4.2) ein und verlangen noch, daß f eindeutig in φ ist, so erhalten wir

$$f(\mathbf{r}) = \hat{f}(r) e^{is\varphi} \quad (4.4)$$

mit ganzzahligem s und reellem $\hat{f}(r)$. Aus (4.3) und (4.4) folgt sofort die Quantisierung der Zirkulation für die Kondensatteilchen. Mit der Geschwindigkeit

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\mathbf{r}) &= \frac{i \hbar}{2m \langle \Psi^+(\mathbf{r} t) \Psi(\mathbf{r} t) \rangle} \\ &\quad \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \right) \langle \Psi^+(\mathbf{r}_1 t) \Psi(\mathbf{r}_2 t) \rangle \Big|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2=r} \\ &= (\hbar s/m r) \mathbf{e}_\varphi \end{aligned} \quad (4.5)$$

¹² Vgl. z. B. N. N. BOGOLJUBOV, V. V. TOLMACHOV u. D. V. SCHIRKOV, l. c. ¹¹.

¹³ K. SAWADA u. N. FUKUDA, Progr. Theor. Phys. **35**, 653 [1961].

(\mathbf{e}_φ Einheitsvektor in φ -Richtung) ergibt sich

$$\oint \mathbf{v} d\mathbf{r} = h s/m. \quad (4.6)$$

Die außerhalb des Kondensats befindlichen Teilchen werden sich (bis auf den Rückfluß) mit dem Kondensat mitbewegen, ebenso wie im Falle des gleichförmig bewegten Kondensats.

Für die radiale Kondensatfunktion ergibt sich nun

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{s^2}{r^2} \right) - \mu + V \hat{f}^2(r) \right\} \hat{f}(r) = 0. \quad (4.7)$$

Gl. (4.7) wurde auf anderem Wege schon von GROSS⁸ abgeleitet und diskutiert. Das nichtlineare Glied führt dazu, daß für einen weiteren r -Bereich

$$\hat{f}(r) = \sqrt{\varrho_0} = \sqrt{V/\mu} \quad (4.8)$$

eine Lösung ist. ϱ_0 ist wieder die Dichte der Kondensatteilchen [vgl. (4.3)]. Für kleine r kann das nichtlineare Glied vernachlässigt werden, und es ergibt sich

$$\hat{f}(r) = A J_s(r(\sqrt{2m\mu}/\hbar)). \quad (4.8a)$$

J_s ist die BESSEL-Funktion der Ordnung s ; A ist eine Konstante, die durch den Übergang zur Lösung (4.8) bestimmt wird. Dieser Übergang zur konstanten Lösung ist für Abstände möglich, für die $(\hbar^2/2m)(s^2/r^2) \ll \mu$, d. h. $r \gg s(\hbar/V\sqrt{2m\mu}) = s r_0$.

Für große r hängt das Verhalten der Lösung von der Randbedingung ab. Wir schließen das System

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 t) &= \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \int d\omega G(\lambda_1 \lambda_2 \omega) \varphi_{\lambda 1}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\lambda 2}^*(\mathbf{r}_2) e^{-i\omega t}, \\ F^*(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 t) &= \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \int d\omega F^*(\lambda_1 \lambda_2 \omega) \varphi_{\lambda 1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\lambda 2}^*(\mathbf{r}_2) e^{-i\omega t}, \quad (t = t_1 - t_2). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Damit lauten die Bewegungsgleichungen (2.18) und (2.19)

$$(\hbar\omega - \varepsilon_{\lambda 1} - V \varrho_0) G(\lambda_1 \lambda_2 \omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{\lambda 1 \lambda 2} + V \varrho_0 \sum_{\lambda} F^*(\lambda \lambda_2 \omega) \int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\lambda 1}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) e^{2is\varphi}, \quad (4.11)$$

$$(\hbar\omega + \varepsilon_{\lambda 1} + V \varrho_0) F^*(\lambda_1 \lambda_2 \omega) = -V \varrho_0 \sum_{\lambda} G(\lambda \lambda_2 \omega) \int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\lambda 1}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) e^{-2is\varphi}. \quad (4.12)$$

Die in diesen Gleichungen auftretenden Integrale

$$I_{n, pp'}^\pm = B_{np} B_{n \pm 2s, p'} \int r dr J_n(r \beta_{np}) J_{n \pm 2s}(r \beta_{n \pm 2s, p'}) \quad (4.13)$$

führen im allgemeinen zu einer Verkopplung von Radialzuständen. Wir beschränken uns hier auf eine vereinfachte Auflösung der Bewegungsgleichungen. Dazu betrachten wir die asymptotischen Entwicklungen der BESSEL-Funktionen, die (zumindest bei größerem p) für einen weiten r -Bereich gute Annäherungen darstellen.

$$J_n \approx \sqrt{\frac{2}{\pi r \beta_{np}}} \cos\left(r \beta_{np} - (n + \frac{1}{2}) \frac{\pi}{2}\right), \quad J_{n \pm 2s} \approx (-1)^s \sqrt{\frac{2}{\pi r \beta_{n \pm 2s, p'}}} \cos\left(r \beta_{n \pm 2s, p'} - (n + \frac{1}{2}) \frac{\pi}{2}\right). \quad (4.14)$$

in einen Quantisierungszylinder vom Radius R ein und verlangen $\hat{f}(R) = 0$. Die Diskussion der Differentialgleichung (4.7) liefert, daß die Lösung auf einer Strecke der Größenordnung r_0 vom Wert $\sqrt{\mu/V}$ auf Null absinkt (vgl. Anhang). Benutzen wir zur Abschätzung der in beiden Fällen auftretenden charakteristischen Länge r_0 für V den Wert (2.2a) von HUANG und YANG, so ergibt sich

$$r_0 = a_0 / \sqrt{12(\alpha/a_0)} \approx a_0.$$

Dabei ist $(4\pi/3) a_0^3 = \varrho_0^{-1}$, so daß a_0 ein Maß für den mittleren Abstand der Atome ist. Wir können bei den folgenden Rechnungen r_0 als klein betrachten und die Lösung (4.8) für den gesamten r -Bereich verwenden. Für die Funktionen φ_λ ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \varepsilon_\lambda \right) \varphi_\lambda(\mathbf{r}) &= 0, \\ \varphi_\lambda &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikz} B_{np} J_n(r \beta_{np}) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi}, \\ \lambda &\equiv (knp), \quad \varepsilon_\lambda = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + \beta_{np}^2). \end{aligned} \quad (4.9)$$

L ist die Länge des Quantisierungszylinders, B_{np} die Normierungskonstante. β_{np} bestimmt sich als p -te Wurzel der Gleichung

$$J_n(R \beta_{np}) = 0.$$

Wir betrachten nun die außerhalb des Kondensats befindlichen Teilchen und entwickeln deren GREEN-sche Funktionen.

Wegen der asymptotischen Übereinstimmung der BESSEL-Funktionen erhalten wir $\beta_{np} = \beta_{n\pm 2s,p}$, folglich ist dann auch $\varepsilon_{k,n,p} = \varepsilon_{k,n\pm 2s,p}$. Wir bekommen für $p = p'$

$$I_{n,p,p}^{\pm} \approx (-1)^s \quad (4.15)$$

und vernachlässigen die Beiträge für $p \neq p'$.

Die Auflösung der Bewegungsgleichungen (4.11) und (4.12) liefert dann für G

$$G(\lambda_1 \lambda_2 \omega) = \frac{\hbar \delta_{\lambda_1 \lambda_2} (\hbar \omega + \varepsilon_{\lambda 1} + V \varrho_0)}{2 \pi (\hbar \omega - \sqrt{\varepsilon_{\lambda 1}^2 + 2 \varepsilon_{\lambda 1} V \varrho_0}) (\hbar \omega + \sqrt{\varepsilon_{\lambda 1}^2 + 2 \varepsilon_{\lambda 1} V \varrho_0})}. \quad (4.16)$$

Diese GREENSche Funktion liefert für Einteilchenanregungen das Spektrum

$$\varepsilon = \sqrt{\varepsilon_{\lambda}^2 + 2 \varepsilon_{\lambda} V \varrho_0}, \quad (4.17)$$

das auf Zylindergeometrie verallgemeinerte BOGOLJUBOVSCHE¹² Spektrum darstellt. G ist symmetrisch gegenüber $n_1 \rightarrow -n_1$ und liefert folglich eine Verteilung, bei der sich die Teilchen nicht mit dem Kondensat mitbewegen. Auch das Anregungsspektrum (4.16) ist unabhängig von der Kondensatbewegung. Die Ursache dafür liegt in den Näherungen, die bei der Auflösung der Bewegungsgleichungen (4.11) und (4.12) gemacht wurden. Diese Nä-

herungen sind um so besser, je weiter die Teilchen energetisch vom Kondensat entfernt sind (höheres p). Die Berücksichtigung der Mitbewegung erfordert eine genauere Auflösung der Bewegungsgleichungen.

Herrn Prof. Dr. G. HEBER möchte ich für sein Interesse an dieser Arbeit danken.

Anhang

Es soll die Lösung der Dgl. (4.7)

$$y'' + \frac{1}{r} y' - \frac{s^2}{r^2} y + u y - v y^3 = 0, \quad (A 1)$$

$$u = \frac{2 m}{\hbar^2} \mu, \quad v = \frac{2 m}{\hbar^2} V, \quad y = \hat{f}(r),$$

für $r \approx R$ untersucht werden. Wir vernachlässigen die Glieder $(1/r) y'$ und $(s^2/r^2) y$ (R sehr groß gegen den Atomabstand). Die Dgl. lässt sich dann integrieren.

$$y'^2 + u y^2 - (v/2) y^4 + C = 0. \quad (A 2)$$

Die Integrationskonstante C bestimmt sich aus der Forderung, daß die Lösung in die Konstante $y_0 = \sqrt{u/v}$ übergehen soll. Wir erhalten dann durch nochmalige Integration

$$\text{Ar} \mathfrak{T} g(y/y_0) = \sqrt{u/2} (R - r). \quad (A 3)$$

Daraus ist abzulesen, daß y auf einer Strecke der Größenordnung $1/\sqrt{u} = r_0$ vom Wert y_0 auf Null absinkt.