

Kapitel 1

Einleitung

In diesem einleitenden Kapitel beschreiben wir zunächst die geschichtliche Entwicklung auf dem Gebiet der Bose-Einstein-Kondensation. Anschließend skizzieren wir grob die experimentellen Techniken, die zur Realisierung der Kondensation und deren Manipulation notwendig sind. Danach beschreiben wir kurz die Situation in endlichen Ensembles von ununterscheidbaren Teilchen und die damit verbundenen theoretischen Aspekte. Zum Schluss folgt eine kurze Übersicht der Themengebiete der vorliegenden Promotionsschrift.

1.1 Historisches

Die Entwicklung der Physik im neunzehnten Jahrhundert bekam einen rasanten Aufschwung mit der Einführung statistischer Methoden, die besonders von Boltzmann und Gibbs vorangetrieben wurden. Diese Methoden wurden von der intuitiv zugänglichen Statistik makroskopischer Objekte übernommen und auf molekulare oder atomare Bestandteile von Gasen angewendet. Die Voraussagen über einen Zustand werden bei dieser Vorgehensweise in Form von Wahrscheinlichkeiten w angegeben. Ein Zustand wird dabei im thermischen Gleichgewicht in erster Linie durch seine Energie E beschrieben. Es stellt sich heraus, dass Zustände mit höheren Energien weniger wahrscheinlich realisiert werden und zwar in einem Maß, das durch die Temperatur T vorgegeben wird:

$$w(E) \sim e^{-E/k_B T} , \quad (1.1)$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante darstellt. Für verschwindende Temperatur würde demnach nur ein Zustand mit minimaler Energie überleben, was die Aussage der klassischen Mechanik widerspiegelt. Eine endliche Temperatur führt zu einer Verschmierung der Verteilung über verschiedene Energien, wodurch die Gesetze der klassischen Physik auf den realistischen Fall unter Einfluss der Thermodynamik verallgemeinert werden. Diese Herangehensweise führte unter anderem zur kinetischen Gastheorie und somit zum mikroskopischen Verständnis der Thermodynamik. Nach den Erfolgen der Statistik versuchte man aber auch, mit denselben Methoden die thermische Strahlung eines schwarzen Körpers zu quantifizieren. Die Wiensche Strahlungsformel beschrieb die Abstrahlungscharakteristik dieses idealisierten Objekts für hohe Frequenzen gut, war aber nicht sehr gut

begründet und für tiefe Frequenzen inakzeptabel. Rayleigh dagegen gelang es, die Situation für niedrige Frequenzen erfolgreich zu beschreiben, für hohe Frequenzen sagte seine Formel allerdings eine unphysikalische Divergenz voraus.

Im Jahre 1900 leitete Max Planck eine mit Experimenten sehr gut verträgliche Interpolationsformel für das gesamte Spektrum eines thermischen Strahlers ab. Seine Herleitung ging von der Existenz der Strahlungsquanten aus. Die Quantisierung des Strahlungsfeldes schien zunächst eine künstliche Forderung zu sein, die erst einige Jahre später von Albert Einstein ernsthaft wahrgenommen wurde. Nach Einsteins Betrachtung der Schwarzkörperstrahlung waren die nach Boltzmann verteilten Energiezustände des Strahlers gequantelt und Übergänge zwischen ihnen lösten die Strahlung aus. Die resultierende spektrale Energiedichte eines derartigen Objekts im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur T ergab sich nach der Formel

$$w(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad , \quad (1.2)$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit und ν die Lichtfrequenz bedeuten und h die von Planck eingeführte Konstante bezeichnet. Dadurch unterliegen Lichtquanten einer Statistik, die sich von der Boltzmannschen insbesondere für kleine Energien (Frequenzen) stark unterscheidet. Im hochfrequenten Bereich sind die einzelnen Moden dennoch stark genug unterdrückt, was die Rayleighsche Ultraviolett-Katastrophe beseitigt. Diese erfolgreiche Lösung des Problems war die Geburtsstunde der Quantenstatistik.

Einige Jahre später leitete Satyendranath Bose die Verteilung (1.2) für ein Gas aus masselosen Photonen aus dem Extremalprinzip her [1]. Diese Vorgehensweise konnte Einstein noch verallgemeinern und so auch auf massive einatomige gasförmige Substanzen anwenden [2]. Seine Verteilung sagt nun für ideale wechselwirkungsfreie Gase bei Temperatur T die folgende mittlere Teilchenzahl im Energiezustand E voraus:

$$N^B(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1} \quad . \quad (1.3)$$

Dabei tritt ein zuerst unbestimmter Parameter μ auf, der als das chemische Potential bezeichnet wird. Die Analogie zwischen Lichtquanten und massiven Teilchen deutete nun auf den universellen Charakter der von Bose und Einstein gefundenen Verteilung hin. Diese folgt nämlich lediglich aus der prinzipiellen Ununterscheidbarkeit der mikroskopischen Bestandteile und hängt nicht von der Art der Materie ab.

Tatsächlich sind in der Mikrowelt alle Teilchen der gleichen Sorte prinzipiell ununterscheidbar. Bei Zustands-Beschreibungen mit Hilfe der Vielteilchen-Wellenfunktionen in mehr als zwei Raum-Dimensionen gibt es nur zwei Möglichkeiten, diesem Umstand Rechnung zu tragen. In der ersten sind die Wellenfunktionen symmetrisch bezüglich des Teilchenaustauschs und in der zweiten total antisymmetrisch. Die erste Teilchensorte hat laut Paulis Spin-Statistik-Theorem [3] einen ganzzahligen Spin und unterliegt der Bose-Einstein-Verteilung (1.3). Solche Teilchen werden deswegen auch als Bosonen bezeichnet. Die Teilchen mit halbzahligen Spin gehören zur zweiten Teilchensorte. Sie unterliegen der so genannten Fermi-Dirac-Verteilung

$$N^F(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \quad (1.4)$$

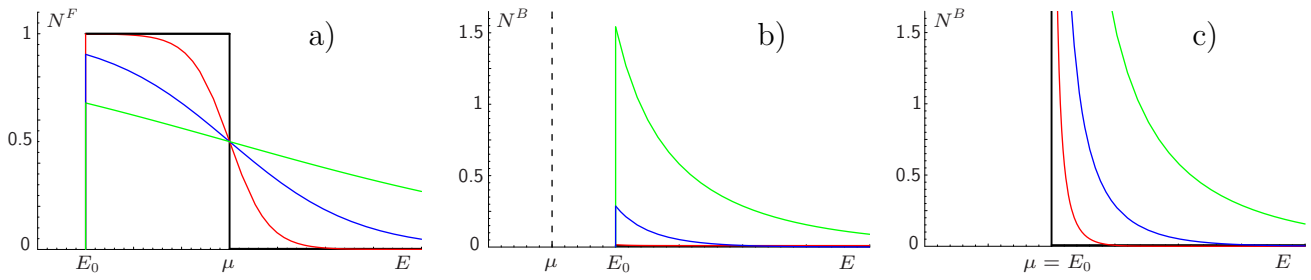


Abbildung 1.1: a) Besetzungszahlen für verschiedene Energien nach der Fermi-Dirac-Verteilung (1.4) für eine fest vorgegebene Grundzustandsenergie E_0 und chemisches Potential $\mu > E_0$. b) und c) Besetzungszahlen nach der Bose-Einstein-Verteilungen (1.3) für $\mu < E_0$ bzw. $\mu = E_0$. Die Verteilungen sind für verschiedene Temperaturen ausgewertet: grün bei $T = \mu/k_B$ für Fermionen bzw. $T = E_0/k_B$ für Bosonen, blau bei $T = 0.3\mu/k_B$ bzw. $T = 0.3E_0/k_B$ und rot bei $T = 0.1\mu/k_B$ für Fermionen bzw. $T = 0.1E_0/k_B$ für Bosonen. Die durchgezogenen schwarzen Kurven stehen für verschwindende Temperaturen. Alle Ergebnisse sind hierbei nicht normiert.

und werden Fermionen genannt.

Was sind nun die Besonderheiten der Bosonen und Fermionen? Die Fermionen besetzen bei verschwindender Temperatur alle Zustände mit Energien kleiner als das chemische Potential und keine oberhalb dessen, siehe Abb. 1.1 a). Das chemische Potential wird hier auch als die Fermi-Energie bezeichnet. Sie markiert bei verschwindender Temperatur also die Besetzungsgrenze. Mit steigender Temperatur ist die stufenförmige Struktur der Verteilung immer weniger stark ausgeprägt und die Kurven werden immer glatter. Bei Bosonen beobachtet man etwas qualitativ Anderes. Es gibt hier keine Zustände mit Energien unterhalb des chemischen Potentials, weil die Teilchenzahlen (1.3) positiv sind. Deswegen muss das chemische Potential μ kleiner sein als der niedrigste Energiezustand E_0 , auch Grundzustand genannt, es sei denn beide sind gleich. Diese grundsätzlich verschiedenen Situationen sind in Abb. 1.1 b) bzw. c) graphisch skizziert. Bei verschwindender Temperatur (durch dicke schwarze Linien dargestellt) gibt es keine Zustände für den Fall $\mu < E_0$. Für $\mu = E_0$ können sich die Teilchen dagegen im Grundzustand aufhalten. Auch für endliche Temperaturen ist der Grundzustand bevorzugt besetzt, aber nun sind auch alle anderen Zustände möglich. Der Unterschied zwischen den Fällen $\mu < E_0$ und $\mu = E_0$ ist dennoch deutlich. Während die Besetzung des Grundzustands im ersten Fall endlich bleibt, divergiert sie im zweiten Fall, so dass der Grundzustand makroskopisch besetzt wird. Das wäre an sich noch nicht sehr verwunderlich, denn auch unterscheidbare Teilchen, die der Boltzmann-Statistik genügen, besetzen am absoluten Temperatur-Nullpunkt alle den Grundzustand. Bei endlichen Temperaturen werden aber in diesem klassischen Fall alle Zustände durch endliche Teilchenzahlen besetzt. Somit würde der Grundzustand nach der Boltzmann-Verteilung (1.1) keine Besonderheiten aufweisen. Bemerkenswerter Weise treten beim Grundzustand von Bosonen auch bei endlichen Temperaturen noch singuläre Besetzungszahlen auf, und das macht sie so interessant.

Man bedenke, dass sich die mittlere Gesamtteilchenzahl als die Summe der Teilchenzahlen (1.3) über alle Energiezustände E ergibt. Bei einem kontinuierlichem Energiespektrum entspricht das der Fläche unter der $N^B(E)$ -Kurve in Abb. 1.1 b) bzw. c). In einem Ensemble mit einer festen

Temperatur kann diese Fläche für den Fall $\mu < E_0$ durch Variation des chemischen Potentials μ bis zu einem kritischen Maximalwert eingestellt werden. Je näher μ an die Grundzustands-Energie E_0 herankommt, umso größer kann die Fläche werden. Doch E_0 stellt für das chemische Potential eine obere Schranke dar, und somit kann eine Erhöhung der Teilchenzahl über den kritischen Wert durch keinen weiteren μ -Anstieg kompensiert werden. Zum ersten mal wurde das von Einstein in der Arbeit [2] erkannt. Er verglich die Situation mit einem Wasserdampf-Kondensat-System in der Luft. Überschreitet nämlich die Dampfkonzentration einen bestimmten Wert, so ist die Luft gesättigt und Wasserdampf kondensiert in Form von Tröpfchen. Letzterer beansprucht dann kein "besonderes" Volumen und trägt nicht zum Dampfdruck bei. Analog dazu kondensieren Bosonen, indem sie ihren Grundzustand makroskopisch besetzen und darin von der Thermodynamik entkoppeln, so dass die Analogie zum Wasserdampf auf den Energieraum zu übertragen wäre.

Eine ähnliche Überlegung lässt sich mit einem System anstellen, in dem man die mittlere Teilchenzahl festhält und die Temperatur variiert. Bei einer Abkühlung wird die Fläche unter $N^B(E)$ verringert, wie man unmittelbar aus Abb. 1.1 b) und c) sieht. Diesem Effekt kann man bis zu einer kritischen Temperatur durch eine Erhöhung des chemischen Potentials entgegenwirken. Der kritische Temperaturwert lässt sich für das homogene Bose-Gas mit der vorgegebenen Dichte n nach der Gleichung

$$T_c = 0.08391 \frac{h^2}{Mk_B} n^{2/3} \quad (1.5)$$

bestimmen, wobei M die Masse der Bosonen bezeichnet. Würde man ein System auf Temperaturen unterhalb dieses kritischen Wertes kühlen, so müsste sich ein Teil der Atome im Kondensat befinden. Der Anteil solcher kondensierter Teilchen lässt sich für ein homogenes System im thermodynamischen Limes unendlich vieler Teilchen entsprechend der Gleichung

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_0}{N} = \Theta(T_c - T) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \quad (1.6)$$

bestimmen, wobei Θ die Heavisidesche Stufenfunktion ist. Diese Temperatur-Abhängigkeit ist in Abb. 1.2 graphisch dargestellt. Wie man daraus sieht, beginnt die Kondensation am kritischen Punkt und erfasst für kleinere Temperaturen immer mehr Teilchen. Beim absoluten Temperatur-Nullpunkt würde sogar die sämtliche Substanz kondensieren. Diese befindet sich dann in einem einzigen reinen Quantenzustand (Grundzustand) und ist makroskopisch zugänglich. Interessanterweise findet der Kondensations-Prozess lediglich aufgrund der Statistik statt und bedarf keiner äußeren oder inneren Kräfte.

In der oben genannten Arbeit [2] versuchte Einstein, ein etwas merkwürdiges Verhalten einiger Metalle zu erklären, die bei sehr tiefen Temperaturen ihren Stromleitungs-Widerstand fast gänzlich verlieren. Dieser Effekt der so genannten Supraleitung wurde bereits im Jahr 1911 von Kamerlingh Onnes entdeckt und blieb bis auf einige Vermutungen über den quantenmechanischen Ursprung weitestgehend unverstanden. Einstein erklärte dies mit einer Kondensation des Elektronengases. Obwohl wir heute wissen, dass Elektronen selbst Fermionen sind und eigentlich nicht direkt kondensieren können, war das Phänomen dadurch in seinem Kern dennoch richtig erfasst. Mehrere

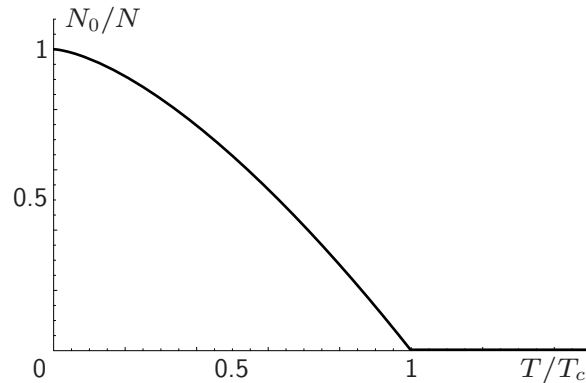


Abbildung 1.2: Temperaturabhängigkeit der Kondensat-Fraktion in einem homogenen System nach Gleichung (1.6).

Jahrzehnte später (1957) hatten Bardeen, Cooper und Schrieffer in ihrer BCS-Theorie den Effekt mit Bildung kompositer bosonischer Teilchen, der so genannten Cooper-Paare, quantenmechanisch korrekt beschreiben können [4]. Somit zeigten sich experimentell die ersten Kondensations-Effekte ironischerweise tatsächlich an ursprünglich fermionischen Teilchen.

Auch eine weitere interessante Tieftemperatur-Erscheinung ist auf Kamerlingh Onnes zurückzuführen. In seinen Untersuchungen zum ultrakalten Helium (bosonisches ^4He -Isotop) bildete sich an den Gefäßwänden ein dünner Film. Dieser benetzte möglichst große Oberflächen, wodurch die Flüssigkeit entgegen der Gravitation die Wände hochkroch. Dieser Effekt wurde später in Verbindung mit der so genannten Suprafluidität erklärt, die im Jahre 1937 von Pjotr Kapiza experimentell entdeckt und theoretisch von Fritz London und Lew Landau beschrieben wurde. Dabei handelt es sich um ein Quantenphänomen, bei dem die Flüssigkeit unter anderem scheinbar ohne Reibung fließt, also ein mechanisches Analogon zur Supraleitung darstellt. Eine noch komplettere Analogie zur Supraleitung wurde hergestellt, als 1971 von Lee, Osheroff und Richardson die Suprafluidität auch im fermionischen Isotop ^3He gefunden wurde. Die einzelnen Atome sind zwar stark wechselwirkende Fermionen, lassen sich aber gemäß der Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeiten in der Sprache schwach wechselwirkender Quasiteilchen beschreiben. Diese Quasiteilchen haben gewisse Ähnlichkeiten mit den Cooper-Paaren bei Elektronen in Supraleitern. Da die Suprafluidität ein makroskopischer Quanteneffekt ist und bei einer bestimmten Temperatur einsetzt, besteht in dieser Hinsicht eine Verbindung zur Bose-Einstein-Kondensation. Jedoch werden die ^4He - und ^3He -Supraflüssigkeiten nicht von der ursprünglich wechselwirkungsfreien Theorie der Bose-Gase beschrieben, denn obwohl sich diese Systeme bei verschwindender Temperatur komplett im suprafluiden Zustand befinden, so gehören doch lediglich 10% aller Teilchen der Grundzustands-Fraktion an.

Ein bosonisches System mit nahezu verschwindender Wechselwirkung liegt in Form elektromagnetischer Strahlung vor, die als Gas von Photonen angesehen werden kann. Dieses kann sogar in einem stark kohärenten Zustand erzeugt werden, dem so genannten Laser-Licht. Zuerst wurde es im Jahre 1960 von Maiman in einer Mikrowellenstrahlung realisiert (MASER). Allerdings ist die Erzeugung von Laser-Licht sehr stark an die Ungleichgewichts-Bedingung mit der Umgebung

gebunden. Deswegen kann es in dieser Form keineswegs der für das thermische Gleichgewicht entwickelten Bose-Einstein-Verteilung genügen. Betrachtet man jedoch die Gleichgewicht-Situation z.B. in einem Schwarzkörperstrahler, so muss man feststellen, dass es dort keine Erhaltung der Photonenzahl gibt. Eine Temperaturniedrigung würde z.B. nicht zur Bildung eines kohärenten Kondensat-Zustandes führen, sondern zu einer Absorption in die Wände des schwarzen Körpers. Die Situation ist im Prinzip ähnlich der eines Teilchengas-Problems unterhalb der Kondensations-Temperatur. Die thermisch angeregten Teilchen verschwinden bei Temperaturniedrigung in das Grundzustand-Kondensat. Diesmal jedoch repräsentiert ein Photon immer einen angeregten Zustand des elektromagnetischen Feldes, und dessen Grundzustand ist das Vakuum.

Ähnlich einem Photon, das die Anregungen des elektromagnetischen Feldes darstellt, existieren in einem Festkörper noch weitere bosonische Anregungen. Dazu zählen Phononen, Polaritonen, Exzitonen, Magnonen und andere Quasiteilchen. Sie alle stellen schwach wechselwirkende Systeme dar, die sich unter Umständen in einem einzigen makroskopischen Quantenzustand bringen lassen. Diese Art von Kondensaten wurde bereits Anfang der Neunziger am Beispiele der Exzitonen in einem Halbleiter realisiert [5], weitere Vertreter dieser Art folgten in Form von Polaritonen [6], Phononen [7] und Magnonen [8]. Doch befinden sich all diese Systeme fern vom thermischen Gleichgewicht mit ihrer Umgebung und ähneln auch sonst eher dem oben beschriebenen Photonengas.

Gesucht wurde also weiterhin nach einem System aus einer festen Zahl massiver bosonischer Teilchen mit möglichst schwacher Wechselwirkung. Dieses vermutete man beim Spinpolarisierten Wasserstoff, das selbst beim absoluten Temperatur-Nullpunkt noch gasförmig bleibt [9], oder alternativ bei stark verdünnten Gasen. Da sie aber nur bei sehr niedrigen Temperaturen kondensieren können, kostete es noch weitere Anstrengungen, bis schließlich 1995 die ersten fast reinen Bose-Einstein-Kondensate in den Labors von Wieman und Cornell am JILA [10], sowie von Ketterle am MIT [11] mit stark verdünnten Natrium- bzw. Rubidium- Gasen realisiert wurden.

Seit diesen ersten experimentellen Realisierungen entwickelte sich das Gebiet der Bose-Einstein-Kondensation explosionsartig. So wurden z.B. bosonische Isotope fast aller Alkaliatome [10–13], sowie des Wasserstoffs [14], Ytterbiums [15] und Chroms [16] zur Kondensation gebracht. Auch konnte man ^4He -Atome in einem kondensat-artig makroskopisch besetzten Anregungs-Zustand [17] nachweisen. Es wurden quantenmechanische Eigenschaften des Kondensats experimentell anhand der Interferenz zwischen zwei Kondensatwolken studiert [18], und auch ein Materielaser wurde realisiert [19]. Weiterhin wurden suprafluide Eigenschaften der Kondensate untersucht und mit dem Auftreten typischer Flussschlauch-Strukturen nachgewiesen [20,21]. Außerdem konnte das ursprünglich in einer harmonischen Falle erzeugte Kondensat in ein von Lasern erzeugtes optisches Gitter geladen werden Bloch. Dadurch ergab sich eine weitere Spielwiese für Untersuchungen der Materie auf mikroskopischer Skala. So konnte der Quanten-Phasenübergang zwischen einem eher kristallinen Mott-Isolator-Zustand und dem suprafluiden Zustand mit stark ausgeprägtem Tunneln zwischen den Gitterplätzen studiert werden. In einem optischen Gitter konnten weiterhin quasi-eindimensionale Objekte erzeugt werden [23], in denen sich Bosonen unter bestimmten Bedingungen wie Fermionen verhalten (Tonks-Girardeau-Gas [24]).

Die Stärke der Streu-Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Atomen kann in einem ultrakalten

verdünnten Bose-Gas über einen weiten Bereich mit Hilfe der so genannten Feshbach-Resonanz manipuliert werden [25]. Diese Wechselwirkung kann man sogar zwischen einer Anziehung und einer Abstoßung durchstimmen. So können aus einem schwach wechselwirkenden ein-atomigen Gas stark gekoppelte Moleküle erzeugt werden, selbst wenn solche Verbindungen mit konventionellen Methoden nicht zustande kommen würden. Letzteres lässt sich natürlich auch mit Fermionen durchführen. Dabei studiert man Übergänge zwischen den Cooper-Paar-bildenden Fermionen zu Bose-Einstein-kondensierenden bosonischen Molekülen, den so genannten BCS-BEC-Crossover [26].

Durch die Entwicklung der Tieftemperaturphysik im Zusammenhang mit der Bose-Einstein-Kondensation wurde ein hohes Maß an Kontrolle experimenteller Parameter erreicht. Durch die relative Einfachheit und eine absolute Reinheit der Systeme können nun Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Bestandteilen detaillierter und gezielter studiert werden als je zuvor. Aber auch für die Technik sind Entwicklungen der Bose-Einstein-Kondensation potentiell von großer Bedeutung, insbesondere wenn Kondensate als Träger der quantenmechanischen Information in den Quantencomputern eingesetzt werden könnten.

1.2 Experimentelle Realisierung der Bose-Einstein-Kondensation

Für die experimentelle Realisierung des Bose-Einstein-Kondensats muss man bedenken, dass alle Systeme bei tiefen Temperaturen in ihrem Gleichgewicht Festkörper sind [27,28]. Die Ausnahmen sind das flüssige ^4He und der gasförmige spinpolarisierte Wasserstoff. Die ersten Versuche zur Bose-Einstein-Kondensation massiver Gas-Teilchen beschäftigten sich genau mit diesem letzteren Kandidaten [29]. Doch die Methoden zu seiner Kühlung waren noch nicht genügend ausgereift. Zur etwa gleichen Zeit begannen Versuche zur Kondensation von Alkalimetall-Gasen, die auch als Erstes zum Erfolg führten. Doch wie konnte es überhaupt dazu kommen, dass ein solches Gas in einem Bose-Einstein-kondensierten Zustand vorliegt statt dass es zu einem Festkörper wird? Natürlich ist es nur in einem metastabilen gasförmigen Zustand mit einer beschränkten Lebensdauer möglich. Zum besseren Verständnis der Situation betrachten wir die beiden möglichen Wechselwirkungsarten. Zum Einen sind das elastische Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen, welche das Thermalisieren zwischen den Teilchen ermöglichen und somit für das kinetische Gleichgewicht sorgen, ohne dabei das Kondensat zu zerstören. Zum Anderen sind das aber inelastische Rekombinations-Prozesse, die zur unerwünschten Kristallisation führen. Dazu bedarf es glücklicherweise eines dritten Stoßparameters, der die überschüssige Energie absorbiert. Bei genügend niedrigen Dichten kann man davon ausgehen, dass solche Drei-Körper-Rekombinationen gegenüber den elastischen Prozessen unterdrückt sind, wodurch sich die Lebensdauer des kondensierten Zustandes erhöht. Das einzig unerfreuliche ist dabei, dass niedrige Dichten in tiefen Kondensations-Temperaturen resultieren. So entspricht beispielsweise eine Dichte von $n \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, bei der die Lebenszeit des metastabilen Rubidium-Gaszustandes noch 0.1 Sekunden beträgt, einer nach der Gleichung (1.5) abgeschätzten kritischen Temperatur von etwa 400 nK. Um so niedrige Temperaturen zu erreichen, muss man

einen großen Aufwand betreiben. Die dazu notwendigen experimentellen Techniken sollen in diesem Abschnitt kurz skizziert werden.

Verdünnte Gase von Alkali-Atomen können in einem Ofen erzeugt werden. Die darin enthaltenen langsameren Anteile werden dann unmittelbar in eine magneto-optische Falle geladen, oder der gesamte Teilchen-Strahl wird Zeeman-vorgekühlt [30] und erst dann geladen. In einer magneto-optischen Falle werden die Atome anschließend mit Magnetfeldern gehalten und mit Hilfe des Laser-Lichts gekühlt [31]. Dazu verwendet man Licht mit einer Frequenz, die gegenüber der Resonanzfrequenz der Atome leicht rotverschoben ist. Ein sich auf die Lichtquelle zubewegendes Teilchen sieht dann das Licht, das aufgrund des Dopplereffekts eine Blau-Verschiebung erfährt und nun resonant absorbiert werden kann. Eine kurze Zeit später wird das Licht wieder emittiert, diesmal aber spontan und somit in alle Richtungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit. Dadurch erhalten die Teilchen effektiv nur in der Absorptions-Phase einen Rückstoß und werden langsamer. Die mittlere Energie im Gas und somit auch die Temperatur sinkt. Eine weitere Verfeinerung dieser Methode ergab sich unter Ausnutzung der inneren Freiheitsgrade einzelner Atome [32] und führte zur so genannten Sysiphus-Kühlung.

Mit der oben geschilderten Methode der Laser-Kühlung erreicht man eine Temperatur von etwa $100 \mu\text{K}$, was noch zu warm ist, insbesondere angesichts der sehr niedrigen Teilchendichte. Letztere kann man jedoch leicht erhöhen, indem man die Teilchen in eine magnetische Dipolfalle einsperrt [33]. Diese erzeugt für ein Teilchen der Masse M ein Potential, das sich in allen gängigen Konfigurationen in sehr guter Näherung als harmonisch beschreiben lässt:

$$V(\mathbf{x}) = \frac{M}{2} \left[\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2 \right]. \quad (1.7)$$

Die Fallenfrequenzen ω_i ($i=1, 2, 3$) sind dabei ansteigende Funktionen des äußeren Magnetfeldes. Erhöht man letzteres, so wird das in der Falle eingefangene Gas komprimiert. Die Temperatur steigt dadurch etwas an. Aber in einer magnetischen Falle besteht die Möglichkeit einer weiteren Kühlung, die einer klassischen Verdampfungs-Kühlung ähnelt [34]. Dabei werden Teilchen mit höherer Energie aus der Falle entlassen, während die niedrigerenergetischen behalten werden. Nach einer Rethermalisierung ist die Temperatur im System demzufolge niedriger. Dieser Prozess lässt sich mehrfach wiederholen. Dadurch verliert man zwar bis zu 90 % aller Teilchen, aber die übriggebliebenen sind dafür dichter gepackt und befinden sich bei einer viel niedrigeren Temperatur. Technisch wird die Verdampfungskühlung dadurch bewerkstelligt, dass man eine Mikrowelle einstrahlt, die resonant Zeemann-Übergänge bei Atomen hervorruft, die sich am Rande der magnetischen Falle befinden. Diese äußeren Bereiche werden vorwiegend von den höherenergetischen Teilchen besetzt. An diesen verursacht die Mikrowelle einen Spin-Umklapp, wodurch die Magnetfalle selbst zu einem Berg wird und die betroffenen Atome rauswirft. Die durch diese raffinierte Methode erreichte Temperatur liegt tatsächlich schon unterhalb der erforderlichen Kondensations-Temperatur. Letztere lässt sich in einer harmonischen Falle (1.7) mit der mittleren Fallenfrequenz $\tilde{\omega} \equiv (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/3}$ nach der Gleichung

$$\lim_{N \rightarrow \infty} T_c = 0.1497 \frac{h\tilde{\omega}}{k_B} N^{1/3} \quad (1.8)$$

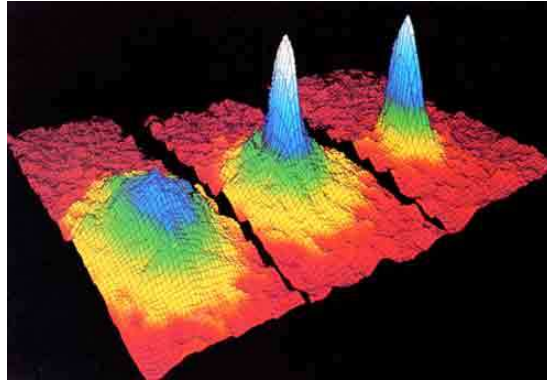


Abbildung 1.3: Dichteprofil des Rubidium-Gases in einer (anisotropen) harmonischen Falle aus [35]. Von links nach rechts sind Messungen für Temperaturen etwas oberhalb des kritischen Wertes, dessen halben Wertes und fast am absoluten Temperatur-Nullpunkt dargestellt.

ausrechnen. Dies gilt natürlich nur im thermodynamischen Limes, in dem die Teilchenzahl N als groß vorauszusetzen ist, aber die mittlere Fallenfrequenz $\tilde{\omega}$ entsprechend so klein zu wählen ist, dass der Ausdruck $\tilde{\omega}N^{1/3}$ endlich bleibt. Im MIT-Experiment [11] handelte es sich um eine relativ große Zahl $N \approx 6 \cdot 10^5$ an Rubidium-Atomen und die mittlere Fallenfrequenz $\tilde{\omega} = 2\pi \cdot 66$ Hz, sodass die erforderliche Kondensations-Temperatur mit $T_c \approx 250$ nK abgeschätzt werden konnte.

Es bleibt hier nur noch zu klären, wie das Kondensat experimentell zu detektieren ist. Die gängige Methode besteht in der Bestrahlung des Systems mit Licht und einer anschließenden Auswertung der davon geworfenen Schattenbilder. In einer harmonischen Falle wird die Kondensation von einer deutlich erhöhten Dichte im Fallenzentrum begleitet. Der dichte Kondensatpeak wirft einen dunkleren Schatten als das viel weniger dichte thermische Gas und kann dadurch identifiziert werden. Da jedoch die in der Falle eingefangenen Gase bei niedrigen Temperaturen sehr dicht und klein im Volumen werden, stellt dieses Vorhaben große Anforderungen an das Auflösungsvermögen der Apparatur. Außerdem wirkt die größere optische Dichte auf das Licht wie eine Linse und führt zu Refraktionseffekten, die der Absorption überlagert sind. Die Verwendung höherer Lichtfrequenzen würde solche Effekte reduzieren, könnte aber die eigentlichen Verhältnisse im Kondensat stören. Eine einfachere Lösung des Problems liegt in der Idee, das Kondensat mit dem thermischen Gas-Anteil aus der Falle zu entlassen und die Expansion zu beobachten. Je nach Expansionszeit (time of flight) ist die Gas-Wolke groß und verdünnt genug, um ohne Probleme mit optischen Mitteln beobachtet zu werden. Der Kondensat-Anteil verbreitert sich dabei deutlich langsamer als der thermische Rest und konzentriert sich deswegen im Zentrum der Wolke. Für eine derartige Messung bedarf es lediglich einer Magnetfalle, die möglichst schnell ausgeschaltet werden kann. Das große Problem dieser Methode besteht nun darin, dass das Kondensat zerstört wird und für jede Messung neu aufgebaut werden muss. Eine mit dieser Methode aufgenommene Dichteverteilung ist in Abb. 1.3 für verschiedene Temperaturen dargestellt.

In den ersten experimentellen Realisierungen vom 1995 am JILA [10] wurden nur wenige Tausend Atome kondensiert. Seitdem wurden die experimentellen Apparaturen verbessert und größere Kon-

densate mit mehreren Milliarden Teilchen ermöglicht [36]. Auch die erreichten Temperaturen sind auf Bruchteile eines Nanokelvins gesunken [37]. Viele neue Fallen-Konfigurationen entstanden und wurden gemäß den experimentellen Anforderungen optimiert. Durch Verwendung weiterer chemischer Elemente wurden auch andere Kühlverfahren ermöglicht und erfolgreich angewendet. So wurde z.B. zur Vorkühlung des spinpolarisierten Wasserstoffs die kryogene Entspannungs-Kühlung verwendet [38]. Wegen der sehr kleinen Masse und somit großen Rückstoßraten hatte sich die Laser-Kühlung hier als weniger geeignet herausgestellt.

Eine sehr interessante und auch für zukünftige Entwicklungen mit dipolaren Molekülen vielversprechende Methode ist die so genannte Entmagnetisierungs-Kühlung [39]. Diese wurde kürzlich an Chromatomen, die ein großes magnetisches Dipolmoment besitzen, erfolgreich getestet [40]. Das Kernstück dieser Methode besteht in der Möglichkeit, bei niedrigen äußeren Magnetfeldern mehrere Zeemann-Niveaus zu besetzen. Dadurch gewinnt das System Spin-Freiheitsgrade, die allein durch elastische s-Wellen-Streuungen nicht genutzt werden können, aber durch Spinänderungen bei magnetischen Dipol-Wechselwirkungen zur Verfügung stehen. Die Wärmekapazität nimmt dabei zu, was in einem geschlossenen System zur Temperaturerniedrigung führt. Durch gezieltes optisches Pumpen werden anschließend höhere Zeemann-Zustände entvölkert und der Zyklus kann wiederholt werden. Der damit verbundene Teilchenverlust ist bei Chrom erfreulicherweise um den Faktor vier niedriger als bei der üblichen Verdampfungskühlung. Die auf diesem Wege erreichbare Temperatur ist für die Kondensation zwar nicht ganz ausreichend, ein Großteil des Kühlungsprozesses kann aber in diesem Verfahren erfolgen.

Neben zahlreichen Verbesserungen und Neuentwicklungen im Bereich der Kühltechnik sind im letzten Jahrzehnt auch viele neue strukturbildende Techniken entstanden. Dazu zählen in erster Linie optische Gitter, in denen mit gegenläufigen Laserstrahlen stehende Wellen und somit periodische elektrische bzw. magnetische Potentiale gebildet werden. Diese werden dem Hintergrundpotential der magneto-optischen Fallen überlagert. Verschiedene Anordnungen von Laserpaaren ermöglichen somit lineare, quadratische und kubische Gitter, in welchen solch relevante Größen wie Gitterabstand, Gittertiefe und die Lage gegenüber dem Fallenpotential kontrolliert verändert werden können [22]. Aktuell wird aber auch an Spinor-Bose-Gasen in hexagonalen oder dreieckigen Gittern geforscht, wodurch man sich unter anderem Untersuchungen von Frustrations-Effekten in der antiferromagnetischen Phase verspricht. Weiterhin wurden für Experimente mit Spinorkondensaten, in denen eine Mischung aus Kondensaten mit verschiedenen Spineinstellungen vorliegt, optische Dipolfallen weiterentwickelt [41]. Gerade diese erlauben Untersuchungen ohne gezielte Präselektion nach magnetischen Freiheitsgraden. In einer solchen Falle wird auf die Teilchenwolke ein weit von der Resonanz blauverschobenes Laserlicht eingestrahlt. Dies induziert bei Atomen ein elektrisches Dipolmoment, das gegenphasig zum Licht läuft. Dadurch werden von Atomen Gebiete mit hohen elektrischen Feldstärken bevorzugt und solche werden von Laserstrahlen spezieller Geometrie in der Fallenmitte gegeben.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass vereinte Anstrengungen vieler Forschungsgruppen bei der Erzeugung und Manipulation von Bose-Einstein-Kondensaten zu einem Schub im technischen Fortschritt geführt haben. So gibt es schon heute kompakte kommerzielle Apparate zur Erzeugung von Kondensaten mit einer Lebensdauer der kondensierten Phase von mehreren Minuten. Zur

technischen Realisierung eines Quantencomputers reicht das natürlich nicht aus und dahingehend wird noch Vieles erforderlich sein. Auch die Möglichkeiten eines Materie-Lasers sind noch lange nicht erschöpft. Noch viel wichtiger ist jedoch der interdisziplinäre Charakter der BEC-verwandten Forschung, der zum tieferen Verständnis der Physik beiträgt.

1.3 Bose-Einstein-Kondensation in endlichen Systemen

In den ersten experimentell realisierten Kondensaten handelte es sich um Systeme von einigen Tausend bis Hunderttausend Teilchen. Seitdem wurden viele Bestrebungen unternommen, immer größere kondensierte Ensembles zu erzeugen, und tatsächlich liegen heute deren Teilchenzahlen zwischen mehreren Hunderttausend und einigen Milliarden. Die meisten theoretischen Untersuchungen zur Bose-Einstein-Kondensation werden allerdings im thermodynamischen Limes mit unendlich vielen Teilchen in unendlich großen räumlichen Strukturen durchgeführt. Die von der Endlichkeit realer Objekte stammenden Effekte werden als die so genannten Finite-Size-Korrekturen zum thermodynamischen Limes beschrieben. Doch in einigen Aspekten unterscheiden sich endliche Systeme prinzipiell von den unendlichen Modellvorstellungen. Um dies zu sehen, rekapitulieren wir zuerst die Situation im thermodynamischen Limes.

Wie im ersten Abschnitt bereits beschrieben, gibt es in einem idealen Bose-Gas eine bestimmte kritische Temperatur, unterhalb der ein Teil der Substanz in den kondensierten Zustand übergeht. Speziell für das Modell des homogenen Gases wurde die kritische Temperatur (1.5) und der Kondensationsanteil (1.6) vorhergesagt. Wie man aus Abb. 1.2 unschwer erkennt, handelt es sich beim Kondensationsprozess um einen Phasenübergang zweiter Ordnung (nach Landau-Kriterium) mit dem Kondensatteilchen-Anteil als Ordnungsparameter. Letzterer verschwindet nämlich oberhalb der kritischen Temperatur T_c und steigt unterhalb dieser stetig an. Dieses Verhalten ist keineswegs spezifisch für den homogenen Fall, sondern ist auch in einer harmonischen Falle (1.7) zu finden. Die kritische Temperatur ist diesmal durch (1.8) gegeben, und der Anteil kondensierter Teilchen ist

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_0}{N} = \Theta(T_c - T) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right]. \quad (1.9)$$

Dieses Resultat ist in Abb. 1.4 durch die schwarze Kurve dargestellt. Die Struktur eines Phasenübergangs zweiter Ordnung ist auch diesmal charakteristisch. Häufig wird deswegen die Bose-Einstein-Kondensation mit einem solchen Phasenübergang gleichgesetzt. Aber wie sieht es in einem endlichen Ensemble aus?

Zuerst ein paar Worte zur Sprachregelung. Wenn wir sagen, dass ein System zur Hälfte kondensiert ist, dann ist das eine statistische Aussage und meint, dass ein Teilchen aus diesem System mit einer fünfzigprozentigen Wahrscheinlichkeit im Kondensat zu finden ist. Diese letzte Aussage ist zwar der ursprünglichen Aussage mit der Mengenangabe in einem unendlichen ergodischen Ensemble äquivalent, ist es aber in endlichen Gesamtheiten keinesfalls. Betrachtet man z.B. den extremen Fall eines Ein-Teilchen-Systems, dann hat es eben keinen Sinn, von einem Teilsystem zu sprechen,

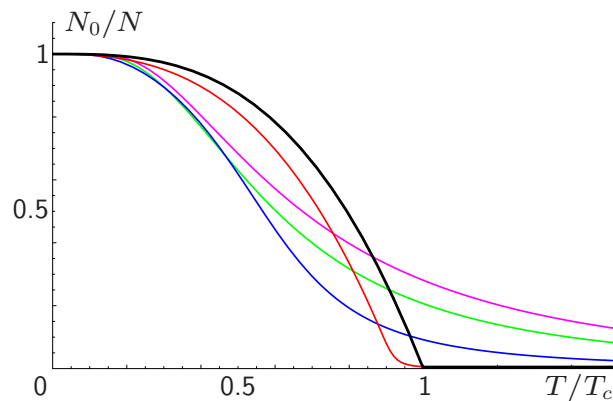


Abbildung 1.4: Grundzustands-Fraktion für kanonische bosonische Ensembles mit mittleren Teilchenzahlen $N = 1$ (lila), $N = 2$ (grün), $N = 10$ (blau), $N = 1000$ (rot) und im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ (schwarz) in einer harmonischen Falle. Die Darstellung ist in Abhängigkeit der reduzierten Temperatur T/T_c , wobei T_c die kritische Temperatur (1.8) bedeutet. Alle Kurven entstammen Untersuchungen aus Abschnitt 3.2.3 und sind für die gleiche mittlere Teilchenzahldichte berechnet.

die entsprechende Wahrscheinlichkeits-Aussage ist aber nach wie vor gültig. Aber es gibt noch gravierendere Unterschiede zwischen endlichen und unendlichen Bose-Gasen.

In endlichen Systemen sind alle Quantenzustände von einer endlichen (oder verschwindenden) Teilchenzahl besetzt. Wäre jedoch das chemische Potential in einem großkanonischen Ensemble der Grundzustands-Energie gleich, so müsste letztere nach der Bose-Einstein-Verteilung (1.3) eine singuläre Besetzungszahl aufweisen, und das ist nicht möglich. In einem endlichen Ensemble ist somit das chemische Potential immer kleiner als die Grundzustands-Energie. In der von uns anfangs beschriebenen Situation im thermodynamischen Limes entsprach das aber gerade den Verhältnissen in der nichtkondensierten Phase. Betrachtet man weiterhin die Kondensat-Fraktion in einem Ensemble aus z.B. $N = 1000$ Teilchen, so findet man die in Abb. 1.4 durch die rote Kurve dargestellte Temperaturabhängigkeit. Diese Kurve ist glatt und weist keine typischen Merkmale des Phasenübergangs auf, sondern zeigt stattdessen das so genannte Crossover-Verhalten. Eine bestimmte kritische Temperatur gibt es hierbei nicht. Verbindet man somit Bose-Einstein-Kondensation mit einem Phasenübergang, so wird man bei endlichen Systemen nicht fündig. Nun stellt sich also die Frage, ob die Bose-Einstein-Kondensation in realen Bose-Gasen mit endlicher Teilchenzahl überhaupt stattfindet.

Eine Antwort auf diese Frage kann man nur geben, wenn man eine bestimmte Definition der Bose-Einstein-Kondensation hat. Die gängige Definition geht von einer “makroskopischen Besetzung des Grundzustandes unterhalb einer kritischen Temperatur” aus. Doch diese Definition ist speziell auf den thermodynamischen Limes zugeschnitten, denn nur dort ist der Ausdruck “makroskopisch” eindeutig definiert und eine kritische Temperatur ist gegeben. Worüber man auch in einem endlichen Ensemble eine definitive Aussage treffen kann, ist die Besetzung des Grundzustandes selbst, denn sie lässt sich ausrechnen und, was noch wichtiger ist, experimentell messen. Deswegen

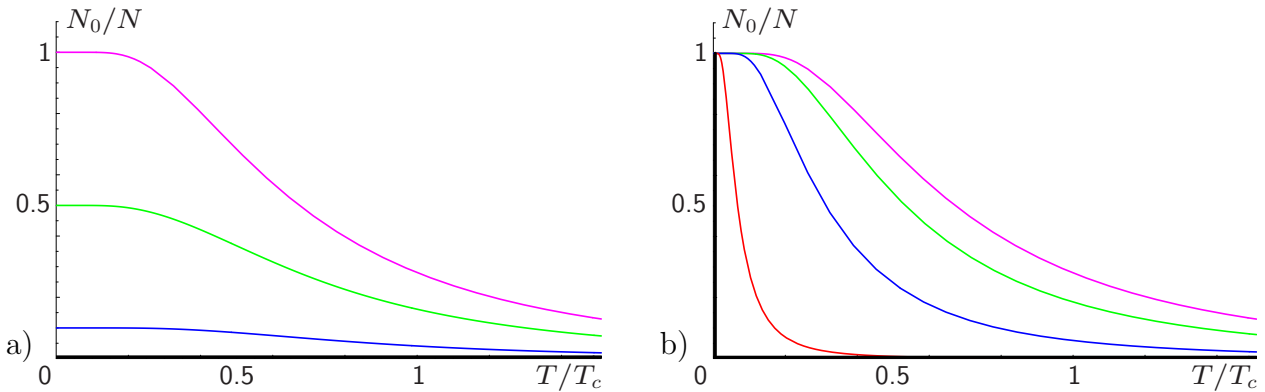


Abbildung 1.5: Grundzustands-Fraktion für kanonischen Ensembles aus $N = 1$ (rosa), $N = 2$ (grün), $N = 10$ (blau), $N = 1000$ (rot) Teilchen und im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ (schwarz). Dargestellt ist die Temperaturabhängigkeit a) für Fermionen und b) für klassisch unterscheidbare Teilchen in einer harmonischen Falle. Die mittlere Teilchenzahldichte ist für alle Kurven konstant gehalten worden. Diese können in Analogie zu Untersuchungen aus Abschnitt 3.2.3 ausgerechnet werden.

werde ich mich in meiner Promotionsschrift auf diesen positivistischen Standpunkt stellen und von einem Kondensat als Grundzustands-Fraktion sprechen. Um größeren Diskussionen vorzubeugen, sollte man das Ausbilden einer solchen Fraktion als Quasi-Kondensation bezeichnen. Der Kürze halber werde ich es allerdings auch Kondensation nennen, obwohl es zugegebenerweise nicht ganz der obigen Definition entspricht.

Nun widmen wir uns noch der Frage, wie weit gefasst unser Begriff der Quasi-Kondensation ist. Dabei beschränken wir uns auf die Beschreibung einer von Anfang an vorgegebener Teilchenzahl innerhalb des kanonischen Ensemble. Es spricht hier eigentlich nichts dagegen, die Situation in einem Ein-Teilchen-Ensemble zu betrachten. Nun bemerken wir aber, dass es hierbei keinen Unterschied zwischen einem bosonischen, einem fermionischen und einem klassisch unterscheidbaren Teilchen gibt. Die Differenz besteht in Symmetrieeigenschaften bezüglich des Teilchenaustauschs, und diesen kann es hier nicht geben. Es drängt sich nun die Frage auf, ob die Kondensation überhaupt etwas Bosonen-spezifisches ist. Im Prinzip ist es die Quasi-Kondensation sicherlich nicht, dennoch spielen Bosonen dabei eine etwas ausgezeichnete Rolle. Das soll am Vergleich zwischen Abb. 1.4 für Bosonen mit Abb. 1.5 a) für Fermionen und 1.5 b) für klassisch unterscheidbare Teilchen verdeutlicht werden. Für Fermionen wird die Grundzustands-Besetzung für größere Teilchenzahlen immer kleiner, bis sie schließlich im thermodynamischen Limes gänzlich verschwindet. Darin spiegelt sich das Pauli-Prinzip wider, das die Mehrfach-Besetzungen einzelner Zustände verbietet (so zumindest bei dem hier betrachteten nicht Spin-entarteten Fall, welcher im spinpolarisierten Gas vorliegt). Für unterscheidbare Teilchen, die der Boltzmann-Statistik genügen, ist die Grundzustands-Besetzung selbst nicht unterdrückt, aber der Temperaturbereich, in dem sich eine solche bemerkbar macht, wird für größere Ensembles immer geringer. Im thermodynamischen Limes findet hierbei die Quasi-Kondensation schließlich nur bei einer verschwindenden Temperatur statt. Im Gegensatz dazu stehen Bosonen, deren Grundzustands-Besetzung auch im thermodynamischen Limes noch bei endlichen Temperaturen überlebt (siehe Abb. 1.4). In diesem Limes ergibt

die Quasi-Kondensation bei Bosonen sogar ein typisches Beispiel eines Phasenübergangs und man kann von der Bose-Einstein-Kondensation im üblichen Sinne sprechen.

Der Unterschied zwischen den Fermionen und den klassisch unterscheidbaren Teilchen, sowie den identischen Bosonen ist gravierend und bedarf keiner weiteren Ausführung. Aber worin besteht nun die eigentliche Differenz zwischen den letzten beiden Teilchensorten? Alle solche Teilchen könnten sich im tiefsten energetischen Zustand aufhalten, und statistisch gesehen spricht auch nichts dagegen. So ist es zumindest am Nullpunkt der Temperatur in Abwesenheit von thermischen Fluktuationen. Durch eine Temperaturerhöhung kann es aber von Vorteil sein, auf Kosten höherer mechanischer Energie die Entropie zu erhöhen. Genau dieser Mechanismus ist für die thermische Entvölkerung des Grundzustandes verantwortlich. Aber auch genau in diesem Entropie-Argument liegen die Unterschiede zwischen den klassischen und bosonischen Teilchen. Eine Vertauschung zweier hypothetischer klassischer Teilchen führt immer zu einer neuen Situation, und das ist der Inhalt der Vertauschungs-Entropie. Befinden sich jedoch Bosonen im gleichen energetischen Zustand (z.B. Grundzustand), so ändert ihre Vertauschung nichts an der physikalischen Situation. Aufgrund dessen verursachen Bosonen im gleichen Zustand auch keine Entropie. Erst wenn sich in einem System zwei Bosonen verschiedener Energie befinden, kommt die Entropie ins Spiel und sorgt für die thermische Entvölkerung. Das ist der wichtigste Unterschied von bosonischen Gesamtheiten gegenüber den Entropie-dominierten Ensembles aus klassisch unterscheidbaren Teilchen.

Endliche Ensembles zeigen noch eine Reihe weiterer interessanter Eigenschaften. So geben z.B. verschiedene Ensemble-Theorien unterschiedliche Voraussagen hinsichtlich der Kondensat-Anteile. In einem mikrokanonischen Ensemble sind sowohl Energie als auch Teilchenzahl der Teilsysteme fest vorgegeben. Diese sind thermisch und chemisch voneinander isoliert. In einem kanonischen Ensemble kann die Energie zwischen Teilsystemen ausgetauscht werden, wodurch sich ein thermisches Gleichgewicht bei einer bestimmten Temperatur einstellt. In einem großkanonischen Ensemble können schließlich sowohl Energie als auch die Teilchen selbst ausgetauscht werden. Hier stellt sich also auch ein chemisches Gleichgewicht mit einem festen chemischen Potential ein. Die Teilchenzahl kann dabei nur im Mittel vorgegeben werden. Genau so eine mittlere Teilchenzahl wird unter Berücksichtigung der Ununterscheidbarkeit durch die Bose-Einstein- oder Fermi-Dirac-Verteilung gegeben. Im gewissen Sinne mitteln diese beiden großkanonischen Verteilungen über kanonische Ensembles mit allen möglichen fest vorgegebenen Zahlen von Bosonen bzw. Fermionen. Es ist daher nicht verwunderlich, dass die Resultate für kanonische Ensembles aus N Teilchen etwas anders ausfallen als die des großkanonischen Ensembles. Einige dieser Resultate sind in Abb. 1.6 a) zu sehen. Zu bemerken ist dabei, dass solche Unterschiede mit steigenden Teilchenzahlen verschwinden. Im thermodynamischen Limes sind die thermodynamische Größen in allen Ensembles in der Tat sogar identisch.

Hier noch eine weitere wichtige Bemerkung zu verschiedenen Ensemble-Theorien. Zur statistischen Beschreibung einer experimentell vorliegenden Situation ist natürlich das Ensemble am besten geeignet, dessen Modellvorstellung die Realität am ehesten trifft. Alternativ dazu kann man aber auch ein Ensemble verwenden, welches dazu äquivalent ist. Zwei Ensembles heißen äquivalent zueinander, wenn alle Voraussagen dieser beiden im thermodynamischen Limes übereinstimmen. Dass die globalen thermodynamischen Größen im kanonischen und großkanonischen Ensembles

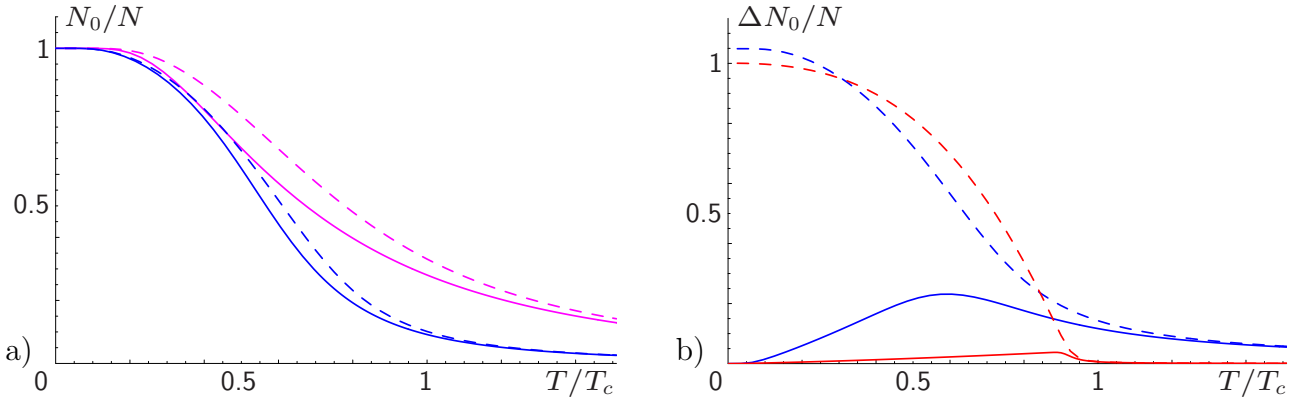


Abbildung 1.6: a) Vergleich zwischen kanonischen (durchgezogene Kurven) und großkanonischen (gestrichelte Kurven) Ensembles für die Grundzustands-Fraktion von $N = 1$ (lila) und $N = 10$ (blau) Bosonen in einer harmonischen Falle. b) Dasselbe für die Fluktuation der Teilchenzahl im Grundzustand von $N = 10$ (blau) und $N = 1000$ (rot) Bosonen. Die entsprechenden Resultate sind Untersuchungen aus Abschnitten 3.2.3 bzw. 3.4 zu entnehmen.

im Limes großer Teilchenzahlen gleich sind, ist allerdings nur ein Hinweis auf deren Äquivalenz. Es stellt sich nämlich heraus, dass nicht alle Größen sich so verhalten. Dazu zählt in erster Linie die Teilchenzahl-Fluktuation im Grundzustand, die als die Varianz $\Delta N_0 \equiv \sqrt{\langle (N_0 - \langle N_0 \rangle)^2 \rangle}$ definiert ist. Wie man aus Abb. 1.6 b) sieht, verschwindet diese Fluktuation im kanonischen Ensemble am absoluten Temperatur-Nullpunkt und wird sonst mit steigender Teilchenzahl unterdrückt. Im großkanonischen Ensemble ergeben sich dagegen nichtverschwindende Werte, die entsprechend der exakt herleitbaren Beziehung $\Delta N_0 = \sqrt{N_0(N_0 + 1)}$ im Limes großer Teilchenzahlen und verschwindender Temperatur sogar linear mit der Teilchenzahl anwachsen. Solche riesigen Fluktuationen im großkanonischen Ensemble sind unphysikalisch und zeugen davon, dass die Bose-Einstein-Verteilung selbst keine adäquate Beschreibung der Verhältnisse in tatsächlichen Systemen darstellt. Ihre Verwendung ist nur bedingt vom praktischen Nutzen, da sie aufgrund anomaler Fluktuationen nicht intrinsisch widerspruchsfrei ist. Interessanterweise ergeben sich beim kanonischen Ensemble derartige Probleme weder mit den Teilchenzahl- noch mit den Energiefluktuationen, sodass man in der Tat von der Äquivalenz dieses Ensembles zum mikrokanonischen Ensemble sprechen kann.

1.4 Überblick der Promotionsschrift

Bei der üblichen Herangehensweise an eine Gesamtheit aus ununterscheidbaren Teilchen wird auf die Beschreibung innerhalb eines großkanonischen Ensembles zurückgegriffen. Dies führt für den Spezialfall der Bosonen auf die Bose-Einstein-Verteilung (1.3) und für Fermionen auf die Fermi-Dirac-Verteilung (1.4). Auch in meiner Promotionsschrift beginne ich im Kapitel 2 mit dem großkanonischen Ensemble, allerdings in einer etwas unüblichen Formulierung mit Hilfe der Funktionalintegral-Methode. Diese führe ich im ersten Kapitel ein und verwende sie anschließend zur Berechnung der thermodynamischen und statistischen Eigenschaften in konkreten Poten-

tialen. Darin untersuche ich die Grundzustands-Besetzung und die Wärmekapazität für Bosonen im homogenen Fall, in einer harmonischen Falle und anschließend in einem Kastenpotential. Für die letzten beiden Spezialfälle wird dabei zuerst die Situation im thermodynamischen Limes beschrieben. Anschließend werden die Finite-Size-Korrekturen dazu bestimmt, die ich mit Hilfe der semiklassischen Näherung in einer analytischen Form herleite. Demgegenüber stelle ich die quantenmechanisch exakten Rechnungen vor, die sich in einer numerischen Form unmittelbar aus der Bose-Einstein-Verteilung ergeben. Danach gehe ich im Abschnitt 2.5 auf die lokalen Eigenschaften der Bose-Gase ein und diskutiere die Teilchendichte und das Langdistanz-Verhalten der Teilchenkorrelationen in verschiedenen Potentialen. Zum Abschluss des Kapitels 2 werde ich das Problem der unphysikalisch großen Fluktuationen für Bose-Gase in der kondensierten Phase ansprechen. Darin diskutiere ich auch die Ursachen für dieses Problem und zeige, dass der mögliche Ausweg in der Verwendung einer kanonischen Ensemble-Theorie besteht.

Im Kapitel 3 dieser Promotionsschrift beschäftige ich mich mit dem Problem der Bose-Einstein-Kondensation im kanonischen Ensemble. Meine Untersuchungen dazu wurden in einer kürzlich erschienenen Publikation [42] kompakt dargestellt und bilden den Kern der hier präsentierten Ausführung. Die dabei verwendete Methode basiert auf dem Pfadintegral-Zugang von Feynman, den er im Lehrbuch [43] formulierte. Da sein Resultat für die Zustandssumme noch sehr aufwendig und für Berechnungen konkreter Größen praktisch ungeeignet ist, schreibe ich es in Form einer Rekursions-Beziehung um. Damit lassen sich alle thermodynamischen Größen bestimmen, wie wir am Beispiel der Wärmekapazität zeigen werden. Zur Bestimmung der Grundzustands-Besetzung werde ich das statistische Gewicht des Grundzustandes in kanonischen Gesamtheiten berechnen. Das von Feynman selbst diskutierte Problem des homogenen Bose-Gases stellt sich in meinen Untersuchungen als fehlerhaft heraus und wird noch entsprechend korrigiert. Bei Vergleichen zwischen den kanonischen und großkanonischen Resultaten für die meisten Größen stellen wir keine nennenswerten Abweichungen fest. So stimmen die darin ausgewerteten spezifische Wärmen, die Grundzustand-Besetzungen und die lokalen Eigenschaften praktisch überein. Die Teilchenzahl-Fluktuationen stellen sich aber hier im Gegensatz zu großkanonischen Resultaten als normal heraus. Auch die vollen Besetzungszahl-Statistiken unterscheiden sich in beiden Ensemble-Theorien unterhalb der Kondensations-Temperatur gravierend.

In einem gänzlich in der Falle eingesperrten Bose-Gas entspricht die Situation der eines mikrokanonischen Ensembles. Die Berechnungen in diesem Ensemble sind jedoch nur mit großem Aufwand zu bewältigen, und selbst das thermische Gleichgewicht bei einer bestimmten Temperatur wäre in diesem Ensemble nur durch Wechselwirkungen zwischen den Teilchen gegeben. Ersatzweise kann man ein ideales Gas betrachten, dessen Thermalisierung sich bei einer bestimmten Temperatur durch den Energieaustausch mit dem Wärmebad einstellt. Diese Situation ist in einem kanonischen Ensemble gegeben. Aus technischen Gründen ist das kanonische Ensemble somit dem mikrokanonischen vorzuziehen. Der Rechenaufwand hält sich dabei in Grenzen, und man kann die Temperatur als freie thermodynamische Variable zur Beschreibung des Systems verwenden. Aufgrund der Äquivalenz der kanonischen und mikrokanonischen Ensembles, auf die ich kurz eingehen werde, ist eine derartige Vereinfachung auch legitim. Aus diesem Grund werde ich in dieser Arbeit auf mikrokanonische Rechnungen bewusst verzichten.

Im letzten Teil meiner Schrift, dem Kapitel 4, beschäftige ich mich mit dem Einfluss schwacher Wechselwirkungen auf thermodynamische Eigenschaften eines Bose-Gases. Hierbei werden zuerst die gängigen Näherungen für die in Experimenten tatsächlich vorliegenden Wechselwirkungen diskutiert. Dadurch wird die Verwendung von Delta-Wechselwirkung für Alkali-Atome motiviert. Für Atome mit einem großen magnetischen oder elektrischen Dipolmoment (z.B. ^{52}Cr -Atome) muss noch die Dipol-Wechselwirkung dazugenommen werden. Da ich die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Bosonen als schwach annehme, behandle ich diese ausgehend von einer störungstheoretischen Rechnung. Das führt mit Hilfe der Funktionalintegral-Methode direkt auf die so genannten Feynman-Diagramme. Zu deren Erzeugung inklusive richtiger Gewichte werde ich basierend auf meinen Publikationen [44,45] graphische Rekursions-Beziehungen herleiten. Die so begründete Störungstheorie wird nach anschließender selbstkonsistenter Renormierung in der führenden Ordnung für Systeme mit einer deltaförmigen und dipolaren Wechselwirkung ausgewertet. Dadurch wird der Effekt einer schwachen Wechselwirkung auf thermodynamische Eigenschaften anhand einer analytischen Untersuchung der kritischen Temperatur ausgearbeitet. Die hier dargestellten Resultate bilden den Kern der kürzlich erschienenen Publikationen [46,47].

Im Laufe meiner Arbeit habe ich einige spezielle Umformungsregeln verwendet, deren Begründungen mit der eigentlichen Darstellung des Stoffes nur indirekt korrelieren. Solche mathematischen Exkurse werden in einem separaten Anhang vorgestellt. Die für numerische Untersuchungen benötigten Computer-Routinen dürften aufgrund der Transparenz und Nachvollziehbarkeit nicht fehlen, würden aber den Rahmen des im Hauptteil vorgestellten Materials ebenfalls sprengen. Auch diese werden in den Anhang verlagert.

Zum Schluss dieser Promotionsschrift gebe ich noch eine Zusammenfassung, in der die erzielten Resultate meines Forschungs-Vorhabens in Kürze rekapituliert werden.

