

Untersuchungen zur Quantenkondensation

P. L. Lin

Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen

(Z. Naturforsch. **29 a**, 1387–1393 [1974] ; eingegangen am 24. Juli 1974)

Investigations on Quantum Condensation

It has recently been proved that quantum condensation can possibly occur only when the thermodynamic limit is formed with respect to all three space dimensions. Following this idea, it is shown that a rotating system is practically one-dimensional and therefore does not permit quantum condensation. The same is true for a charged system in an external magnetic field. However, an exact proof is given only for a second order phase transition.

Der Phasenübergang des flüssigen Heliums in das suprafluide He II am Lambdapunkt und der Übergang der Leitungselektronen eines Metalls in den supraleitenden Zustand bei der Sprungtemperatur lassen sich durch das Phänomen der Quantenkondensation erklären. Die quantenkondensierte Phase des Systems wird beschrieben durch die Existenz eines Kondensats von Teilchen. In der Theorie benutzt man ^{1,2} die Methode des Quasierwartungswertes zur Untersuchung eines quantenkondensierten Systems. Den Quasierwartungswert erhält man durch einen Limesprozeß. Damit wurde bereits gezeigt ^{1,2}, daß Quantenkondensation nur in einem dreidimensionalen System im thermodynamischen Limes existieren kann. Ähnliche Ergebnisse wurden schon früher von Hohenberg ³ erhalten. Sie gelten für Quantenkondensation in Inertialsystemen.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Quantenkondensation im rotierenden System und im Magnetfeld. Wir werden zeigen, daß beide Systeme in der Nähe eines Phasenüberganges zweiter Art praktisch eindimensional sind. Nach dem üblichen Kriterium ^{1,2} für Quantenkondensation tritt dann in beiden Systemen keine Quantenkondensation auf.

1. Quantenkondensation in einem rotierenden Bosonensystem

Das rotierende System von suprafluidem He II mit einer konstanten Kreisfrequenz ω besitzt zwei kritische Kreisfrequenzen. Zwischen der oberen und der unteren kritischen Kreisfrequenz bildet das System eine periodische geordnete Gitterstruktur von Wirbellinien. Es ist beobachtet worden, daß sich die

Wirbellinien mit dem System mitdrehen, so daß im rotierenden Bezugssystem ein thermodynamisches Gleichgewicht herrscht.

Wir untersuchen als Modell ein Bosonengas in einem Volumen Ω , das sich mit einer konstanten Kreisfrequenz

$$\omega = \omega \hat{z} \quad (1)$$

dreht. Wir transformieren zunächst mit Hilfe des unitären Operators $\exp\{i\omega \cdot \mathbf{L}t\}$ die Schrödinger-Gleichung des Systems vom Inertialsystem in das rotierende Bezugssystem. Dabei bedeutet t die Zeit und

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \quad (2)$$

den Drehimpulsoperator des Systems. Die Summation über i durchläuft alle Teilchen mit dem Orts- bzw. Impulsoperator \mathbf{r}_i bzw. \mathbf{p}_i . Wir nehmen eine drehinvariante Zwei-Teilchen-Wechselwirkung $v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ an. Der transformierte Hamilton-Operator, der die zeitliche Entwicklung des Zustandes im rotierenden Bezugssystem bestimmt, lautet dann

$$H' = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \omega \cdot \mathbf{L} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (3)$$

mit m als Masse des Bosons. Gleichung (3) läßt sich umformen in

$$H' = \sum_i \left\{ \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_i - m \omega \times \mathbf{r}_i)^2 - \frac{m}{2} (\omega \times \mathbf{r}_i)^2 \right\} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (4)$$

Das Glied

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}_i) := \omega \times \mathbf{r}_i \quad (5)$$

ist das Vektorpotential der Coriolis-Kraft. Es gilt

$$\nabla \times \mathbf{V}(\mathbf{r}) = 2\omega. \quad (6)$$

Sonderdruckanforderungen an Dipl.-Phys. P. L. Lin, Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen, D-3400 Göttingen, Bunsenstraße 9.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Die Coriolis-Kraft ist das formale Analogon der Lorentz-Kraft im Magnetfeld. Das Zentrifugalpotential $m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2/2$ wächst mit den räumlichen Abmessungen des Systems. Man weiß aber bereits, daß Quantenkondensation höchstens im dreidimensional-unendlichen System auftritt. Eine unendlich große Zentrifugalkraft würde hierbei unsinnige Resultate ergeben; insbesondere könnte es kein homogenes System geben. Wir lassen deshalb die Zentrifugalkraft fort und behalten nur die Coriolis-Kraft (bzw. das entsprechende Potential) bei. Der Hamilton-Operator für das rotierende Bosonensystem lautet dann

$$H' = \sum_i \frac{1}{2m} [\mathbf{p}_i - m \mathbf{V}(\mathbf{r}_i)]^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (7)$$

Um einen ersten Überblick zu bekommen, wird die Teilchendichte n in der Hartree-Näherung berechnet. Der Selbstenergieteil in der Hartree-Näherung lautet

$$-\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n v(0) \quad (8)$$

mit $v(0) = \int v(|\mathbf{r}|) d^3\mathbf{r}$. Damit wird die Teilchendichte⁴ für $\boldsymbol{\omega} = 0$

$$n_0 = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \int d^3\mathbf{k} \frac{1}{\exp\left\{\beta\left(\frac{k^2}{2m} + n_0 v(0) - \mu\right)\right\} - 1}. \quad (9)$$

μ ist das chemische Potential. Für $\boldsymbol{\omega}$ ungleich Null ergibt sich dagegen

$$n = \frac{2m\omega}{(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{1}{\exp\left\{\beta\left(2\omega l + \frac{k_z^2}{2m} + \omega + n v(0) - \mu\right)\right\} - 1}. \quad (10)$$

Der Integrand in Gl. (9) bzw. Gl. (10) ist positiv, weil er die mittlere Besetzungszahl des Zustandes (l, k_z) bzw. \mathbf{k} bedeutet. Für eine gegebene Temperatur dürfen die Ausdrücke $\beta(n_0 v(0) - \mu)$ in Gl. (9) bzw. $\beta(\omega + n v(0) - \mu)$ in Gl. (10) daher nicht negativ werden. Das dreidimensionale Integral in Gl. (9) hat also einen endlichen Maximalwert bei $n_0 v(0) - \mu \rightarrow 0^+$, da die Integration in diesem Limes konvergiert. Der Maximalwert sinkt monoton mit absinkender Temperatur ab. Quantenkondensation im Sinne der Bose-Einstein-Kondensation tritt auf, wenn der Maximalwert kleiner als die tatsächliche Dichte ist. Die Integration in Gl. (10) konvergiert dagegen im Limes $\omega + n v(0) - \mu \rightarrow 0^+$ nicht, da sie nur über die eindimensionale Variable k_z erstreckt wird. Jede Teilchendichte ist möglich. Eine Quantenkondensation tritt nicht auf, da das System praktisch eindimensional ist.

Wir wollen jetzt unabhängig von der Hartree-Näherung beweisen, daß eine Quantenkondensation im rotierenden Bosonensystem nicht auftritt. Dazu wenden wir die Methode des Quasierwartungswertes an. Der Hamilton-Operator in Gl. (7) wird in die zweite Quantelung umgeschrieben. Er wird dann ergänzt um den Term

$$\tilde{H} = -\int d^3\mathbf{r} [\zeta_0^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + \psi^*(\mathbf{r}) \zeta_0(\mathbf{r})]. \quad (11)$$

Dabei sind $\zeta_0(\mathbf{r})$ bzw. $\zeta_0^*(\mathbf{r})$ c -Zahl-Funktionen. $\psi^*(\mathbf{r})$ bzw. $\psi(\mathbf{r})$ sind Bosonen-Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren, die den üblichen Vertauschungsrelationen gehorchen. Sie verschwinden am Rand des Normierungsvolumens. Der Quasierwartungswert wird bezüglich der großkanonischen Gesamtheit mit dem Zustandsoperator

$$\exp\{-\beta K\} = \exp\{-\beta(H - \mu N + \tilde{H})\} \quad (12)$$

berechnet. Dabei ist

$$N = \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (13)$$

der Teilchenzahloperator des Systems. Die Vorschrift lautet, daß man zunächst den thermodynamischen Grenzübergang (Volumen Ω gegen unendlich bei festgehaltenem μ und T) durchzuführen und anschließend $\zeta_0(\mathbf{r})$ gegen Null gehen zu lassen hat.

Die Störungsrechnung ist bis auf die Substitution von ∂ durch $\tilde{\partial} := \partial - im \mathbf{V}(\mathbf{r})$ identisch mit der in der Arbeit von Lüders¹ angegebenen. Die Funktion $\xi(\mathbf{r})$ wird definiert durch den Quasierwartungswert

$$\xi(\mathbf{r}) := \langle \psi(\mathbf{r}; -i\tau) \rangle \quad (14)$$

mit der imaginären Zeit $-i\tau$ und

$$\psi(\mathbf{r}; -i\tau) := \exp\{\tau K\} \psi(\mathbf{r}) \exp\{-\tau K\}.$$

$\xi(\mathbf{r})$ verschwindet im normalen System wegen der Teilchenzahlerhaltung des Hamilton-Operators. Die normalen und anomalen Ein-Teilchen-Propagatoren $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ und $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ gehorchen den Beliaevschen Gleichungen, in denen die irreduziblen normalen und anomalen Selbstenergieteile

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) \text{ bzw. } \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$$

stehen. Die Selbstenergieteile können durch Skelettgraphen ausgedrückt werden, d. h. sie hängen ihrerseits wieder von $\xi(\mathbf{r})$ und den Ein-Teilchen-Propagatoren ab. Es liegt also ein Selbstkonsistenzproblem vor.

Das Kriterium für Quantenkondensation lautet, daß man nach der Vorschrift des Quasierwartungswertes ($\Omega \rightarrow \infty$, dann $\zeta_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$) eine nichttriviale Lösung $\xi(\mathbf{r})$ dieses Selbstkonsistenzproblems finden kann.

Um zu zeigen, daß keine Quantenkondensation auftritt, nehmen wir zunächst an, daß das System doch quantenkondensiert ist. Am Phasenübergang zweiter Art streben $\xi(\mathbf{r})$ bzw. $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ und $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ stetig gegen Null. Man erhält die Gleichungen¹

$$\left(-\frac{\tilde{\partial} \cdot \tilde{\partial}}{2m} - \mu\right) \xi(\mathbf{r}) + \int d^3 \mathbf{r}' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) \xi(\mathbf{r}') = \zeta_0(\mathbf{r}), \quad (15)$$

$$\left(-\frac{\tilde{\partial} \cdot \tilde{\partial}}{2m} - \mu - i z_l\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) + \int d^3 \mathbf{r}'' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; i z_l) G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; i z_l) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (16)$$

Dabei ist Σ in Gln. (15), (16) der normale Selbstenergieteil. Aus der graphischen Definition von Σ folgt

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) = \Sigma^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}; 0). \quad (17)$$

Ein vollständiges orthonormiertes Funktionssystem wird definiert durch die Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\tilde{\partial} \cdot \tilde{\partial}}{2m} - \mu\right) u_n(\mathbf{r}) + \int d^3 \mathbf{r}' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) u_n(\mathbf{r}') = \lambda_n u_n(\mathbf{r}) \quad (18)$$

und die Randbedingung. Für Ω gegen unendlich bleibt die Eigenfunktion $u_n(\mathbf{r})$ im Unendlichen beschränkt. Der Eigenwert λ_n ist reell. Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$\sum_n u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (19)$$

Für $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ gilt dann

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) = \sum_n \frac{u_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}')}{\lambda_n}. \quad (20)$$

Im Limes $\zeta_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ entspricht die Lösung $\xi(\mathbf{r})$ nach Gl. (15) und Gl. (18) einer Eigenfunktion $u_0(\mathbf{r})$ mit $\lambda_0 = 0$. Im System mit endlichen räumlichen Abmessungen kann die Lösung $\xi(\mathbf{r})$ nicht mit der Lösung von $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ gemäß Gl. (20) verträglich sein, da ein Glied in der Summe unendlich wird. Der thermodynamische Limes muß deshalb vor dem Grenzprozeß $\zeta_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ durchgeführt werden. Die benachbarten Eigenwerte liegen dann dicht beieinander, so daß man in Gl. (20) die Summation teilweise durch eine Integration ersetzen darf. Ob diese Integration im Limes $\zeta_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ existiert, hängt davon ab, wie sich das Eigenwertspektrum in der Nähe von $\lambda_0 = 0$ verhält.

Das Spektrum λ_n hängt teilweise von der Symmetrie der Gl. (18) bzw. des Systems ab. Aus der Selbstkonsistenzforderung folgt, daß das System eine Eichtransformationseigenschaft besitzt. Wenn man für $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ eine andere Eichung wählt, dann ändern sich die Funktion $\xi(\mathbf{r})$, die Propagatoren und die irreduziblen Selbstenergieteile nur um einen Phasenfaktor. Wir definieren zwei eichinvariante Funktionen

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) &= \exp\left\{-i m \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} \mathbf{V}(\mathbf{s}) \cdot d\mathbf{s}\right\} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l), \\ \tilde{\Sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) &= \exp\left\{-i m \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} \mathbf{V}(\mathbf{s}) \cdot d\mathbf{s}\right\} \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l). \end{aligned} \quad (21)$$

Integrationsweg ist die gerade Linie von \mathbf{r}' nach \mathbf{r} . \tilde{G}_0 erfüllt eine translationsinvariante Differentialgleichung

$$\left[-\frac{1}{2m} (\partial - i m \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))^2 - \mu - i z_l\right] \tilde{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (22)$$

Im thermodynamischen Limes ist \tilde{G}_0 eine Funktion von $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Man kann die einzelnen Beiträge zur Funktion Σ aus G_0 und $v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ aufgebaut denken. Ersetzt man in den Graphen von Σ die G_0 -Linien nach Gl. (21) durch $\tilde{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; i z_l)$, so liefert jede geschlossene Teilchenlinie einen Exponentialfaktor mit einer geschlossenen Kurvenintegration. Mit Hilfe des Stokeschen Satzes ergibt sich der

Fluß durch die geschlossene Kurve. Der Fluß ist translationsinvariant, weil ω konstant ist. Aus der Definition von $\tilde{\Sigma}$ und der Translationsinvarianz von $\tilde{G}_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; i z_l)$ und $v(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ folgt, daß auch $\tilde{\Sigma}$ translationsinvariant ist. Die Situation ist ähnlich wie in dem H_{c2} -Problem in der Theorie der Supraleitung. Es gelten die Kommutator-Beziehungen

$$\begin{aligned} [(\mathbf{p}-m\mathbf{V}(\mathbf{r}))^2, \Sigma] &= 0, \\ [\omega \cdot (\mathbf{p}-m\mathbf{V}(\mathbf{r})), \Sigma] &= 0, \\ [(\mathbf{p}-m\mathbf{V}(\mathbf{r}))^2, \omega \cdot (\mathbf{p}-m\mathbf{V}(\mathbf{r}))] &= 0, \end{aligned} \quad (23)$$

mit dem Impulsoperator \mathbf{p} . Es existiert daher ein gemeinsames vollständiges Eigenfunktionensystem der Operatoren $(\mathbf{p}-m\mathbf{V}(\mathbf{r}))^2$, $\omega \cdot (\mathbf{p}-m\mathbf{V}(\mathbf{r}))$ und Σ . Es ist zugleich Lösung von Gl. (18).

Wir wählen nun die spezielle Eichung

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = 2\omega x \hat{\mathbf{y}}. \quad (24)$$

Gleichung (21) für Σ lautet dann

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) \\ = \exp\{i m \omega (y-y') (x+x')\} \tilde{\Sigma}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; 0). \end{aligned} \quad (25)$$

Gleichung (18) ist nun bezüglich y und z translationsinvariant. Das gemeinsame vollständige Eigenfunktionensystem ist das System der Landau-Funktionen

$$u_{n k_y k_z}(\mathbf{r}) = f_{n k_y}(x) \exp\{i k_y y + i k_z z\} \quad (26)$$

mit $n = 0, 1, 2, \dots$, wobei die $f_{n k_y}(x)$ mit den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators zusammenhängen. k_y und k_z sind zwei kontinuierliche Quantenzahlen. Es gilt

$$f_{n k_y}(x) = f_n\left(x - \frac{k_y}{2m\omega}\right). \quad (27)$$

Mit Hilfe eines unitären Operators

$$T_k := \exp\{-i k y\} \exp\left\{i \frac{k}{2m\omega} p_x\right\} \quad (28)$$

kann man zeigen, daß der zugehörige Eigenwert $\lambda_{n k_z}$ nicht von k_y abhängt. Es gilt nämlich

$$\left[T_k, \frac{1}{2m}(\mathbf{p}-2m\omega x \hat{\mathbf{y}})^2\right] = 0 = [T_k, \Sigma]. \quad (29)$$

Daraus folgt, daß $T_k u_{n k_y k_z}(\mathbf{r})$ und $u_{n k_y k_z}(\mathbf{r})$ zu demselben Eigenwert gehören. Wählt man $k = k_y$, so ergibt sich

$$T_{k_y} u_{n k_y k_z}(\mathbf{r}) = u_{n 0 k_z}(\mathbf{r}), \quad (30)$$

d. h. der Eigenwert hängt in der Tat nicht von k_y ab. Es gilt also

$$\int d^3\mathbf{r}' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) u_{n k_y k_z}(\mathbf{r}') = \sigma_{n k_z} u_{n k_y k_z}(\mathbf{r}). \quad (31)$$

Das gesuchte Eigenwertspektrum in Gl. (18) bzw. Gl. (20) ist also gegeben durch

$$\lambda_{n k_z} = 2\omega(n + \frac{1}{2}) + k_z^2/2m + \sigma_{n k_z} - \mu. \quad (32)$$

Man kann dabei ferner zeigen, daß $\lambda_{n k_z}$ nicht von dem Vorzeichen von k_z abhängt. Dazu denkt man Σ aufgebaut aus G_0 -Linien und $v(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$. Da der freie Propagator in der Eichung Gl. (24) invariant gegenüber der Transformation $z \rightarrow -z$ ist, ist Σ auch invariant gegenüber der gleichen Transformation. Daraus folgt

$$\sigma_{n k_z} = \sigma_{n -k_z}. \quad (33)$$

Wenn $\sigma_{n k_z}$ in der Variablen k_z entwickelbar ist, folgt aus Gl. (33), daß für $k_z \rightarrow 0$ gilt

$$\sigma_{n k_z} = \sigma_{n0} + O(k_z^2). \quad (34)$$

Faßt man Gl. (32) und Gl. (34) zusammen, so erhält man (speziell für $n = 0$)

$$\lambda_{0 k_z} = \omega + \sigma_{00} - \mu + O(k_z^2) \text{ für } k_z \rightarrow 0. \quad (35)$$

Der Propagator $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ lautet nach Gl. (20) zusammen mit Gl. (26) und Gl. (32) im thermodynamischen Limes folgendermaßen

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0) = \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_y dk_z}{(2\pi)^2} \frac{f_{n k_y}(x) f_{n k_y}(x') \exp\{i k_y(y-y') + i k_z(z-z')\}}{\lambda_{n k_z}}. \quad (36)$$

Läßt man $\zeta_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ gehen, so entspricht die Lösung $\xi(\mathbf{r})$ einer Eigenfunktion mit dem Eigenwert $\lambda = 0$. Man erwartet, daß dies für $n = 0$, $k_z = 0$ der Fall ist, also gemäß Gl. (32)

$$\lambda_{00} = 0 = \omega + \sigma_{00} - \mu. \quad (37)$$

Gleichung (37) ist die Hugenholtz-Pines-Relation⁵ für das Einsetzen von Quantenkondensation. Im

Limes $\zeta_0(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ verhält sich das Spektrum nach Gl. (35) und Gl. (37) wie

$$\lambda_{0 k_z} = O(k_z^2) \text{ für } k_z \rightarrow 0. \quad (38)$$

Der Integrand in Gl. (36) divergiert für $n = 0$, $k_z \rightarrow 0$ wie $1/k_z^2$. Die Integration über k_y hat keinen Einfluß auf die Singularität. Das Integral in Gl. (36) divergiert daher. Die Annahme, daß es eine nicht-

triviale Lösung gibt, ist falsch. Quantenkondensation mit einem Phasenübergang zweiter Art tritt in diesem System also nicht auf. Es ist eindimensional.

2. Quantenkondensation des Elektronengases in einem konstanten äußeren Magnetfeld

Wir betrachten ein Elektronengas bzw. ein System von geladenen Fermionen des Spins $1/2$ in einem Volumen Ω vor einem homogenen positiven Untergrund. Das System befindet sich in einem äußeren homogenen Magnetfeld

$$\mathbf{H} = H \hat{\mathbf{z}}. \quad (39)$$

Die Wechselwirkung $v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ zwischen den Fermionen sei spinunabhängig. Sie ist die Summe einer anziehenden Wechselwirkung und des Coulomb-Potentials. Die Wechselwirkung zwischen dem Magnetfeld und dem magnetischen Moment der Fermionen wird vernachlässigt. Der Zustandsoperator für die Bildung des Quasierwartungswertes lautet

$$\exp \{-\beta K\} = \exp \{-\beta(H - \mu N + \tilde{H})\},$$

mit

$$\begin{aligned} H - \mu N = & \int d^3\mathbf{r} \sum_a \left[\frac{1}{2m} \tilde{\partial}^* \psi_a^*(\mathbf{r}) \right. \\ & \cdot \tilde{\partial} \psi_a(\mathbf{r}) - \mu \psi_a^*(\mathbf{r}) \psi_a(\mathbf{r}) \left. \right] \\ & + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \sum_{a\beta} \psi_a^*(\mathbf{r}) \psi_\beta^*(\mathbf{r}') \\ & \cdot v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \psi_\beta(\mathbf{r}') \psi_a(\mathbf{r}) \\ & + \text{Wechselwirkung mit dem Untergrund,} \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \sum_{a\beta} \epsilon_{a\beta} \\ & \cdot [\zeta_0^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_a(\mathbf{r}) \psi_\beta(\mathbf{r}') + \text{h. c.}] . \end{aligned} \quad (41)$$

Dabei ist $\tilde{\partial} = \partial + ie\mathbf{A}(\mathbf{r})$. $\psi_a(\mathbf{r})$ bedeutet den Feldoperator des Fermions mit Spinindex a . $-e$ ist die Ladung des Fermions, m seine Masse. $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ist das Vektorpotential des Magnetfeldes. $\epsilon_{a\beta}$ ist antisymmetrisch in a und β mit $\epsilon_{\uparrow\downarrow} = +1$. $\zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ist eine c -Zahl-Funktion. Nach der Bildung des Erwartungswertes und dem Grenzprozeß $\Omega \rightarrow \infty$ ist $\zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow 0$ durchzuführen.

Die graphische Störungsrechnung ist identisch mit der in der Arbeit von Lüders² angegebenen. $\zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ bzw. $\zeta_0^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ werden durch zwei neue Bauelemente der graphischen Störungsrechnung dargestellt (Abb. 1 a). Die normalen und anomalen Ein-Teilchen-Propagatoren $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ bzw.

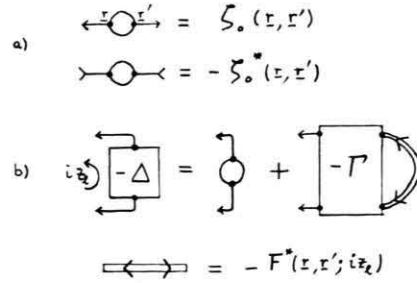


Abb. 1. Zur Quantenkondensation des Fermionensystems.

a) Neue Bauelemente der graphischen Störungsrechnung.

b) Gleichung für den anomalen Selbstenergieteil beim Phasenübergang zweiter Art.

$F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$, in denen z_l alle ungeraden Vielfachen von πT durchläuft, gehorchen den Gorkovschen Gleichungen. Die normalen und anomalen irreduziblen Selbstenergieteile $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ bzw. $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ können durch Skelettgraphen ausgedrückt werden. Man muß das Problem wieder selbstkonsistent lösen. Quantenkondensation bedeutet, daß man aus diesem Selbstkonsistenzproblem eine nichttriviale Lösung für $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ bzw. $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ im Limes $\zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow 0$ findet.

Wir nehmen wieder an, daß das System im Limes $\Omega \rightarrow \infty$ quantenkondensiert ist. In der Nähe eines Phasenüberganges zweiter Art läßt sich die graphische Entwicklung für $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$ dann gemäß Abb. 1 b schreiben². $-\Gamma$ ist der normale irreduzible Zwei-Teilchen-Wechselwirkungsteil. Zusammen mit den Gorkovschen Gleichungen erhält man die Beziehung

$$(\tilde{\partial} + \Gamma) F^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) = \zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | \tilde{\partial} | \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') &= \left[\left(-\frac{1}{2m} \tilde{\partial} \cdot \tilde{\partial} - \mu - i z_l \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') + \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; i z_l) \right] \\ &\cdot \left[\left(-\frac{1}{2m} \tilde{\partial} \cdot \tilde{\partial} - \mu + i z_l \right) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \right. \\ &\quad \left. + \Sigma(\mathbf{r}', \mathbf{r}''; -i z_l) \right] \beta \delta_{z_l z_l''}. \end{aligned}$$

Die Matrizenmultiplikation in Gl. (42) bedeutet eine Integration von zwei Ortsvariablen über das ganze Volumen, eine Multiplikation mit $1/\beta$ und eine Summation über alle z_l . Am Phasenübergang fließen keine Supraströme; das Magnetfeld ist gleich dem äußeren Magnetfeld. Es gilt daher

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}. \quad (43)$$

Gl. (42) ist analog zu Gl. (15) im Bosonenfall. Analog zu Gl. (16) hat man hier die Gleichung für

den Zwei-Teilchen-Propagator R (mit verschwindendem Gesamt- z) am Phasenübergang. Es ist

$$(\tilde{\Omega} + I)R = I \quad (44)$$

mit I , der Einheitsmatrix bezüglich der Ortsintegration und der z -Summation. Nach Lüders² ist der Operator $\Pi(\tilde{\Omega} + I)$ mit

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | \Pi | i z_l''; \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') \\ = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''') \beta \delta_{z_l - z_l''} \end{aligned} \quad (45)$$

hermitesch. Es existiert daher ein vollständiges orthonormiertes Funktionensystem, das durch die Eigenwertsgleichung

$$\Pi(\tilde{\Omega} + I) u_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) = \lambda_n u_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) \quad (46)$$

und die Randbedingung definiert ist. Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$\begin{aligned} \sum_n u_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) u_n^*(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; i z_l'') \\ = (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | I | i z_l''; \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') . \end{aligned} \quad (47)$$

Der Zwei-Teilchen-Propagator R läßt sich ausdrücken in der Form

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | R | i z_l''; \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') \\ = \sum_n \frac{u_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) u_n^*(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; -i z_l)}{\lambda_n} . \end{aligned} \quad (48)$$

Gleichung (46) ist eine Art Bethe-Salpeter-Gleichung. Wegen der Lokalität der Wechselwirkung verschwindet I für große Abstände. Gleichung (46) erlaubt daher im Limes $\Omega \rightarrow \infty$ Streuzustände und gebundene Zustände. Die Summation in Gl. (48) wird in eine Summe über die gebundenen Zustände bzw. über die Streuzustände aufgeteilt. Im thermodynamischen Limes ist die Summe teilweise durch eine Integration zu ersetzen. Um das genauer zu untersuchen, wählen wir die Eichung

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = H x \mathbf{y} . \quad (49)$$

Die asymptotische Streulösung ist eine Eigenfunktion von $\Pi \tilde{\Omega}$. Die Streuzustände lauten daher

$$\begin{aligned} u_{z_0 n_1 k_{y1} k_{z1} n_2 k_{y2} k_{z2}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) \\ \cong A [l_{n_1 k_{z1}}(i z_0) l_{n_2 k_{z2}}(-i z_0) \delta_{z_0 z_l} \\ + \lambda_{z_0 n_1 k_{z1} n_2 k_{z2}} \delta_{z_0 - z_l}] u_{n_1 k_{y1} k_{z1}}(\mathbf{r}) u_{n_2 k_{y2} k_{z2}}(\mathbf{r}') \\ + w_{z_0 n_1 k_{y1} k_{z1} n_2 k_{y2} k_{z2}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) . \end{aligned} \quad (50)$$

Dabei ist A eine Normierungskonstante. $u_{n k_{y1} k_{z1}}(\mathbf{r})$ ist eine Landau-Funktion [vgl. Gl. (26)]. Ferner gilt

$$\begin{aligned} l_{n k_z}(-i z_l) = \frac{eH}{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ + \frac{k_z^2}{2m} - \mu - i z_l + \sigma_{n k_z}(i z_l) \end{aligned} \quad (51)$$

[vgl. Gl. (32)]. w ist die Streuwelle, die von I abhängt. Die Eigenwerte

$$\lambda_{z_0 n_1 k_{z1} n_2 k_{z2}} = \pm |l_{n_1 k_{z1}}(i z_0) l_{n_2 k_{z2}}(-i z_0)| \quad (52)$$

sind reell. Man braucht nur Eigenfunktionen mit $z_0 > 0$ mitzunehmen, da die Eigenfunktionen mit verschiedenem Vorzeichen von z_0 linear abhängig sind.

Vergleicht man Gl. (42) mit Gl. (46), so ist F^* im Limes $\zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow 0$ eine Eigenfunktion der Gl. (46) mit $\lambda_0 = 0$. F^* ist ein gebundener Zustand eines Cooper-Paares. Ob die rechte Seite von Gl. (48) im Limes $\Omega \rightarrow \infty$ existiert, hängt davon ab, wie sich der Eigenwert der gebundenen Zustände in der Nähe von $\lambda_0 = 0$ verhält. Ein gebundenes Paar der Fermionen entspricht einem Boson. Außerdem ist die Lorentz-Kraft im Magnetfeld ganz analog zu der Coriolis-Kraft des Abschnitts 1. Wir erwarten daher, daß sich das Spektrum des gebundenen Fermionenpaares so verhält wie Gleichung (32). Die innere Struktur des Paares hängt von dem Zwei-Teilchen-Wechselwirkungsteil ab.

Die Überlegung für die gebundenen Zustände ist ähnlich wie in Abschnitt 1. Wie im Bosonenfall ist die eichinvariante Funktion

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | \tilde{T} | i z_l''; \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') \\ = \exp \left\{ i e \int_{\mathbf{r}''}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} + i e \int_{\mathbf{r}'''}^{\mathbf{r}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right\} \\ \cdot (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | I | i z_l''; \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') \end{aligned} \quad (53)$$

translationsinvariant. Daraus folgt, daß Gl. (46) in der Eichung Gl. (47) in y - und z -Richtung translationsinvariant ist. Es gilt der Lösungsansatz

$$\begin{aligned} u_{n k_y k_z}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) = \exp \left\{ i k_y \left(\frac{y + y'}{2} \right) + i k_z \left(\frac{z + z'}{2} \right) \right\} \\ \cdot \tilde{u}_{n k_y k_z}(x, x', y - y', z - z'; i z_l) , \end{aligned} \quad (54)$$

wobei k_y und k_z zwei kontinuierliche Quantenzahlen sind. \tilde{u} gibt die innere Struktur des Paares an. Aus der Translationsinvarianz von \tilde{T} und aus Gl. (53) folgt

$$[H(\tilde{\Omega} + I), T_k' T_k] = 0 \quad (55)$$

mit

$$T_k' T_k = \exp \{ i k(y + y') \} \exp \left\{ i \frac{k}{eH} (p_x + p_x') \right\} .$$

Damit kann man zeigen, daß der zu der Eigenfunktion Gl. (54) gehörige Eigenwert $\lambda_{n k_z}$ nicht von k_y abhängt. Außerdem gilt

$$\lambda_{1 k_z} = \lambda_{n - k_z}, \quad (56)$$

da $\Pi(\tilde{\Omega} + I)$ invariant gegenüber der Transformation $z \rightarrow -z$ ist. Wenn $\lambda_{n k_z}$ bezüglich k_z entwickelbar ist, gilt

$$\lambda_{0 k_z} = \lambda_{00} + O(k_z^2) \text{ für } k_z \rightarrow 0. \quad (57)$$

Läßt man $\zeta_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow 0$ gehen, so bedeutet die Existenz einer nichttrivialen Lösung $F^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l)$, daß λ_{00} gleich Null ist. Aus Gl. (57) folgt dann

$$\lambda_{0 k_z} = O(k_z^2) \text{ für } k_z \rightarrow 0. \quad (58)$$

Mit Gl. (48), den Streuzuständen Gl. (50) und den gebundenen Zuständen Gl. (54) erhält man für den Zwei-Teilchen-Propagator R im thermodynamischen Limes schließlich

$$\begin{aligned} & (\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l | R | i z_l''; \mathbf{r}'', \mathbf{r}'') \\ &= \sum_{z_0 > 0} \sum_{n_1 n_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_{y1} dk_{z1} dk_{y2} dk_{z2}}{(2\pi)^4} \frac{u_{z_0 n_1 k_{y1} k_{z1} n_2 k_{y2} k_{z2}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) u_{z_0 n_1 k_{y1} k_{z1} n_2 k_{y2} k_{z2}}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -i z_l'')}{\lambda_{z_0 n_1 k_{z1} n_2 k_{z2}}} \\ &+ \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_y dk_z}{(2\pi)^2} \frac{u_{n k_y k_z}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i z_l) u_{n k_y k_z}^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -i z_l'')}{\lambda_{n k_z}}. \end{aligned} \quad (59)$$

Dabei enthält der erste Term auf der rechten Seite der Gl. (59) die Streuzustände und der zweite Term die gebundenen Zustände. Wegen Gl. (58) divergiert die Integration in dem zweiten Term. Das System hat keinen Phasenübergang zweiter Art im Sinne einer Quantenkondensation, denn es ist eindimensional.

Unsere Überlegungen sind nur gültig unmittelbar am Phasenübergang. Bei voll entwickelbarer Suprafluidität bzw. Supraleitung sind $\xi(\mathbf{r})$ bzw. $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; 0)$ nicht mehr translationsinvariant. Sie sind nur noch invariant gegenüber diskreten Translationen, die ein zweidimensionales Gitter (Wirbelliniengitter,

Flußliniengitter) bilden. Die Eigenfunktionen der Gl. (18) sehen dann ähnlich wie Bloch-Funktionen aus. Es ist uns nicht gelungen, die Nichtexistenz von Quantenkondensation auch in diesem allgemeinen Fall zu beweisen.

Herrn Prof. Dr. G. Lüders danke ich für zahlreiche Unterstützungen bei der Anfertigung dieser Arbeit. Denn Herren Dr. W. Moormann, Dr. H. J. Sommers und Dr. K. D. Usadel bin ich für Diskussionen dankbar.

Für finanzielle Unterstützung danke ich dem Deutschen Akademischen Austauschdienst.

¹ G. Lüders, Z. Naturforsch. **27 a**, 175 [1972].

² G. Lüders, Z. Naturforsch. **27 a**, 881 [1972].

³ P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 [1966].

⁴ $c = \hbar = k = 1$, $\beta = 1/T$, T ist die absolute Temperatur.

⁵ N. Hugenholtz u. D. Pines, Phys. Rev. **116**, 489 [1959].

⁶ E. E. Salpeter u. H. A. Bethe, Phys. Rev. **84**, 1232 [1951].