

Kapitel 2

Großkanonische Beschreibung idealer Bose-Gase

In diesem Kapitel beschreiben wir wechselwirkungsfreie bosonische Vielteilchen-Systeme im Rahmen der großkanonischen Ensemble-Theorie. Solche Systeme befinden sich sowohl im thermischen Gleichgewicht mit einem gedachten Wärmebad, als auch im chemischen Gleichgewicht mit einem ebenfalls hypothetischen Teilchen-Bassin.

Die hier präsentierten theoretischen Untersuchungen basieren auf den feldtheoretischen Methoden der so genannten Zweitquantisierung [48], die wir im ersten Abschnitt 2.1 diskutieren. Die Anwendung dieser Methoden auf das Problem wechselwirkungsfreier Systeme bietet eine interessante Alternative zu den üblichen Darstellungen und lässt sich für spätere Untersuchungen wechselwirkender Systeme im Kapitel 4 problemlos erweitern. Im Unterabschnitt 2.1.1 wird zuerst der Grundstein für derartige Untersuchungen gelegt, indem wir das Funktionalintegral in der kohärenten Feld-Darstellung einführen. Im anschließenden Unterabschnitt 2.1.2 werten wir die großkanonische Zustandssumme aus. Im Unterabschnitt 2.1.3 berechnen wir die Vielteilchen-Greens-Funktion, die von uns weiterhin als Propagator bezeichnet wird, und im Unterabschnitt 2.1.4 das großkanonische Potential.

Basierend auf den oben diskutierten Untersuchungen werden im anschließenden Abschnitt 2.2 thermodynamische Eigenschaften eines homogenen Bose-Gases untersucht. Darin berechnen wir die Wärmekapazität und die für die Bose-Einstein-Kondensation entscheidende Größe, nämlich die Besetzung des Grundzustandes. In diesem Abschnitt wird auf die besondere Rolle des Grundzustandes und die Subtilitäten in seiner theoretischen Behandlung eingegangen.

Im Abschnitt 2.3 behandeln wir den experimentell relevanten Fall eines Bose-Gases, welches in einem harmonischen Potential festgehalten wird. Im ersten Unterabschnitt 2.3.1 beschäftigen wir uns mit seiner Beschreibung im Rahmen der semiklassischen Näherung in beiden führenden Ordnungen. Zur Ausweitung dieser Methode betrachten wir im Unterabschnitt 2.3.2 die höheren semiklassischen Korrekturen dazu und konzentrieren uns auf die Berechnung der Finite-Size-Korrektur der kritischen Temperatur. Da die semiklassische Näherung insbesondere in diesem Temperaturbereich keine konvergierenden Störungsreihen liefert, geht seine Behandlung über die naive Störungstheo-

rie hinaus. Im darauffolgenden Unterabschnitt 2.3.3 behandeln wir das Problem des harmonischen Potentials exakt quantenmechanisch mit Hilfe numerischer Methoden und vergleichen die Ergebnisse mit semiklassischen Näherungs-Ausdrücken.

Im Abschnitt 2.4 diskutieren wir das Bose-Gas in einem Kasten-Potential. Seine semiklassische Behandlung liefert in der führenden Näherungs-Ordnung das homogene Bose-Gas, welches uns bereits vom Abschnitt 2.2 bekannt ist. Wie wir im Unterabschnitt 2.4.1 zeigen, führen Versuche, semiklassische Korrekturen zu diesem thermodynamischen Limes auszurechnen, nicht zum erwünschten Erfolg. Daher wenden wir auf dieses Problem die bereits im Abschnitt 2.3 getestete nichtstörungstheoretische Vorgehensweise und erhalten auf diese Weise die semiklassischen Finite-Size-Korrekturen zur kritischen Temperatur. Im Unterabschnitt 2.4.2 diskutieren wir die quantenmechanisch exakte Behandlung der Bose-Gase im Kastenpotential. Darin erhalten wir die Finite-Size-Korrekturen numerisch ohne Zuhilfenahme von semiklassischen Näherungs-Methoden und vergleichen sie mit den analytischen Ergebnissen.

Nach diesen thermodynamischen Untersuchungen wenden wir uns im Abschnitt 2.5 den Propagatoren für verschiedene Systeme zu. In bestimmten Spezialfällen erhalten aus ihnen Informationen über die Teilchenzahldichten in jeweiligen Systemen sowie über das Langdistanz-Verhalten der Propagatoren.

Am Ende dieses Kapitels diskutieren wir im Abschnitt 2.6 die grundsätzlichen Probleme der großkanonischen Ensemble-Theorie in der kondensierten Phase, die sich bei Untersuchungen der Teilchenzahl-Fluktuation ergeben.

2.1 Feldtheoretische Beschreibung

In diesem Abschnitt werden die feldtheoretischen Grundlagen zu Beschreibungen großkanonischer bosonischer Ensembles zusammenfassend dargestellt. Bosonische Ensembles zeichnen sich durch die prinzipielle Ununterscheidbarkeit der darin enthaltenen Teilchen und durch die Symmetrie bezüglich des Teilchenaustausches aus. Die wichtigste Aufgabe in deren großkanonischen Beschreibung besteht in der Herleitung und anschließenden Auswertung der so genannten großkanonischen Zustandssumme

$$Z_{GK} \equiv \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} . \quad (2.1)$$

Hierbei wird die Abkürzung $\beta \equiv 1/k_B T$ mit der Boltzmann-Konstante k_B und der Temperatur T verwendet. Mit μ wird das chemische Potential bezeichnet und \hat{H} repräsentiert den wechselwirkungsfreien Hamilton-Operator

$$\hat{H} \equiv \int d^3x \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \hat{a}(\mathbf{x}) , \quad (2.2)$$

wobei wir mit M die Masse eines Teilchens bezeichnen und mit $V(\mathbf{x})$ das Fallenpotential, das wir als nicht explizit zeitabhängig voraussetzen. Die Operatoren $\hat{a}^\dagger(\mathbf{x})$ und $\hat{a}(\mathbf{x})$ sollen dabei jeweils

ein Teilchen am Ort \mathbf{x} erzeugen bzw. vernichten. Der Teilchenzahloperator \hat{N} wird analog dazu dargestellt als

$$\hat{N} \equiv \int d^3x \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{a}(\mathbf{x}) . \quad (2.3)$$

2.1.1 Funktionalintegral-Darstellung der Zustandssumme

In diesem Unterabschnitt widmen wir uns der Zustandssumme (2.1), die wir in einer für spätere Untersuchungen nützlichen Form mit Hilfe der so genannten Funktionalintegral-Darstellung herleiten.

Aufgrund der Übersichtlichkeit der nachfolgenden Berechnungen werden wir in einer gegitterten Version des Raums arbeiten. Dies impliziert z.B. die Ersetzungsvorschrift $\hat{a}(\mathbf{x}) \mapsto a_i/\sqrt{v}$ und $\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \mapsto a_i^\dagger/\sqrt{v}$ sowie die Verwendung der diskreten Summation anstelle der kontinuierlichen Integration $\int d^3x \mapsto v \sum_i$. Dabei bezeichnet v das elementare Volumen eines Gitterplatzes i . Nach diesen Gitterungs-Vorschriften werden z.B. Energie- und Teilchenzahloperatoren (2.2) und (2.3) durch

$$\hat{H} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + V_i \right] \hat{a}_i \quad , \quad \hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (2.4)$$

ersetzt.

Weiterhin greifen wir auf die zweitquantisierte Beschreibungsweise durch Vielteilchen-Zustände zurück [48]. Diese auch als Fock-Zustände bezeichneten Objekte werden so konstruiert, dass sie an jedem Ort (an jedem Gitterpunkt) eine bestimmte Zahl von Teilchen beinhalten. Im gegitterten Raum lassen sich solche Vielteilchen-Zustände mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren entsprechend der Beziehung

$$|n_1 n_2 \dots\rangle \equiv \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots} |vak\rangle \quad (2.5)$$

darstellen, wobei n_i die Teilchenzahlen an den jeweiligen Orten i bedeuten. Der Zustand $|vak\rangle$ steht dabei für den Vakuum-Zustand $|00\dots\rangle$ des Fock-Raumes und erfüllt folgende Relationen:

$$\hat{a}_i |vak\rangle = 0 \quad , \quad \langle vak|vak\rangle = 1 . \quad (2.6)$$

Für die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren gelten folgende Kommutatorrelationen:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_- = \delta_{i,j} \quad , \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_- = [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_- = 0 . \quad (2.7)$$

Damit lässt sich z.B. zeigen, dass

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle \quad (2.8)$$

gilt. Außerdem lässt sich aus den Kommutatorrelationen (2.7) die weitere Beziehung $\hat{a}_j (\hat{a}_i^\dagger)^{n_k} = (\hat{a}_i^\dagger)^{n_k} \hat{a}_j + \delta_{i,j} n_k (\hat{a}_i^\dagger)^{n_k-1}$ herleiten, mit deren Hilfe sich die aus (2.5) und (2.6) folgende wichtige Identität

$$\hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \quad (2.9)$$

ergibt. Daraus und aus (2.8) sieht man, dass die Vielteilchen-Zustände (2.5) tatsächlich Eigenzustände der Operatoren (2.4) sind. Sie bilden außerdem noch eine vollständige Basis. Das heißt, sie genügen der Vollständigkeits-Relation

$$\sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} |n_1 n_2 \dots\rangle \langle \dots n_2 n_1| = \mathbb{1}_F, \quad (2.10)$$

wobei der Ausdruck $\mathbb{1}_F$ auf der rechten Seite das Eins-Element des Fock-Raumes bedeutet und $\langle \dots n_2 n_1|$ für den zu (2.5) adjungierten Zustand

$$\langle \dots n_2 n_1| \equiv \langle vak| \frac{\dots (\hat{a}_2)^{n_2} (\hat{a}_1)^{n_1}}{\dots \sqrt{n_2!} \sqrt{n_1!}} \quad (2.11)$$

steht. Durch mehrfache Anwendung der Beziehung (2.9) kann man außerdem noch zeigen, dass die Zustände (2.5) zueinander orthonormal entsprechend der Beziehung

$$\langle \dots n_2 n_1 | m_1 m_2 \dots \rangle = \delta_{m_1, n_1} \delta_{m_2, n_2} \dots \quad (2.12)$$

sind. Zusammenfassend kann man aus dem oben Gesagten entnehmen, dass die Fock-Zustände (2.5) eine vollständige orthonormale Basis bilden. Diese Zustände werden nur durch die Teilchenzahlen an den jeweiligen Orten charakterisiert, ohne dass die einzelnen Teilchen irgendwie gekennzeichnet werden. Dadurch ist die Ununterscheidbarkeit automatisch gegeben. Dass die Zustände (2.5) bosonische Gesamtheiten mit deren Symmetrie gegenüber Teilchenvertauschungen beschreiben, wird mit den Kommutatorrelationen bosonischer Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren (2.7) festgelegt.

Wenden wir uns nun dem Problem der Berechnung der großkanonischen Zustandssumme (2.1) zu. Die Operation der Spurbildung lässt sich im Fock-Raum wie folgt spezifizieren:

$$Z_{GK} = \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \langle \dots n_2 n_1 | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n_1 n_2 \dots \rangle. \quad (2.13)$$

Diese Zustandssumme (2.13) kann im vorliegenden wechselwirkungsfreien Fall explizit ausgerechnet werden. Wir gehen hier aber einen etwas anderen Weg und stellen das Problem mit Hilfe der so genannten kohärenten Zustände dar [48]. Diese werden aus den Fock-Zuständen (2.5) derart kombiniert, dass an jedem Ort des Raumes eine beliebige Teilchenzahl zugelassen wird. In der gitterten Version wird das in der folgenden Form berücksichtigt:

$$|\phi\rangle \equiv \exp \left\{ - \sum_i |\psi_i|^2 / 2 \right\} \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \frac{\psi_1^{n_1} \psi_2^{n_2} \dots}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!} \dots} |n_1 n_2 \dots\rangle, \quad (2.14)$$

wobei ψ_i komplexe Zahlen sind, die nach (2.5) jedem Erzeugungsoperator \hat{a}_i^\dagger jeweils einmal hinzugeschrieben werden. Die Exponentialfunktion im Vorfaktor dient dabei lediglich der Normierung. Der zu (2.14) adjungierte Zustand lautet

$$\langle \phi | \equiv \exp \left\{ - \sum_i |\psi_i|^2 / 2 \right\} \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \langle \dots n_2 n_1 | \frac{\dots \psi_2^{*n_2} \psi_1^{*n_1}}{\dots \sqrt{n_2!} \sqrt{n_1!}} . \quad (2.15)$$

Die Verwendung der kontinuierlichen ψ_i -Felder bzw. deren komplex-konjugierten Felder ψ_i^* gibt uns die Möglichkeit, verschiedene Orte (Gitterplätze) auf unterschiedliche Weise zu gewichten. Durch gezielte Wahl solcher Felder können somit beliebige, den jeweiligen Gegebenheiten angepasste Feldkonfigurationen konstruiert werden. Außerdem ergibt eine komplette Mittelung über alle möglichen Besetzungszahlen $\{n_1, n_2, \dots\}$ in (2.14) einen weiteren wichtigen Vorteil gegenüber den Vielteilchen-Zuständen (2.5). Dies wird in der Anwendung eines Vernichtungsoperators auf den kohärenten Zustand (2.14) bzw. eines Erzeugungsoperator auf (2.15) deutlich:

$$\hat{a}_i |\phi\rangle = \psi_i |\phi\rangle \quad \text{und} \quad \langle \phi | \hat{a}_i^\dagger = \psi_i^* \langle \phi | , \quad (2.16)$$

wie man mit Hilfe der Relation (2.9) zeigen kann. Diese Eigenwertgleichung besagt, dass im Gegensatz zum Zustand $|n_1 n_2 \dots\rangle$ der kohärente Zustand $|\phi\rangle$ alle Vernichtungsoperatoren \hat{a}_i diagonalisiert. Seine Eigenwerte ψ_i , oder auch deren kontinuierliche Versionen $\psi(\mathbf{x})$, werden als kohärente Felder bezeichnet. Mit Hilfe der Orthonormalitätsrelation (2.12) stellen wir weiterhin fest, dass sich zwei dieser kohärenten Zustände $|\phi_j\rangle$ und $|\phi_k\rangle$ wie folgt überlappen:

$$\langle \phi_j | \phi_k \rangle = \exp \left\{ \sum_i \left(\psi_{i,j}^* \psi_{i,k} - |\psi_{i,j}|^2 / 2 - |\psi_{i,k}|^2 / 2 \right) \right\} . \quad (2.17)$$

Für den Spezialfall $k = j$ sehen wir daraus, dass die kohärenten Zustände (2.14) in der Tat auf eins normiert sind. Für den Fall $k \neq j$ verschwindet der Skalarprodukt jedoch nicht, so dass die verschiedenen kohärenten Zustände nicht orthogonal zueinander stehen. Darüber hinaus lässt sich mit Hilfe (2.10) die folgende Vollständigkeits-Relation der kohärenten Zustände (2.14) herleiten:

$$\prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] |\phi\rangle \langle \phi| = \mathbb{1}_F . \quad (2.18)$$

Daraus und aus der Nichtorthogonalität der kohärenten Zustände ist ersichtlich, dass die Zustände $|\phi\rangle$ ein übervollständiges Basissystem darstellen. Dieser Umstand wird uns aber nicht weiter stören.

Nun wollen wir die großkanonische Zustandssumme (2.13) auch im Raum der kohärenten Zustände darstellen. Erweitern wir diese Zustandssumme mit einer Identität in Form der Vollständigkeit (2.18), so ergibt sich

$$\begin{aligned} Z_{GK} &= \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \langle \dots n_2 n_1 | \phi \rangle \langle \phi | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n_1 n_2 \dots \rangle \\ &= \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \langle \phi | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n_1 n_2 \dots \rangle \langle \dots n_2 n_1 | \phi \rangle . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Unter Berücksichtigung der Vollständigkeits-Relation (2.10) ist damit die kohärente Darstellung der großkanonischen Zustandssumme durch

$$Z_{GK} = \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \langle \phi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle \quad (2.20)$$

gegeben. Um jetzt weiterzukommen, müssen wir nur bemerken, dass der Exponentialoperator $e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$ im gewissen Sinne einen Entwicklungsoperator für kohärente Zustände darstellt. Man spricht in diesem Zusammenhang von der Imaginärzeit und meint, dass der kohärente Zustand im Heisenbergbild mittels obigen Entwicklungsoperators vom Anfangs- zum Endpunkt des Imaginärzeit-Intervalls $(0; \hbar\beta)$ propagiert. Der volle Imaginärzeit-Entwicklungsoperator lässt sich nun in $L + 1$ Kurzzeit-Faktoren zerlegen, wobei L eine große Zahl ist. Das entspricht einer Gitterung des Imaginärzeit-Intervalls $(0; \hbar\beta)$ mit dem kleinen Abstand zwischen zwei Imaginärzeitpunkten $\epsilon \equiv \hbar\beta/(L + 1)$. Die Zustandssumme (2.20) lässt sich dann als

$$Z_{GK} = \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \langle \phi | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \underbrace{\mathbb{1}_F e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \mathbb{1}_F \dots \mathbb{1}_F e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar}}_{L \text{ Faktoren}} | \phi \rangle \quad (2.21)$$

darstellen. Zwischen den einzelnen Kurzzeit-Faktoren haben wir dabei die Identitäten $\mathbb{1}_F$ eingeschoben, die wir noch mit (2.18) auf die kohärenten Zustände spezifizieren. Damit ergibt sich

$$Z_{GK} = \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \prod_{j=1}^L \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,j}^* d\psi_{i,j}}{2\pi} \right] \langle \phi | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} | \phi_L \rangle \langle \phi_L | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} | \phi_{L-1} \rangle \\ \times \langle \phi_{L-1} | \dots | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} | \phi \rangle . \quad (2.22)$$

Die Endzustände $\langle \phi |$ und $| \phi \rangle$ können nun mit Zuständen $\langle \phi_{L+1} |$ und $| \phi_0 \rangle$ identifiziert werden. Deren kohärente Felder müssen dafür lediglich den Bedingungen $\psi_i^* = \psi_{i,L+1}^* = \psi_{i,0}^*$ und $\psi_i = \psi_{i,L+1} = \psi_{i,0}$ genügen. Damit schreiben wir weiterhin

$$\prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \langle \phi | \dots | \phi \rangle = \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,0}^* d\psi_{i,0}}{2\pi} \right] \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,L+1}^* d\psi_{i,L+1}}{2\pi} \right] \\ \times \prod_i \left[2\pi \delta(\psi_{i,L+1}^* - \psi_{i,0}^*) \delta(\psi_{i,L+1} - \psi_{i,0}) \right] \langle \phi_{L+1} | \dots | \phi_0 \rangle . \quad (2.23)$$

Die in (2.22) vorkommenden einzelnen Kurzzeit-Erwartungswerte sind nun alle von der Form $\langle \phi_{j+1} | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} | \phi_j \rangle$ und können approximativ ausgerechnet werden. Dafür benötigen wir zuerst die Beziehung

$$\langle \phi_{j+1} | (\hat{H} - \mu\hat{N}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_{j+1} | \phi_j \rangle \sum_i \psi_{i,j+1}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + V_i - \mu \right) \psi_{i,j} , \quad (2.24)$$

die wir unmittelbar mit (2.4) unter Berücksichtigung der Eigenwertgleichung (2.16) erhalten. Aus diesem Grund ergibt sich weiterhin für kleine ϵ -Werte

$$\langle \phi_{j+1} | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} | \phi_j \rangle = \langle \phi_{j+1} | \left\{ \hat{1} - \frac{\epsilon}{\hbar} (\hat{H} - \mu\hat{N}) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right\} | \phi_j \rangle \\ = \langle \phi_{j+1} | \phi_j \rangle \left\{ 1 - \frac{\epsilon}{\hbar} \sum_i \psi_{i,j+1}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + V_i - \mu \right) \psi_{i,j} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right\} . \quad (2.25)$$

Den Ausdruck in der geschweiften Klammer können wir wiederum bis auf die Terme der Ordnung ϵ^2 als Exponentialfunktion schreiben. Das Skalarprodukt im Vorfaktor haben wir bereits in (2.17) angegeben und schreiben es nur etwas um. Insgesamt erhalten wir dadurch

$$\begin{aligned} \langle \phi_{j+1} | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi_j \rangle &= \exp \left\{ - \sum_i \psi_{i,j+1}^* (\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}) + \frac{1}{2} \sum_i [\psi_{i,j+1}^* \psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}^* \psi_{i,j}] \right\} \\ &\times \exp \left\{ - \frac{\epsilon}{\hbar} \sum_i \psi_{i,j+1}^* \left(- \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + V_i - \mu \right) \psi_{i,j} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right\}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Setzen wir diese nun in die Gleichung (2.22) ein und beachten die Umformung (2.23), so erhalten wir damit die großkanonische Zustandssumme in der Form

$$\begin{aligned} Z_{GK} &= \prod_{j=0}^{L+1} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,j}^* d\psi_{i,j}}{2\pi} \right] \prod_i \left[2\pi \delta(\psi_{i,L+1}^* - \psi_{i,0}^*) \delta(\psi_{i,L+1} - \psi_{i,0}) \right] \\ &\times \exp \left\{ - \epsilon \sum_{j=0}^L \sum_i \left[\psi_{i,j+1}^* \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\epsilon} - \frac{1}{\hbar} \psi_{i,j+1}^* \left(- \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + V_i - \mu \right) \psi_{i,j} \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right\}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Diese Gleichung liefert bereits die gesuchte Form auf einem Raum-Imaginärzeit-Gitter. Eine kontinuierliche Version erhält man daraus im Limes $L \rightarrow \infty$ bzw. $\epsilon \rightarrow 0$ sowie für kontinuierliche Raumpunkte $i \mapsto \mathbf{x}$ und Imaginärzeitpunkte $j \mapsto \tau$. Die kontinuierliche Imaginärzeit τ parametrisiert dabei den Weg entlang des Imaginärzeitintervalls $(0; \hbar\beta)$. Dies ist im gewissen Sinne analog zu einer dynamischen Zeit t , welche die Zeitentwicklung zwischen dem Punkt t_i , wo ein Prozess startet, und dem Zeitpunkt t_f , wo der Prozess endet, parametrisiert. Es gibt sogar eine eindeutige Abbildung zwischen den beiden Parametern, die so genannte Wick-Rotation $\tau = i(t - t_i)$, wodurch sich auch der Name ‘‘Imaginärzeit’’ ableitet.

Im Limes kontinuierlicher Koordinaten und Imaginärzeiten wird die Ersetzung $\psi_{i,j} \mapsto \sqrt{v}\psi(\mathbf{x}, \tau)$ mit dem Elementarvolumen v eines Gitterplatzes vollzogen, wobei noch zu berücksichtigen ist, dass für die Anfangspunkte $\psi_{i,0} \mapsto \sqrt{v}\psi(\mathbf{x}, 0)$ und für die Endpunkte $\psi_{i,L+1} \mapsto \sqrt{v}\psi(\mathbf{x}, \hbar\beta)$ gilt. Die vor der Gleichung (2.23) formulierten Nebenbedingungen lauten daher

$$\psi(\mathbf{x}, \hbar\beta) = \psi(\mathbf{x}, 0) \quad , \quad \psi^*(\mathbf{x}, \hbar\beta) = \psi^*(\mathbf{x}, 0) \quad . \quad (2.28)$$

Weiterhin sind Summationen in (2.27) durch Integrationen nach der Vorschrift

$$\epsilon \sum_{j=0}^L \sum_i \mapsto \frac{1}{v} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \quad (2.29)$$

und der Differenzenquotient durch die zeitliche Ableitung entsprechend

$$\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\epsilon} \mapsto \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\mathbf{x}, \tau) \quad (2.30)$$

zu ersetzen. Außerdem werden die mehrfachen Integrationen in (2.27) rein formal als Funktionalintegration bezeichnet und als

$$\begin{aligned} & \prod_{j=0}^{L+1} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,j}^* d\psi_{i,j}}{2\pi} \right] \prod_i \left[2\pi \delta(\psi_{i,L+1}^* - \psi_{i,0}^*) \delta(\psi_{i,L+1} - \psi_{i,0}) \right] \\ \mapsto & \prod_{\mathbf{x}} \left[\int d\psi^*(\mathbf{x}, 0) d\psi(\mathbf{x}, 0) \right] \int_{\psi(\mathbf{x}, \hbar\beta) = \psi(\mathbf{x}, 0)}^{\psi^*(\mathbf{x}, \hbar\beta) = \psi^*(\mathbf{x}, 0)} \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \equiv \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \end{aligned} \quad (2.31)$$

aufgeschrieben. Im übrigen gilt $\psi_{i,j+1}^* = \psi_{i,j}^* + \mathcal{O}(\epsilon)$ für den Exponent in (2.27). Vernachlässigt man nun darin alle ϵ -Terme höherer Ordnung, so lässt sich die Gleichung (2.27) zusammenfassend in kontinuierlicher Form schreiben als

$$Z_{GK} = \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}, \quad (2.32)$$

wobei hier der Exponent des Integrandes

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \psi(\mathbf{x}, \tau) \quad (2.33)$$

die Form einer euklidischen Wirkung hat. Nach der Vorarbeit in diesem Abschnitt können wir uns nun dem Problem einer expliziten Auswertung des Funktionalintegrals (2.32) zuwenden. Damit werden wir uns im nächsten Abschnitt beschäftigen.

2.1.2 Wechselwirkungsfreie Zustandssumme

Die kohärenten Felder $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ und $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$, die wir im letzten Abschnitt eingeführt haben, sind bis jetzt noch völlig allgemein behandelt worden. Diese wollen wir hier derart spezifizieren, dass die euklidische Wirkung (2.33) eine möglichst einfache Struktur hat. Das erreichen wir in einer Darstellung, in der der Integralkern

$$K(\mathbf{x}, \tau) \equiv \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \quad (2.34)$$

diagonalisiert wird. Da die zeitliche Abhängigkeit des Integralkerns linear und die räumliche Abhängigkeiten davon entkoppelt ist, bietet sich ein Ansatz der Form $\psi(\mathbf{x}, \tau) = e^{\omega\tau} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ an. Die reinen Ortswellenfunktionen $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ sollen durch Energieeigenzustände des Ein-Teilchen-Hamiltonoperators entsprechend der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (2.35)$$

repräsentiert werden, wobei $E_{\mathbf{k}}$ den Energie-Eigenwert im Einteilchen-Quantenzustand \mathbf{k} darstellt. Diese Funktionen bilden ein Basissystem mit der Vollständigkeits-Beziehung

$$\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) . \quad (2.36)$$

Außerdem sollen diese Zustände zueinander orthonormal entsprechend der Beziehung

$$\int d^3x \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (2.37)$$

sein. Bezüglich der Imaginärzeit-Abhängigkeit des kohärenten Feldes müssen wir uns noch an die im letzten Abschnitt geforderte Periodizität (2.28) erinnern. Mit unserem Ansatz der Form $e^{\omega\tau}$ kann dies nur erfüllt werden für $\omega = i\omega_m$ mit den so genannten Matsubara-Frequenzen

$$\omega_m = 2\pi m/\hbar\beta \quad \text{mit } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.38)$$

Die die Zeitabhängigkeit bestimmenden Funktionen $(\hbar\beta)^{-1/2}e^{i\omega_m\tau}$ bilden per Konstruktion ebenfalls ein vollständiges Orthonormalsystem. Es gilt hier nämlich

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega_m\tau'}}{\sqrt{\hbar\beta}} \frac{e^{-i\omega_m\tau}}{\sqrt{\hbar\beta}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau' - \tau - n\hbar\beta) \quad , \quad (2.39)$$

was einer Vollständigkeit im Raum der $\hbar\beta$ -periodischen Funktionen entspricht. Die Orthonormalitätsrelation lautet

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{e^{-i\omega_m'\tau}}{\sqrt{\hbar\beta}} \frac{e^{i\omega_m\tau}}{\sqrt{\hbar\beta}} = \delta_{mm'} \quad . \quad (2.40)$$

Die kohärenten Feldkonfigurationen können entsprechend unserem Ansatz und der Vollständigkeitsrelationen der räumlichen und zeitlichen Komponenten als Linearkombinationen

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i\omega_m\tau} \quad (2.41)$$

konstruiert werden. Wie man mit Hilfe der Eigenwertgleichung (2.35) unschwer erkennt, diagonalisieren solche Zustände in der Tat den Integralkern (2.34) entsprechend der Beziehung

$$K(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i\omega_m\tau} \quad . \quad (2.42)$$

Die euklidische Wirkung (2.33) lässt sich somit unter Berücksichtigung der Orthonormalitäten der Ortswellenfunktion (2.37) und der Zeitfunktion (2.40) in der Diagonalform als

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m}^* a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu) \quad (2.43)$$

schreiben. Die Freiheit der Wahl eines kohärenten Feldes ist aufgrund der Konstruktion (2.41) durch die Freiheit in den Entwicklungskoeffizienten $a_{\mathbf{k},m}$ gegeben. Somit kann die Integration über die kohärenten Felder durch die Integration über deren Entwicklungskoeffizienten ersetzt werden. Dafür müssen wir noch bemerken, dass die Transformationsmatrix $\left(\frac{\partial\psi^*(\mathbf{x},\tau)}{\partial a_{\mathbf{k},m}^*/\sqrt{\hbar\beta}}\right)$ unitär zu

$\left(\frac{\partial\psi(\mathbf{x},\tau)}{\partial a_{\mathbf{k},m}/\sqrt{\hbar\beta}}\right)$ ist. Die entsprechende Jacobi-Determinante ist somit identisch eins. Deswegen gilt für das Funktionalintegral (2.31) die folgende normerhaltende Ersetzungsvorschrift:

$$\oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x},\tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x},\tau) = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \left[\int \frac{da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m}}{2\pi\hbar\beta} \right]. \quad (2.44)$$

Dabei ist die Bedingung periodischer Feldkonfigurationen bereits durch die Wahl der Matsubara-Frequenz (2.38) gewährleistet, was sich wiederum in den diskreten m -Werten widerspiegelt. Der Faktor 2π im Nenner war bereits im Maß des Funktionalintegrals (2.31) eingebaut und ist hier explizit ausgeschrieben worden. Mit (2.44) können wir die großkanonische Zustandssumme (2.32) mit (2.43) in der Form

$$Z_{GK} = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \left[\int \frac{da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m}}{2\pi\hbar\beta} \right] \exp \left\{ -a_{\mathbf{k}m}^* a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu)/\hbar \right\} \quad (2.45)$$

schreiben. Stellen wir jetzt noch die komplexwertigen Entwicklungskoeffizienten als

$$a_{\mathbf{k}m} = b_{\mathbf{k}m} + ic_{\mathbf{k}m} \quad , \quad a_{\mathbf{k}m}^* = b_{\mathbf{k}m} - ic_{\mathbf{k}m} \quad (2.46)$$

mit reellwertigen Koeffizienten $b_{\mathbf{k}m}$ und $c_{\mathbf{k}m}$ dar und beachten die Umformungsregel für eine zweidimensionale Koordinatentransformation

$$\int da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m} = 2 \int db_{\mathbf{k}m} dc_{\mathbf{k}m} \quad , \quad (2.47)$$

so ergibt sich für die wechselwirkungsfreie großkanonische Zustandssumme (2.45)

$$Z_{GK} = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\beta(i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu)} \quad . \quad (2.48)$$

Bei Berechnung dieser Größe muss noch die Bedingung $E_{\mathbf{k}} - \mu \geq 0$ erfüllt werden, denn nur für solche Werte existiert das Gausssche Integral in (2.45). Das setzt wiederum eine obere Schranke für das chemische Potential fest, die schon im einleitenden Abschnitt 1.1 für die positive Definitheit der mittleren Teilchenzahl nach der Bose-Einstein-Verteilung (1.3) gefordert wurde.

2.1.3 Freier Propagator

In diesem Abschnitt berechnen wir die Ein-Teilchen-Greens-Funktion im großkanonischen Ensemble ohne Wechselwirkung, welche weiterhin auch als der freie Propagator der Vielteilchentheorie bezeichnet wird. Dieser ist in Analogie zur großkanonischen Zustandssumme (2.1) definiert als

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \equiv \frac{1}{Z_{GK}} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{T} [\hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2)] \right\} \quad . \quad (2.49)$$

Dabei stellen die Operatoren

$$\hat{a}(\mathbf{x}, \tau) \equiv e^{\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}) e^{-\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \quad (2.50)$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}, \tau) \equiv e^{\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \quad (2.51)$$

die explizit von der Imaginärzeit τ abhängigen Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren im Heisenberg-Bild dar. Der Operator \hat{T} in (2.49) ist der so genannte Zeitordnungsoperator, der dafür sorgt, dass der früher wirkende Operator rechts vom später wirkenden steht entsprechend der Vorschrift

$$\hat{T} [\hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2)] \equiv \Theta(\tau_1 - \tau_2) \hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2) + \Theta(\tau_2 - \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2) \hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) . \quad (2.52)$$

Die Funktion $\Theta(\tau)$ bezeichnet die Heavisidesche Stufenfunktion, die den Wert Eins für positive τ annimmt und den Wert Null für die negativen. Deren Wert an der Stelle $\tau = 0$ ist nicht a-priori gegeben und muss noch entsprechend unseren Bedürfnissen vervollständigt werden. Die in der Mathematik übliche Definition lautet

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0, \\ 1/2 & \text{für } x = 0, \\ 0 & \text{für } x < 0. \end{cases} \quad (2.53)$$

Um den Vielteilchen-Propagator (2.49) auszurechnen, führen wir die Spur-Operation im Raum der kohärenter Zustände aus. Dadurch erhalten wir eine zu (2.20) analoge Form

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \frac{1}{Z_{GK}} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \\ &\times \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2) \langle \phi | e^{-(\hbar\beta - \tau_1)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}_1) e^{-(\tau_1 - \tau_2)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) e^{-\tau_2(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi \rangle \right. \\ &\left. + \Theta(\tau_2 - \tau_1) \langle \phi | e^{-(\hbar\beta - \tau_2)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) e^{-(\tau_2 - \tau_1)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}_1) e^{-\tau_1(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi \rangle \right\} . \quad (2.54) \end{aligned}$$

Diese Ausdrücke berechnen wir analog zur Vorgehensweise im letzten Abschnitt in einer gegitterten Version des Koordinaten-Zeit-Raums. Dafür brauchen wir noch die Ersetzungen $\hat{a}(\mathbf{x}_1) \mapsto \hat{a}_\alpha/\sqrt{v}$ und $\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) \mapsto \hat{a}_\beta^\dagger/\sqrt{v}$ sowie für die zeitliche Abfolge $(0, \dots, \min\{\tau_1, \tau_2\}, \dots, \max\{\tau_1, \tau_2\}, \dots, \hbar\beta) \mapsto (0, \dots, k\epsilon, \dots, l\epsilon, \dots, (L+1)\epsilon)$ mit $\epsilon \equiv \hbar\beta/(L+1)$. Nach mehrfacher Ausnutzung der Vollständigkeit kohärenter Zustände (2.18) erhalten wir damit für den ersten Summanden aus (2.54), welcher auch als der retardierte Propagator bezeichnet wird, das folgende Zwischenergebnis:

$$\begin{aligned} &G_R(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \\ &\equiv \frac{1}{Z_{GK}} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \langle \phi | e^{-(\hbar\beta - \tau_1)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}_1) e^{-(\tau_1 - \tau_2)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) e^{-\tau_2(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi \rangle \\ &= \frac{1}{Z_{GK}} \prod_{j=0}^{L+1} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,j}^* d\psi_{i,j}}{2\pi} \right] \prod_i \left[2\pi \delta(\psi_{i,L+1}^* - \psi_{i,0}^*) \delta(\psi_{i,L+1} - \psi_{i,0}) \right] \langle \phi_{L+1} | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi_L \rangle \\ &\times \langle \phi_L | \dots | \phi_{k+1} \rangle \langle \phi_{k+1} | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}_\alpha | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \dots | \phi_l \rangle \langle \phi_l | \hat{a}_\beta^\dagger e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi_{l-1} \rangle \langle \phi_{l-1} | \dots | \phi_0 \rangle \quad (2.55) \end{aligned}$$

Mit den Eigenwertgleichungen (2.16) und dem Resultat für die Kurzzeitentwicklungsamplitude (2.26) lässt sich der retardierte Anteil auch umschreiben zu

$$G_R(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{Z_{GK}} \prod_{j=0}^{L+1} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_{i,j}^* d\psi_{i,j}}{2\pi} \right] \prod_i \left[2\pi \delta(\psi_{i,L+1}^* - \psi_{i,0}^*) \delta(\psi_{i,L+1} - \psi_{i,0}) \right] \quad (2.56)$$

$$\times \psi_{\alpha,k} \psi_{\beta,l}^* \exp \left\{ -\epsilon \sum_{j=0}^L \sum_i \left[\psi_{i,j+1}^* \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\epsilon} - \frac{1}{\hbar} \psi_{i,j+1}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + V_i - \mu \right) \psi_{i,j} \right] + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right\}.$$

In der kontinuierlichen Version haben wir nun zu ersetzen $\psi_{\alpha,k} \mapsto \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1)$ und $\psi_{\beta,l}^* \mapsto \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)$ und können in Analogie zu der Gleichung (2.32) weiterhin schreiben

$$G_R(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}, \quad (2.57)$$

wobei $\mathcal{A}[\psi^*, \psi]$ nach wie vor die euklidische Wirkung (2.33) darstellt. Der zweite Summand in (2.54) wird häufig auch als der avancierte Propagator bezeichnet und kann völlig analog zum retardierten behandelt werden. Es ergibt sich dabei das folgende der Gleichung (2.57) entsprechende Resultat:

$$G_A(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2)$$

$$\equiv \frac{1}{Z_{GK}} \prod_i \left[\int \frac{d\psi_i^* d\psi_i}{2\pi} \right] \langle \phi | e^{-(\hbar\beta - \tau_2)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) e^{-(\tau_2 - \tau_1)(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}_1) e^{-\tau_1(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi \rangle$$

$$= \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (2.58)$$

Bei genauerer Betrachtung der Resultate (2.57) und (2.58) erkennen wir, dass beide gleich sind, weil kohärente Felder $\psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2)$ und $\psi(\mathbf{x}_1, \tau_1)$ lediglich komplexe Zahlen und somit vertauschbar sind. Daraus leiten wir für den Propagator (2.54) die folgende vereinfachte Funktionalintegral-Darstellung ab:

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar}, \quad (2.59)$$

bei der es in der Tat nicht auf die Reihenfolge der Imaginärzeiten ankommt.

Die oben beschriebene Situation gilt für den Fall, wenn die beide Imaginärzeiten τ_1 und τ_2 voneinander verschieden sind. Im Fall gleicher Zeiten $\tau_1 = \tau_2 = \tau$ gibt es jedoch noch einige nichttriviale Probleme, die wir jetzt noch kurz ansprechen. Der wichtigste Unterschied zur Situation mit verschiedenen Zeiten besteht darin, dass es hier keine Zeitentwicklung zwischen den Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren $\hat{a}(\mathbf{x}_1)$ und $\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2)$ gibt wie in der Gleichung (2.54). Daher haben wir in der gegitterten Version die Erwartungswerte $\langle \phi_k | \hat{a}_\alpha e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}_\beta^\dagger | \phi_{k-1} \rangle$ und $\langle \phi_k | \hat{a}_\beta^\dagger e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}_\alpha | \phi_{k-1} \rangle$ zu berechnen anstelle derjenigen in (2.55). Letzterer der beiden ist mit Hilfe (2.16) direkt auszurechnen und liefert

$$\langle \phi_k | \hat{a}_\beta^\dagger e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}_\alpha | \phi_{k-1} \rangle = \psi_{\beta,k}^* \psi_{\alpha,k-1} \langle \phi_k | e^{-\epsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})/\hbar} | \phi_{k-1} \rangle \quad (2.60)$$

mit dem bereits bekannten Kurzzeit-Entwicklungselement (2.26). Für den ersten der beiden Erwartungswerte müssen wir noch bedenken, dass die Näherung $\hat{a}_\alpha e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} = e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}_\alpha + \mathcal{O}(\epsilon)$ gilt. Aufgrund der Kommutatorrelation (2.7) ergibt sich nun

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | \hat{a}_\alpha e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}_\beta^\dagger | \phi_{k-1} \rangle &= \langle \phi_k | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \left(\hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha + \delta_{\alpha,\beta} \right) | \phi_{k-1} \rangle + \mathcal{O}(\epsilon) \\ &= \left[\psi_{\beta,k}^* \psi_{\alpha,k-1} + \delta_{\alpha,\beta} + \mathcal{O}(\epsilon) \right] \langle \phi_k | e^{-\epsilon(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} | \phi_{k-1} \rangle . \end{aligned} \quad (2.61)$$

Der in ϵ lineare Term macht in der Tat keine Schwierigkeiten, weil er im Kontinuumlimes $\epsilon \rightarrow 0$ vernachlässigbar ist. Das zusätzliche Kronecker-Symbol sorgt jedoch für die wirkliche Diskrepanz zwischen (2.60) und (2.61). Mit der Definition der Heaviside-Funktion (2.53) würde diese Diskrepanz einen Zusatzterm $\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)/2$ zum Propagator (2.59) beisteuern. Wie wir später sehen werden, würde dies zu unphysikalischen Divergenzen führen. Doch diese Problematik mit dem zeitlich lokalen Propagator kann beseitigt werden, indem man leicht modifizierte Heaviside-Funktionen verwendet, die als folgende Grenzwerte zu verstehen sind:

$$\lim_{\epsilon \searrow 0} \Theta(x + \epsilon) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 , \\ 1 & \text{für } x = 0 , \\ 0 & \text{für } x < 0 . \end{cases} , \quad \lim_{\epsilon \searrow 0} \Theta(x - \epsilon) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 , \\ 0 & \text{für } x = 0 , \\ 0 & \text{für } x < 0 . \end{cases} \quad (2.62)$$

Die ϵ -Vorzeichen wählen wir für den Zeitordnungsoperator (2.52) gerade so, dass der lokale Term (2.61) mit dem problematischen Ausdruck $\delta_{\alpha,\beta}$ nicht vorkommt, d.h. $\Theta(\tau_1 - \tau_2) \xrightarrow{\tau_1 \rightarrow \tau_2} 0$. Das wird berücksichtigt mit Hilfe der regularisierenden Vorschrift

$$\begin{aligned} \hat{T} [\hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2)] &\mapsto \lim_{\epsilon \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \epsilon) \hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2) \right. \\ &\quad \left. + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \epsilon) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2) \hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \right\} . \end{aligned} \quad (2.63)$$

Für verschiedene Imaginärzeiten τ_1 und τ_2 ändert diese Ersetzung gegenüber der ursprünglichen Form (2.52) tatsächlich nichts. Jedoch für die gleichen Imaginärzeiten wird dadurch aufgrund der Beziehungen (2.62) festgehalten, dass der Erzeugungsoperator einen infinitesimalen Zeitpunkt später wirkt, als der Vernichtungsoperator. Nach diesen Vorbemerkungen stellen wir fest, dass der Vielteilchen-Propagator ebenfalls als der Grenzwert

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \mapsto \lim_{\epsilon \searrow 0} G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2 + \epsilon) \quad (2.64)$$

mit dem ursprünglichen Propagator (2.59) zu interpretieren ist.

Um nun den freien Propagator (2.59) bzw. (2.64) zu berechnen, benutzen wir wiederum das kohärente Feld (2.41) und das Funktionalintegral in der Form (2.44). Mit der euklidischen Wirkung (2.43) ergibt sich damit

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \frac{1}{\hbar\beta Z_{GK}} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}''}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{m', m''=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{m'}\tau_1} e^{-i\omega_{m''}\tau_2} \\ &\times \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \left[\int \frac{da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m}}{2\pi\hbar\beta} \right] \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m}^* a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu)/\hbar \right\} a_{\mathbf{k}''m''}^* a_{\mathbf{k}'m'} . \end{aligned} \quad (2.65)$$

Für den Fall $(m'', \mathbf{k}'') \neq (m', \mathbf{k}')$ zeigt eine einfache Rechnung, dass dieser Ausdruck aus Symmetriegründen verschwindet. Somit müssen wir uns lediglich auf den Fall $m'' = m'$ und $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}'$ beschränken und erhalten

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \frac{1}{\hbar\beta Z_{GK}} \sum_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{m'=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{m'}(\tau_1-\tau_2)} \\
&\times \int \frac{da_{\mathbf{k}'m'}^* da_{\mathbf{k}'m'}}{2\pi\hbar\beta} a_{\mathbf{k}'m'}^* a_{\mathbf{k}'m'} \exp \left\{ -a_{\mathbf{k}'m'}^* a_{\mathbf{k}'m'} (i\hbar\omega_{m'} + E_{\mathbf{k}'} - \mu)/\hbar \right\} \\
&\times \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \prod_{\substack{m=-\infty \\ m \neq m'}}^{\infty} \left[\int \frac{da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m}}{2\pi\hbar\beta} \exp \left\{ -a_{\mathbf{k}m}^* a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu)/\hbar \right\} \right]. \quad (2.66)
\end{aligned}$$

Diesen Ausdruck werten wir jetzt mit der Zerlegung (2.46) und der Umformungsregel (2.47) aus und erhalten damit für nichtnegative Werte von $E_{\mathbf{k}} - \mu$

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \frac{1}{\hbar\beta Z_{GK}} \sum_{\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{m'=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{m'}(\tau_1-\tau_2)} \left[\frac{\hbar}{\beta(i\hbar\omega_{m'} + E_{\mathbf{k}'} - \mu)^2} \right] \\
&\times \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \prod_{\substack{m=-\infty \\ m \neq m'}}^{\infty} \left[\frac{1}{\beta(i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu)} \right]. \quad (2.67)
\end{aligned}$$

Setzen wir nun für die großkanonische Zustandssumme Z_{GK} das Ergebnis (2.48) ein, so können wir zusammenfassend mit dem expliziten Ausdruck für die Matsubara-Frequenz (2.38) schreiben

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp[2\pi i m (\tau_1 - \tau_2)/\hbar\beta]}{\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu) + 2\pi i m}. \quad (2.68)$$

Um dieses Ergebnis für den freien Vielteilchenpropagator in eine praktikablere Form zu bringen, machen wir Gebrauch von der Poissonschen Summenformel (A.7) aus Anhang A in einer etwas abgewandelten Form

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz f(z) e^{2\pi i(n-\eta)z}. \quad (2.69)$$

Hierbei wurde der positive infinitesimale Parameter η eingeführt, der mit dem in (2.63) bzw. (2.64) verwendeten Parameter ϵ durch die Beziehung $\eta = \epsilon/(\hbar\beta)$ zusammenhängt, um der Regularisierung (2.64) zu genügen. Dies sieht man unmittelbar aus der Tatsache, dass $e^{-2\pi i\eta z}$ zusammen mit der Exponentialfunktion aus (2.68) effektiv zu einer Erweiterung $\tau_2 \mapsto \tau_2 + \eta\hbar\beta$ führt. Nun kann die Matsubara-Summe in (2.68) in ein Integral umgewandelt werden, welches mit Hilfe des Residuensatzes ausgewertet wird. Das Ergebnis lautet

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta([n-\eta]\hbar\beta + \tau_1 - \tau_2) e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)(n-\eta + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar\beta})}. \quad (2.70)$$

Dieses Resultat lässt sich für den Wertebereich der Imaginärzeiten $\tau_1, \tau_2 \in (0; \hbar\beta]$ weiterhin auf die endgültige Form

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar\beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar\beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ \times e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)(n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar\beta})} \quad (2.71)$$

bringen. Der für die späteren Berechnungen häufig verwendete Spezialfall des zeitlich lokalen Propagators ergibt sich daraus gemäß (2.62) unmittelbar zu

$$G(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)} . \quad (2.72)$$

2.1.4 Wechselwirkungsfreies großkanonisches Potential

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, welche Konsequenzen aus dem großkanonischen Potential im wechselwirkungsfreien Fall zu ziehen sind. Es wird uns nämlich direkt zur Bose-Einstein-Verteilung (1.3) führen. Das großkanonische Potential \mathcal{F}_{GK} selbst ist durch die großkanonischen Zustansumme Z_{GK} gegeben als $\mathcal{F}_{GK} \equiv -\ln Z_{GK}/\beta$. Aus (2.48) erhalten wir somit seine Spektral-Darstellung

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln \left[\beta(i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu) \right] . \quad (2.73)$$

Zur Ausführung der Matsubara-Summe verwenden wir die Poissonsche Summenformel in der regularisierten Form (2.69)

$$\mathcal{F}_{GK}^{(0)} = \frac{1}{\beta} \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz \ln \left[\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu) + 2\pi i z \right] e^{2\pi i(n-\eta)z} , \quad (2.74)$$

wobei wir (2.38) eingesetzt haben. Bevor wir zur weiteren Auswertung des Integrals übergehen, führen wir noch einige wichtige Umformungen durch. Die eine beruht auf der Identität

$$\ln a = - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ a^{-x} \right\} \Big|_{x=0} \quad (2.75)$$

für $\text{Re } a > 0$, die übrigens auch als Ausgangspunkt der so genannten Replika-Methode [49] dient. Die andere benutzt die so genannte Schwinger-Formel [50, Kapitel 8]

$$a^{-x} = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{x-1} e^{-\sigma a} , \quad (2.76)$$

wobei $\Gamma(x)$ die Eulersche Gamma-Funktion ist. Mit diesen beiden Formeln lässt sich das großkanonische Potential (2.74) folgendermaßen umschreiben:

$$\mathcal{F}_{GK} = - \frac{1}{\beta} \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} d\sigma \sigma^{x-1} e^{-\sigma\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{2\pi i z(n-\eta-\sigma)} \right\} \Big|_{x=0} . \quad (2.77)$$

Die z -Integration lässt sich explizit ausführen und ergibt die Diracsche Delta-Funktion $\delta(n-\eta-\sigma)$. Dadurch wird das σ -Integral trivial und wir erhalten

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{\Gamma(x)} (n-\eta)^{x-1} e^{-\beta(n-\eta)(E_{\mathbf{k}}-\mu)} \right\} \Big|_{x=0}. \quad (2.78)$$

Hierbei berücksichtigen wir, dass nur positive n nicht verschwindende Beiträge liefern, denn σ ist per Konstruktion nichtnegativ und η ist sogar streng positiv. Verwenden wir nun die folgenden Entwicklungen für kleine x -Werte:

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = x + \mathcal{O}(x^2) \quad , \quad (n-\eta)^{x-1} = \frac{1}{n-\eta} + \mathcal{O}(x) \quad , \quad (2.79)$$

so erhalten wir für das großkanonische Potential (2.78)

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \lim_{\eta \searrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta(n-\eta)(E_{\mathbf{k}}-\mu)} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{x}{n-\eta} + \mathcal{O}(x^2) \right\} \Big|_{x=0}. \quad (2.80)$$

Nach Ausführung der Ableitung erhalten wir

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{-n\beta(E_{\mathbf{k}}-\mu)}. \quad (2.81)$$

Die n -Summe stellt die Reihenentwicklung der Logarithmus-Funktion dar, so dass

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{k}}-\mu)} \right\} \quad (2.82)$$

gilt. Dies ist der bekannte Ausdruck für das großkanonische Potential bosonischer Gesamtheiten. Es ist interessant in diesem Zusammenhang, sich die freie Energie eines harmonischen Oszillators der Frequenz ω in einer Dimension anzuschauen [51]:

$$\mathcal{F}_{HO} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right\}. \quad (2.83)$$

Ersetzen wir in (2.82) $E_{\mathbf{k}} - \mu \mapsto \hbar\omega$, so stellen wir fest, dass jeder einzelnen Energiemode \mathbf{k} ein harmonischer Oszillator bestimmter Frequenz entspricht. Das spiegelt den Grundgedanken der Quantenfeldtheorie wieder. In (2.82) fehlt jedoch die Grundzustands-Energie $\hbar\omega/2$, die nach der \mathbf{k} -Summation zu einem divergenten Ausdruck führen würde. Er wurde im großkanonischen Potential durch Verwendung der Normalordnung der gleichzeitigen Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren vermieden [52]. Diese Regularisierungsvorschrift wurde für den Ausdruck (2.74) durch den infinitesimalen Parameter η umgesetzt (siehe auch die Diskussion im Abschnitt 2.1.3). Hätten wir von Anfang an $\eta = 0$ gesetzt, so würden wir in der Tat die unendliche Grundzustands-Energie aller Bose-Felder bekommen.

Wie wichtig das Resultat (2.82) für das Verständnis der wechselwirkungsfreien Bosonen ist, zeigt die unmittelbar daraus folgende Energieverteilungsfunktion. Diese erhalten wir aus der mittleren

Teilchenzahl, die als die negative partielle Ableitung des großkanonischen Potentials nach dem chemischen Potential definiert ist als

$$N \equiv - \frac{\partial \mathcal{F}_{GK}}{\partial \mu} = \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} . \quad (2.84)$$

Dabei ist $N_{\mathbf{k}}$ die Teilchenzahl im Energiezustand \mathbf{k}

$$N_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1} . \quad (2.85)$$

Genau dies ist die Bose-Einstein-Verteilung [2], die wir bereits in Gl. (1.3) des einleitenden Kapitels 1.1 erwähnt haben. Erinnern wir uns noch an den zeitlich lokalen Propagator aus (2.72), so stellen wir mit Hilfe der Orthonormalitäts-Relation (2.37) die folgende wichtige Beziehung fest:

$$N = \int d^3x G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) . \quad (2.86)$$

Daraus erkennen wir, dass der diagonale Propagator

$$n(\mathbf{x}) \equiv G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) . \quad (2.87)$$

die mittlere Teilchenzahldichte darstellt.

2.2 Spezialfall des homogenen Bose-Gases

Die Resultate aus dem letzten Abschnitt lassen sich für spezielle Potentiale noch weiter konkretisieren. In der vorliegenden Arbeit beschränken wir uns auf die Untersuchungen im dreidimensionalen Raum. Das homogene System stellt dabei den einfachsten Spezialfall dar, der sich für das verschwindende Potential $V(\mathbf{x}) = 0$ in einem sehr großen Gebiet des Volumens V ergibt. Die Randeffekte können dabei vernachlässigt werden. Das dazu gehörige Eigenwertproblem (2.35) reduziert sich dann auf eine einfache Wellengleichung mit der Ortsfunktion $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ in Form einer ebenen Welle mit dem dreidimensionalen Wellenvektor \mathbf{k} :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} . \quad (2.88)$$

Die Energie-Eigenwerte

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2M \quad (2.89)$$

bilden für großes V ein kontinuierliches Spektrum, so dass die Spektralsumme zu einem kontinuierlichen Integral

$$\sum_{\mathbf{k}} \mapsto V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (2.90)$$

wird. Die Zustände (2.88) sind vollständig, da sie der Beziehung (2.36) genügen. Die Orthonormalität (2.37) lautet

$$\int d^3x \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (2.91)$$

und liefert die Modifikation des Kronecker-Symbols $\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ für das kontinuierliche Spektrum.

2.2.1 Direkte Auswertung homogener Bose-Gase

Im Folgenden diskutieren wir das Modell eines idealen homogenen Bose-Gases. Es besticht durch seine Einfachheit und wird daher auch meistens als das Paradigma-Problem für die Bose-Einstein-Kondensation verwendet. Doch wie wir am Ende dieses Unterabschnitts noch sehen werden, ist die direkte Umsetzung dieses Modells etwas lückenhaft.

Zum Berechnen der thermodynamischen Eigenschaften benutzen wir das großkanonische Potential \mathcal{F}_{GK} in der Form (2.81). Mit der Spezifizierung (2.90) ergibt sich damit

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}) . \quad (2.92)$$

Hierbei bedeutet λ die thermische de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda \equiv \left(\frac{2\pi\beta \hbar^2}{M} \right)^{1/2} \quad (2.93)$$

und $\zeta_\nu(z)$ bezeichnet die polylogarithmische Funktion

$$\zeta_\nu(z) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^\nu} . \quad (2.94)$$

Die mittlere Teilchenzahl ergibt sich dann z.B. aus der negativen Ableitung von (2.92) nach dem chemischen Potential zu

$$N = \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) . \quad (2.95)$$

Weiterhin können wir das großkanonische Potential (2.92) benutzen, um z.B. die spezifische Wärmekapazität C_V auszurechnen. Diese Größe zeigt die Stärke der Energiefluktuationen im vorliegenden System an und ist definiert als die Änderung der inneren Energie bei einer Erwärmung für konstante Volumina V und Teilchenzahlen N . Mit Hilfe der Entropie $S = -(\partial\mathcal{F}_{GK}/\partial T)_{V,\mu}$ lässt sie sich auch angeben als

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} . \quad (2.96)$$

Die Entropie kann aus dem großkanonischen Potential nach $S = -(\partial\mathcal{F}_{GK}/\partial T)_{V,\mu}$ bestimmt werden. Da in (2.96) die Konstanz der Teilchenzahl explizit gefordert wird, lässt sich die Wärmekapazität nicht direkt als die zweite Ableitung von \mathcal{F}_{GK} bestimmen. Dieser Umstand wird durch einen Korrekturterm berücksichtigt, und man erhält für die Wärmekapazität ganz allgemein

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}_{GK}}{\partial T^2} \right)_{V,\mu} - T \left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{T,\mu}^2 \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-1} . \quad (2.97)$$

Mit dem großkanonischen Potential aus (2.92) und der Teilchenzahl aus (2.95) ergibt sich für die Wärmekapazität im homogenen Bose-Gas

$$C_V = \frac{V}{\lambda^3} \left\{ \frac{15}{4} k_B \zeta_{5/2}(e^{\beta\mu}) - \frac{9}{4} k_B \frac{\zeta_{3/2}^2(e^{\beta\mu})}{\zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})} \right\} . \quad (2.98)$$

Mit dem Ausdruck (2.95) für die Teilchenzahl erhält man daraus die spezifische Wärme pro Teilchen

$$\frac{C_V}{N} = k_B \left\{ \frac{15}{4} \frac{\zeta_{5/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} - \frac{9}{4} \frac{\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})}{\zeta_{1/2}(e^{\beta\mu})} \right\}. \quad (2.99)$$

An dieser Stelle sollten wir noch den Anwendungsbereich der obigen Beziehungen diskutieren. Betrachtet man die Teilchenzahl-Gleichung (2.95) etwas näher, so fällt auf, dass das chemische Potential μ hierin nicht positiv sein darf. Andernfalls würde die polylogarithmische Funktion $\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})$ entsprechend der Definition (2.94) divergieren, wodurch die Teilchenzahldichte N/V selbst divergent wäre. Der größtmögliche Wert für das chemische Potential ist somit $\mu = 0$. Das ist der Spezialfall der allgemeinen Beobachtung, dass diese Größe aufgrund der positiven Definitheit der mittleren Teilchenzahlen (1.3) den Energie-Eigenwert des Grundzustands nie übersteigen darf. Diesmal ist die Grundzustands-Energie entsprechend den Spezifizierungen (2.90) eine verschwindende Größe $E_G = E_0 = 0$ und schränkt somit das chemische Potential auf nichtpositive Werte ein. Der Wert $\mu = 0$ wird jedoch bei einer von null verschiedenen Temperatur angenommen. Diese Temperatur wird als die kritische Temperatur T_c bezeichnet und lässt sich als Funktion der Teilchenzahl N angeben. Dazu bemerken wir zuerst, dass es eine Beziehung zwischen der polylogarithmischen Funktion $\zeta_\nu(z)$ und der Riemannsche Zeta-Funktion

$$\zeta(\nu) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\nu} \quad (2.100)$$

besteht.

Aus den beiden Definitionen (2.94) und (2.100) würde man naiverweise erwarten, dass die erstere für den Fall $z \rightarrow 1$ in die letztere übergeht. Doch das kann nur für den Fall $\nu > 1$ gelten, wo beide Ausdrücke durch ihre Reihendarstellungen tatsächlich wohl definiert sind. Es bestehen auch für den wichtigen Fall $\nu \leq 1$ noch gewisse Beziehungen zwischen den beiden Größen. Doch sind diese dann keineswegs trivial und bilden die Kernaussage der so genannten Robinsonschen Entwicklungs-Formel [53]

$$\zeta_\nu(e^{-x}) = \Gamma(1-\nu) x^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} (-x)^k \zeta(\nu-k)/k! , \quad (2.101)$$

die für kleine Parameter x gilt. Die Herleitung und längere Diskussion dieser Formel ist im Anhang B zu finden. Für den Spezialfall $\nu > 1$ und $x = 0$ ergibt sich daraus in der Tat die oben erwähnte Beziehung

$$\zeta_\nu(e^{-x}) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \zeta(\nu) \quad (\nu > 1) . \quad (2.102)$$

Nun kommen wir zurück zur Bestimmung der kritischen Temperatur $T = T_c^{(0)}$. Aufgrund der Relation (2.95) mit der de Broglie-Wellenlänge (2.93) und der Beziehung (2.102) ergibt sich für die Teilchenzahl am kritischen Temperaturwert (mit $\mu \rightarrow 0$)

$$N = \left(\frac{k_B M}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} V T_c^{(0)3/2} \zeta(3/2) . \quad (2.103)$$

Dies lässt sich nach der kritischen Temperatur auflösen mit dem Resultat

$$T_c^{(0)} = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B M} \left[\frac{N}{V \zeta(3/2)} \right]^{2/3}. \quad (2.104)$$

Mit dem Wert $\zeta(3/2) \approx 2.612$ ergibt das in der Tat die in (1.5) angegebene Abhängigkeit von der Dichte $n \equiv N/V$. Oberhalb dieser kritischen Temperatur kann das chemische Potential μ bei einer konstanten mittleren Teilchenzahl bzw. Dichte nur negative Werte annehmen und ist somit unproblematisch. Genau das war die in der Abb. 1.1 b) dargestellte Situation, die Verhältnisse in der oberen nichtkondensierten Phase beschrieb.

Versucht man nun, die Teilchenzahl unterhalb der kritischen Temperatur zu bestimmen, so stellt man fest, dass selbst im Extremfall $\mu = 0$ noch

$$\frac{N(T < T_c^{(0)})}{N(T_c^{(0)})} = \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2} \quad (2.105)$$

gelten muss. Daraus resultiert, dass die Teilchenzahl unterhalb der kritischen Temperatur reduziert wird, so dass es bei verschwindender Temperatur gar keine Teilchen geben dürfte. Dieser Umstand ist physikalisch nicht zu vertreten, denn die mittlere Gesamt-Teilchenzahl im System ist eine von Außen einstellbare Größe. Das Fehlen der Teilchen deutet lediglich auf ein Problem der in diesem Abschnitt gemachten Näherungen hin. Im anschließenden Abschnitt werden wir zeigen, dass die Teilchen in der Tat nicht verschwinden, sondern nur in den Grundzustand übergehen. Den letzteren haben wir nämlich in diesem Abschnitt nicht korrekt berücksichtigt.

2.2.2 Homogenes Bose-Gas mit Grundzustand

In diesem Abschnitt werden wir den Beitrag des Grundzustandes etwas genauer untersuchen. Dabei werden wir auch feststellen, dass das Fehlen der Teilchen, welches wir im letzten Abschnitt bemerkt haben, nur für die thermisch angeregten Zustände gilt. Die restlichen Teilchen können wir im Grundzustand wiederfinden. Genau dieser Sachverhalt wird auch üblicherweise als die Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet.

Die Schwachstelle der Näherungen im letzten Abschnitt liegt in der kontinuierlichen Integration (2.90) über alle Quantenzustände. Eine diskrete Summe kann zwar im Limes $V \rightarrow \infty$ in der Tat meistens durch ein Integral genähert werden, aber nur, wenn der Summand im gesamten Integrationsgebiet keine Singularitäten aufweist. Das ist jedoch nicht der Fall, wenn man wie in (2.85) für $\mu = E_G = 0$ über die Bose-Einstein-Verteilungen summiert, da diese am unteren Rande des Gebiets divergent ist. Den Grundzustand müssen wir somit gesondert berücksichtigen. Das wird durch die Vorschrift

$$\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \mapsto f_0 + V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}) \quad (2.106)$$

für eine zuerst beliebige Funktion f gegeben, welche die vorherige Ersetzungsvorschrift (2.90) korrigiert. Die zugrunde liegende Interpretation besteht darin, dass der verschwindende Wellenvektor

$\mathbf{k} = \mathbf{0}$ eigentlich nicht nur den Grundzustand des Systems angibt, sondern auch noch den ersten angeregten Zustand, der in einem homogenen System durch keine Lücke vom Grundzustand getrennt ist. Der Integrationsanfang bei $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ in (2.90) berücksichtigt nur den ersten angeregten Zustand und übersieht den Grundzustands-Beitrag. In (2.106) wird er dagegen mit dem Term f_0 erfasst. Die Verwendung von (2.106) hat einen leichten Einfluss auf die Vollständigkeit (2.36) der Zustände (2.88), man erhält nämlich $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + 1/V$ statt des ursprünglich geforderten $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Dies ist aber im Limes $V \rightarrow \infty$, welcher im homogenen Gas angenommen wird, zu vernachlässigen. Die mittlere Teilchenzahl (2.85) ergibt sich nun aufgrund der Ersetzung (2.106) zu

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) , \quad (2.107)$$

wobei der erste Summand

$$N_0 \equiv \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \quad (2.108)$$

den Unterschied zum früheren Ergebnis (2.95) ausmacht. Das ist die Teilchenzahl im Grundzustand. Solange das chemische Potential μ nicht verschwindet, ist auch diese Teilchenzahl im Grundzustand nur eine endliche Größe. Das würde im Vergleich zum zweiten Term aus (2.107) nicht ins Gewicht fallen, weil letzterer mit dem sehr großen Volumen V skaliert. In einem solchen Fall gilt die Näherung (2.95) vom letzten Kapitel. Anders ist es im Falle eines verschwindenden chemischen Potentials, da dann die Teilchenzahl (2.108) unendlich wird. Um dieser Unendlichkeit einen physikalischen Sinn zu verleihen, müssen wir eigentlich sagen, dass der Grundzustand-Beitrag von der Größenordnung der sehr großen Gesamtteilchenzahl N wird. Das chemische Potential selbst verschwindet dann in der Tat gemäß $\mu \sim -1/(\beta N)$. Das Verhalten der Teilchenzahl lässt sich nun für beide Phasen oberhalb und unterhalb der kritischen Temperatur in der Form

$$\begin{cases} \mu < 0 , N_0/N \approx 0 & \text{für } T > T_c^{(0)} , \\ \mu \approx 0 , N_0/N > 0 & \text{für } T \leq T_c^{(0)} \end{cases} , \quad (2.109)$$

zusammenfassen. Die kritische Temperatur $T_c^{(0)}$ aus (2.104) ist diejenige Temperatur, die beide Bereiche trennt.

Erinnern wir uns hier noch an das Problem der fehlenden Teilchen im letzten Abschnitt, so stellen wir fest, dass die mittlere Gesamtteilchenzahl (2.107) nun im gesamten Temperaturbereich fest vorgegeben werden kann. Aber diese Teilchenzahl kann nun unter den beiden Termen aufgeteilt werden. Der erste Term steht dann für die Zahl der im Grundzustand kondensierter Teilchen und der zweite für die Zahl der thermisch angeregten Teilchen. Falls nun der zweite Term weniger Teilchen aufnimmt als es deren insgesamt gibt, dann sind diese Teilchen dem ersten Kondensat-Anteil-Term zuzuordnen. Da dieser Fall nun offensichtlich unterhalb der kritischen Temperatur auftritt, gilt dort $\mu \approx 0$ und somit nach (2.102) $\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) \approx \zeta(3/2)$. Die Gleichung (2.107) lässt sich für diesen Fall in der Form

$$N_0 = N - \left(\frac{k_B M}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} V T^{3/2} \zeta(3/2) \quad (2.110)$$

umschreiben. Der Anteil der kondensierten Teilchen berechnet sich nun im thermodynamischen Limes unendlich vieler Teilchen mit Hilfe der kritischen Temperatur (2.104) unter Berücksichtigung der oberen Phasenbedingung (2.109) zu

$$\frac{N_0}{N} \approx \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2} \right\} \Theta (T_c^{(0)} - T) . \quad (2.111)$$

Dieses Resultat ist bereits in Abb. 1.2 graphisch dargestellt. Da der Ordnungsparameter N_0/N am kritischen Punkt $T = T_c^{(0)}$ kontinuierlich verschwindet, handelt es sich bei der Bose-Einstein-Kondensation im homogenen Bose-Gas um einen Phasenübergang zweiter Ordnung nach dem Landau-Kriterium.

Nun widmen wir uns noch der Wärmekapazität (2.97). Dazu wird das großkanonische Potential (2.81) benötigt, welches sich mit der korrigierten Vorschrift (2.106) zu

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\mu}] - \frac{1}{\beta} \frac{V}{\lambda^3} \zeta_{5/2} (e^{\beta\mu}) \quad (2.112)$$

ergibt. Für Temperaturen oberhalb des kritischen Wertes ist der erste Term endlich und somit gegenüber dem zweiten Volumen-abhängigen Term im Limes $V \rightarrow \infty$ stark unterdrückt. Hier kann man (2.112) tatsächlich durch den vorherigen Ausdruck (2.92) ersetzen, und die Wärmekapazität genügt in diesem Temperaturbereich der Gleichung (2.99) aus dem letzten Abschnitt 2.2.1. Unterhalb der kritischen Temperatur, wo $\beta\mu \sim -1/N$ gilt, ist der erste Term aus (2.112) nicht mehr vernachlässigbar. Außerdem gilt dort die Beziehung $\zeta_{5/2} (e^{\beta\mu}) \approx \zeta_{5/2}(1) = \zeta(5/2)$, und (2.97) liefert unter Berücksichtigung der Teilchenzahl-Gleichung (2.110) die Wärmekapazität

$$C_V = \frac{15 k_B}{4} \frac{V}{\lambda^3} \zeta(5/2) + 3 k_B \beta\mu \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2) - \frac{9 k_B}{4} e^{\beta\mu} (e^{-\beta\mu} - 1)^2 \left[\frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2) \right]^2 . \quad (2.113)$$

Setzt man hier die kritische Temperatur (2.104) und die Beziehung $V\zeta(3/2)/\lambda^3 = N(T/T_c)^{3/2}$ ein, so kann die Gleichung (2.113) noch umgeformt werden zu

$$C_V = k_B N \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2} \left\{ \frac{15 \zeta(5/2)}{4 \zeta(3/2)} + 3\beta\mu - \frac{9}{4} e^{\beta\mu} (e^{-\beta\mu} - 1)^2 N \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2} \right\} . \quad (2.114)$$

Erinnern wir uns noch an dieser Stelle, dass $\beta\mu \sim -1/N$ gilt, so erkennen wir, dass die letzten beiden Summande in der obigen Gleichung von der Ordnung $\mathcal{O}(1/N)$ und somit gegenüber dem ersten Summand vernachlässigbar sind. Aufgrund dessen ergibt sich in der unteren Temperatur-Phase das vereinfachte Resultat:

$$\frac{C_V(T < T_c^{(0)})}{N} \approx k_B \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^{3/2} \frac{15 \zeta(5/2)}{4 \zeta(3/2)} . \quad (2.115)$$

Diese Wärmekapazität ist zusammen mit dem entsprechenden Resultat in der Hochtemperaturphase aus (2.99) graphisch in Abb. 2.1 dargestellt. Während die Temperaturabhängigkeit in der

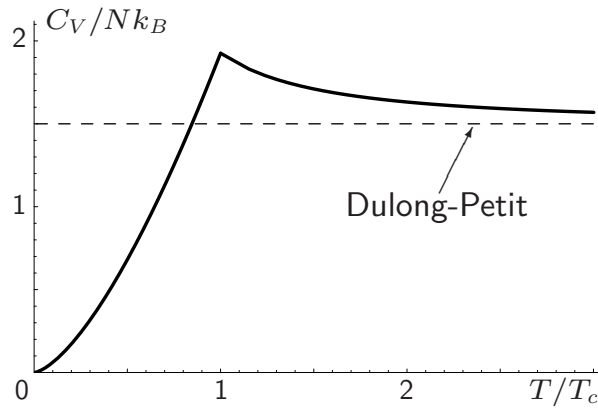


Abbildung 2.1: Reduzierte Wärmekapazität im homogenen Fall nach (2.99) für $T > T_c$ und nach (2.115) für $T < T_c$. Die gestrichelte Linie zeigt das klassische Dulong-Petit-Resultat.

unteren Phase unmittelbar aus (2.115) bekannt ist, ist sie in der oberen Phase in (2.99) nur implizit gegeben. Für die graphische Darstellung in dieser Phase wählen wir daher die parametrische Darstellung der reduzierten Temperatur

$$\frac{T}{T_c^{(0)}} = \left[\frac{\zeta(3/2)}{\zeta_{3/2}(e^{\beta\mu})} \right]^{2/3}, \quad (2.116)$$

die wir mit (2.93), (2.95) und (2.103) hergeleitet haben. Die Fugazität $z \equiv e^{\beta\mu} \in (0; 1]$ spielt hierbei die Rolle des Parameters, mit dessen Hilfe die Wertepaare aus (2.99) und (2.116) angegeben werden können.

Aus Abb. 2.1 ist unter anderem zu sehen, dass sich im Grenzfall sehr hoher Temperaturen das aus der klassischen Thermodynamik bekannte Dulong-Petit-Gesetz mit einer Wärmekapazität von $3k_B/2$ pro Teilchen ergibt. Am absoluten Temperaturnullpunkt verschwindet dagegen diese Wärmekapazität, wie es vom dritten Hauptsatz der Thermodynamik gefordert wird. Am kritischen Punkt erreicht die Wärmekapazität ihren Maximalwert $C_V(T=T_c^{(0)}) \approx N \cdot 1.926 k_B$ und zeigt dort einen deutlichen Knick.

2.3 Bose-Gase in harmonischen Fallen

In diesem Abschnitt untersuchen wir den für die Experimente relevanten Spezialfall eines dreidimensionalen Ein-Teilchen-Potentials (1.7). Dieses Potential ist additiv in den einzelnen Raumkomponenten, wodurch sich auch die Bewegung eines Teilchens in den einzelnen Richtungen voneinander unabhängig gestaltet. Das Eigenwertproblem (2.35) wird somit durch die Wellenfunktion erfüllt, die sich multiplikativ aus den Lösungen für das bekannte Problem des eindimensionalen harmonischen Oszillators zusammensetzt:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \exp \left\{ -\frac{M(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2)}{2\hbar} \right\} \prod_{i=1}^3 \sqrt{\frac{1}{2^{k_i} k_i!}} \left(\frac{M\omega_i}{\pi\hbar} \right)^{1/4} H_{k_i} \left(\sqrt{\frac{M\omega_i}{\hbar}} x_i \right) \quad (2.117)$$

mit $k_i = 0, 1, 2, \dots$ für alle Raumrichtungen i . Dabei bezeichnen die Funktionen $H_{k_i}(x)$ Hermite-Polynome. Die dazugehörigen Energie-Eigenwerte setzen sich additiv aus den wohl bekannten Eigenwerten des eindimensionalen Problems zusammen zu

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_1(k_1 + 1/2) + \hbar\omega_2(k_2 + 1/2) + \hbar\omega_3(k_3 + 1/2) . \quad (2.118)$$

Verwenden wir noch den algebraischen Mittelwert der Frequenzen

$$\bar{\omega} \equiv (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) / 3 , \quad (2.119)$$

so können wir dafür auch schreiben

$$E_{\mathbf{k}} = 3 \hbar \bar{\omega} / 2 + \hbar (\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3) . \quad (2.120)$$

Dieses Ergebnis setzen wir in (2.81) ein und erhalten daraus das großkanonische Potential

$$\mathcal{F}_{GK} = - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{n\beta\hat{\mu}} \sum_{k_1, k_2, k_3=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3)} , \quad (2.121)$$

wobei wir hierfür noch die folgende Abkürzung für das reduzierte chemische Potential verwendet haben:

$$\hat{\mu} \equiv \mu - 3 \hbar \bar{\omega} / 2 . \quad (2.122)$$

Die jeweiligen Summationen in (2.121) sind leicht auszuwerten, da sie lediglich geometrische Reihen darstellen. Weil wir aber aus dem letzten Abschnitt gelernt haben, dass der Grundzustand $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ mit besonderer Aufmerksamkeit zu behandeln ist, spalten wir diesen auch hier von den restlichen, angeregten Zuständen ab. Somit ergibt sich für das großkanonische Potential (2.81)

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \left\{ \frac{1}{(1 - e^{-n\beta\hbar\omega_1})(1 - e^{-n\beta\hbar\omega_2})(1 - e^{-n\beta\hbar\omega_3})} - 1 \right\} . \quad (2.123)$$

Weiterhin finden wir daraus die mittlere Teilchenzahl entsprechend der Beziehung (2.85) zu

$$N = N_0 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ \frac{1}{(1 - e^{-n\beta\hbar\omega_1})(1 - e^{-n\beta\hbar\omega_2})(1 - e^{-n\beta\hbar\omega_3})} - 1 \right\} \quad (2.124)$$

mit der mittleren Teilchenzahl im Grundzustand

$$N_0 \equiv \frac{1}{e^{-\beta\hat{\mu}} - 1} . \quad (2.125)$$

Interessanterweise entspricht die letzte Gleichung der Identität (2.108) für das homogene Gas. Diesmal wird jedoch statt des chemischen Potentials μ die um die Grundzustands-Energie reduzierte Größe $\hat{\mu}$ aus (2.122) verwendet. Da im homogenen Gas die Energie im Grundzustand als verschwindend angenommen wurde, sind beide Größen dort identisch.

Mit Hilfe der Ausdrücke (2.123) und (2.124) werden wir im Folgenden die Kondensatteilchendichte und die Wärmekapazität der Bose-Gase in harmonischen Fallen ermitteln. Im nächsten Unterabschnitt berechnen wir diese in niedrigster semiklassischen Ordnung, was dem thermodynamischen Limes entspricht. Im nachfolgenden Unterabschnitt beschäftigen wir uns mit deren erster semiklassischer Korrektur.

2.3.1 Semiklassische Näherung

Die semiklassische Näherung besteht in der Annahme, dass der Abstand zwischen zwei benachbarten quantenmechanischen Energieniveaus, welcher nach (2.120) durch $\hbar\omega$ gegeben ist, klein gegenüber der thermischen Energie $1/\beta$ ist. Diesen Umstand kann man in der Ungleichung

$$\beta\hbar\omega \ll 1 \quad (2.126)$$

zusammenfassen. Das ist in erster Linie für nicht allzu große Werte von β und ω aufgrund der Kleinheit der Planck-Konstante \hbar erfüllt. Dieselbe Annahme führt uns zur klassischen Physik als einen Grenzfall der Quantenphysik, und dieser Umstand ist verantwortlich für die Namensgebung dieser Näherung. Ebenfalls kann man diese Näherung als eine Näherung für hohe Temperaturen oder für kleine Fallenfrequenzen sehen. Letzteres lässt sich noch mit der mittleren effektiven Breite einer harmonischen Falle

$$L_\omega \equiv \left(\frac{\hbar}{M\omega} \right)^{1/2} \quad (2.127)$$

verbinden. Dies ist die mittlere quadratische Breite der Grundzustands-Wellenfunktion. Auch der thermischen Wolke der angeregten Zustände lässt sich eine mittlere Breite zuordnen. Diese skaliert jedoch entsprechend der Beziehung

$$L_T = \frac{1}{\omega} \left[\frac{\zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}})}{\beta M \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})} \right]^{1/2} \quad (2.128)$$

reziprok mit der Frequenz ω . Aus beiden Resultaten (2.127) und (2.128) sehen wir, dass harmonische Fallen mit kleineren Frequenzen effektiv größere Volumina darstellen. Wollen wir nun, dass unser Bose-Gas in der Falle eine bestimmte feste Dichte hat, so muss mit einem größer werdenden Volumen auch die Teilchenzahl N ansteigen. Aufgrund dieser Überlegung stellen wir nun fest, dass bei festen Teilchendichten die kleinen Fallenfrequenzen ω den großen Teilchenzahlen N entsprechen. Die semiklassische Näherung (2.126) ergibt somit in führender Ordnung (also bei $\beta\hbar\omega \rightarrow 0$) den thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$. Um genau diesen Limes und die erste Korrektur dazu, die den führenden Effekt der Endlichkeit realer Systeme berücksichtigt, geht es in der anschließenden Diskussion.

Als Ausgangspunkt gilt uns das großkanonische Potential (2.123), welches hier bis zur ersten Ordnung im Kleinheitsparameter $\beta\hbar\omega$ entwickelt wird:

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n^4} \left\{ 1 + \frac{n\beta\hbar}{2} (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) + \mathcal{O}(\beta^2\hbar^2\omega^2) \right\}. \quad (2.129)$$

Dabei verwendeten wir das geometrische Mittel der Frequenzen

$$\tilde{\omega} \equiv (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3} \quad (2.130)$$

und erinnerten uns an den arithmetischen Frequenz-Mittelwert (2.119). Mit Hilfe der polylogarithmischen Funktion (2.94) lässt sich (2.129) weiterhin zu

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left\{ \zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}}) + \frac{3}{2} \beta\hbar\tilde{\omega} \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) + \mathcal{O}(\beta^2\hbar^2\omega^2) \right\} \quad (2.131)$$

umschreiben. Analog dazu erhalten wir die mittlere Teilchenzahl (2.124) in der semiklassischen Näherung zu

$$N = N_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left\{ \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) + \frac{3}{2} \beta\hbar\tilde{\omega} \zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}}) + \mathcal{O}(\beta^2\hbar^2\omega^2) \right\}, \quad (2.132)$$

wobei N_0 nach wie vor die Teilchenzahl im Kondensat (2.125) ist. Bei Untersuchungen dieser Gleichung stellen wir fest, dass analog zur Argumentation aus dem Abschnitt 2.2.2 die verschwindenden Werte des reduzierten chemischen Potentials $\hat{\mu}$ eine besondere Rolle spielen. Verschwindend bedeutet auch in diesem Fall Werte von der Ordnung $\hat{\mu} \sim -1/(\beta N)$, welche im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ gegen null konvergieren. Für alle solchen Werte ist die Kondensat-Teilchenzahl N_0 aus (2.125) von der Größenordnung der Gesamtteilchenzahl N . Ganz anders ist die Situation für nichtverschwindende $\hat{\mu}$ -Werte, für die der erste Term in (2.132) eine endliche feste Zahl ist und im thermodynamischen Limes vernachlässigt werden kann. Es ergeben sich also auch diesmal zwei Phasen, die nach Ersetzung $\mu \mapsto \hat{\mu}$ in Analogie zu (2.109) beschrieben werden. Die kritische Temperatur T_c trennt die beide Phasen voneinander und kann aus beiden Phasen-Bedingungen bestimmt werden.

Unterhalb der kritischen Temperatur gilt immer $\beta\hat{\mu} \approx 0$ und die polylogarithmischen Funktionen aus (2.132) reduzieren sich entsprechend der Beziehung (2.102) auf die Riemannschen Zeta-Funktionen. Am kritischen Punkt muss außerdem noch der Kondensat-Anteil N_0/N verschwinden, weil das gleichzeitig ein Punkt aus der oberen Temperatur-Phase ist. Somit reduziert sich die Gleichung (2.132) am kritischen Punkt zu

$$N = \left(\frac{k_B T_c}{\hbar\tilde{\omega}} \right)^3 \left\{ \zeta(3) + \frac{3\hbar\tilde{\omega}}{2k_B T_c} \zeta(2) + \mathcal{O}(\beta_c^2 \hbar^2 \omega^2) \right\}. \quad (2.133)$$

Vernachlässigt man hierbei den zweiten Summanden, der offensichtlich die semiklassische Korrektur führender Ordnung beschreibt, so ergibt sich daraus der kritische Temperaturwert im thermodynamischen Limes

$$T_c^{(0)} \equiv \frac{\hbar\tilde{\omega}}{k_B} \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3}. \quad (2.134)$$

Weil näherungsweise $\zeta(3) \approx 1.202$ gilt, entspricht dies genau dem in (1.8) angegebenen Resultat. An dieser Stelle sei bemerkt, dass, obwohl die Teilchenzahl N hier explizit vorkommt, dieses Resultat auch im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ sinnvoll bleibt. Hierbei müssen wir nur dafür sorgen, dass die mittlere Frequenz $\tilde{\omega}$ gerade so schnell verschwindet, dass das Produkt $\tilde{\omega} N^{1/3}$ endlich bleibt. Erinnern wir uns hier noch an die mittlere Breite der thermischen Wolke (2.128), so sehen wir, dass das Resultat (2.134) in der Tat lediglich von der thermischen Teilchendichte abhängt und keineswegs von der Teilchenzahl selbst.

Weiterhin ergibt sich unmittelbar aus (2.133) die erste semiklassische Korrektur zur kritischen Temperatur (2.134):

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} = 1 - \frac{\tilde{\omega}}{2\tilde{\omega}} \frac{\zeta(2)}{\zeta^{2/3}(3)} \frac{1}{N^{1/3}} + \mathcal{O}(N^{-2/3}). \quad (2.135)$$

Unterhalb dieser kritischen Temperatur wird der Kondensat-Anteil N_0/N makroskopisch. Er lässt sich mit Hilfe (2.134) aus der Teilchenzahl-Gleichung (2.132) zu

$$\frac{N_0}{N} \approx \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^3 - \frac{3\bar{\omega}}{2\tilde{\omega}} \frac{\zeta(2)}{\zeta^{2/3}(3)} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^2 \frac{1}{N^{1/3}} + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \right\} \Theta(T_c - T) \quad (2.136)$$

berechnen. Dabei sorgt die Heaviside-Funktion für das Verschwinden der Grundzustand-Besetzung oberhalb der kritischen Temperatur, was aus der allgemeingültigen Beziehung (2.109) näherungsweise folgt. Das Verhältnis $T/T_c^{(0)}$ darin lässt sich nach (2.135) mit Hilfe T/T_c umschreiben, so dass wir alternativ zu (2.136) die Beziehung

$$\frac{N_0}{N} \approx \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 + \frac{3\bar{\omega}}{2\tilde{\omega}} \frac{\zeta(2)}{\zeta^{2/3}(3)} \left[\left(\frac{T}{T_c} \right)^3 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right] \frac{1}{N^{1/3}} + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \right\} \Theta(T_c - T) \quad (2.137)$$

erhalten. Die ersten zwei Summanden auf rechten Seite dieser Gleichung sind N -unabhängig und bleiben auch im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ erhalten. Sie spiegeln genau das bekannte Resultat (1.9) wieder, welches für endliche Teilchenzahlen N durch weitere Terme in (2.137) korrigiert wird.

Der Kondensatteilchen-Anteil (2.137) ist in Abb. 2.2 a) für verschiedene Teilchenzahlen N graphisch dargestellt. Alle Ergebnisse sind dabei gegen die reduzierte Temperatur $T/T_c^{(0)}$ aufgetragen, damit die Verschiebung der kritischen Temperatur (2.135) aufgrund der endlichen System-Größe explizit sichtbar wird. Bei der graphischen Darstellung ist das Resultat (2.137) gegenüber (2.136) vorzuziehen. Das Verhältnis $T/T_c^{(0)}$ kommt dabei in (2.137) zwar nicht explizit vor, es bedarf aber einer einfachen Umparametrisierung der Temperaturwerte, die wir nach $T/T_c^{(0)} = (T/T_c)(T_c/T_c^{(0)})$ aus Relation (2.135) erhalten. Dafür liefert die Gleichung (2.137) am kritischen Punkt $T/T_c = 1$ sofort einen verschwindenden Wert, während sich nach (2.136) noch störungstheoretisch bedingte Rest-Terme ergäben. Wie man aus den so beschaffenen Graphiken sieht, fängt die Kondensation für kleinere Teilchenzahlen bei entsprechend niedrigeren Temperaturen an. Dieser Befund ist unter dem Begriff "Finite-Size-Effekt" bekannt und wurde z.B. in [54] diskutiert. Diese Finite-Size-Effekte unterdrücken offensichtlich den Kondensationsprozess in harmonischen Fallen. Am absoluten Nullpunkt der Temperatur sind aber nach wie vor alle Teilchen auskondensiert.

Aus (2.135) und (2.137) sieht man weiterhin, dass aufgrund der Abhängigkeit der Korrekturterme vom Parameter $\bar{\omega}/\tilde{\omega}$ die Form des Potentials eine nicht zu vernachlässigende Rolle spielt. In der Graphik 2.2 b) kann man diesen nichttrivialen Einfluss der Fallengeometrie auf den Kondensationsprozess in endlichen Systemen sehen. Die Fallenfrequenzen hierfür wurden so gewählt, dass $\omega_1 = \omega_2 = x\omega$ und $\omega_3 = \omega/x^2$ mit einem frei zu wählenden Parameter x sind. Es handelt sich dabei um prolate (zigarrenförmige) für $x < 1$ bzw. um oblate (pfannkuchenförmige) für $x > 1$ Ellipsoide mit einem von der Anisotropie unabhängigen effektiven Volumen. Interessant ist dabei zu bemerken, dass das Verhältnis $\bar{\omega}/\tilde{\omega}$ bei $x = 1$ (isotrope Falle) sein einziges Minimum besitzt und dann gleich 1 ist. Das gilt übrigens auch für total unsymmetrische Ellipsoiden. Die kritischen Temperaturen (2.135) werden dementsprechend umso niedriger, je stärker die Anisotropie ist.

Im weiteren Verlauf der Diskussion wenden wir uns der Wärmekapazität zu. Dabei beginnen mit der Situation im oberen Temperaturbereich $T > T_c$ und bemerken, dass die ersten Summanden in

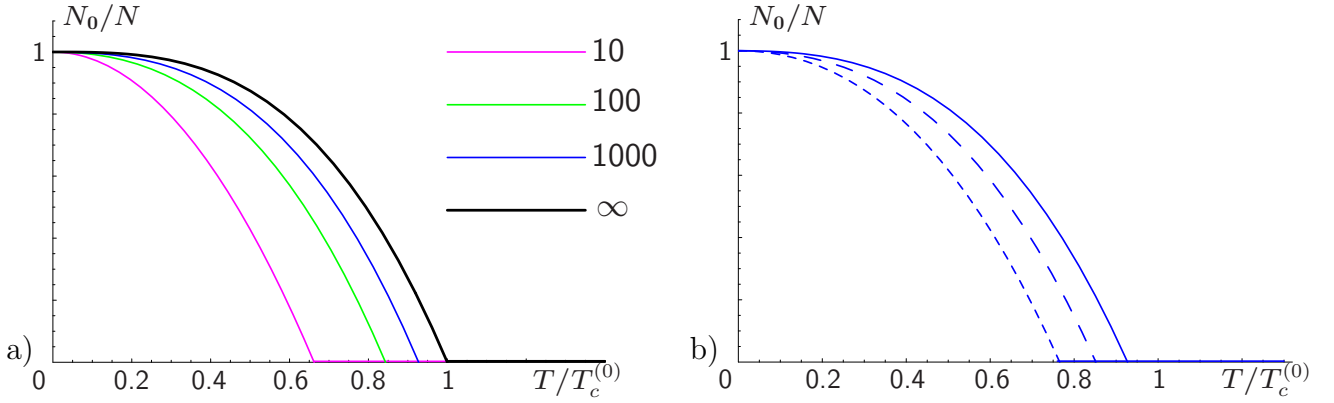


Abbildung 2.2: Anteil der Kondensatteilchen in semiklassischer Näherung erster Ordnung a) in einer isotropen Falle für $N = 10, 100, 1000$ und unendlich viele Teilchen, b) in einer anisotropen Falle mit $\omega_1 = \omega_2 = x\omega$ und $\omega_3 = \omega/x^2$ für $N = 1000$ Teilchen und $x = 1/3$ (kurz gestrichelt), $x = 3$ (lang gestrichelt), $x = 1$ (durchgezogen). Bei dieser Darstellung setzen wir die mittlere thermische Teilchendichte als konstant voraus, so dass der kritische Temperaturwert $T_c^{(0)}$ aus (2.134) effektiv nicht von N abhängt.

(2.131) und (2.132) nur endliche fest vorgegebene Grundzustand-Beiträge zum großkanonischen Potential und zur Teilchenzahl beisteuern. Im Limes großer Teilchenzahlen N sind sie aus diesem Grund gegenüber den Beiträgen thermischer Teilchen zu vernachlässigen. Somit ergibt sich die Wärmekapazität aus der allgemeinen Identität (2.97) mit $\partial/\partial\mu = \partial/\partial\hat{\mu}$ zu

$$C_V(T > T_c) = \frac{k_B}{(\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ 12 \zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}}) - 9 \frac{\zeta_3^2(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}})} - 9 \beta\hbar\bar{\omega} \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) \left[1 - \frac{3}{2} \frac{\zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}}) \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta_2^2(e^{\beta\hat{\mu}})} \right] + \mathcal{O}(\beta^2\hbar^2\omega^2) \right\}. \quad (2.138)$$

Der hierbei explizit vorkommende Vorfaktor $1/(\beta\hbar\bar{\omega})^3$ ist im thermodynamischen Limes unendlich. Doch diese Unendlichkeit ist entsprechend der Gleichung (2.132) selbst von der Größenordnung der mittleren Teilchenzahl N in der oberen Temperatur-Phase, so dass die Wärmekapazität bezogen auf ein Teilchen auch im thermodynamischen Limes endlich ist und sich wie

$$\frac{C_V(T > T_c)}{N} = k_B \left\{ 12 \frac{\zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})} - 9 \frac{\zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}})} + \frac{9\bar{\omega}}{2\tilde{\omega}} \frac{\zeta_3^{1/3}(e^{\beta\hat{\mu}})}{N^{1/3}} \left[1 - 4 \frac{\zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}}) \zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta_3^2(e^{\beta\hat{\mu}})} + 3 \frac{\zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}}) \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta_2^2(e^{\beta\hat{\mu}})} \right] + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \right\}. \quad (2.139)$$

schreiben lässt. Um nun die Wärmekapazität auch in der unteren Temperatur-Phase zu berechnen, erinnern wir uns daran, dass das reduzierte chemische Potential hier eine kleine Größe $\hat{\mu} \sim -1/(\beta N)$ darstellt. Damit sind die jeweils ersten Summanden in (2.131) und (2.132) makroskopisch groß und keinesfalls zu vernachlässigen. Dafür gelten aber die aus (2.102) folgenden Vereinfachungen $\zeta_\nu(e^{\beta\hat{\mu}}) \approx \zeta(\nu)$ für $\nu = 2, 3$ und 4. Nach der Robinsinschen Entwicklungs-Formel

aus Anhang B gelten sie zumindest bis zur Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1} \ln N)$. Damit ergibt sich die Wärmekapazität (2.97) aus den so vereinfachten Versionen von (2.131) und (2.132) zu

$$C_V(T < T_c) = \frac{k_B}{(\beta \hbar \bar{\omega})^3} \left\{ 12 \zeta(4) + 9 \beta \hbar \bar{\omega} \zeta(3) + \mathcal{O}(\beta^2 \hbar^2 \omega^2) \right. \\ \left. + \left[6 \beta \hat{\mu} - \frac{9 e^{\beta \hat{\mu}} (e^{-\beta \hat{\mu}} - 1)^2}{(\beta \hbar \bar{\omega})^3} \right] (\zeta(3) + \hbar \beta \bar{\omega} \zeta(2)) + \mathcal{O}(N^{-1} \ln N) \right\}. \quad (2.140)$$

Bei einer genaueren Untersuchung des Ausdrucks in der eckigen Klammer stellen wir fest, dass beide Terme darin von der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1})$ sind und somit sogar gegenüber dem Term $\mathcal{O}(\beta^2 \hbar^2 \omega^2) = \mathcal{O}(N^{-2/3})$ unterdrückt sind. Eliminiert man in der so vereinfachten Gleichung (2.140) den Ausdruck $\beta \hbar \bar{\omega}$ mit Hilfe (2.133), so erhält man weiterhin die spezifische Wärme pro Teilchen:

$$\frac{C_V(T < T_c)}{N} = k_B \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \left\{ 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} - 9 \frac{\bar{\omega}}{\bar{\omega}} \frac{\zeta^{1/3}(3)}{N^{1/3}} \left[2 \frac{\zeta(2)\zeta(4)}{\zeta^2(3)} - \frac{T_c}{T} \right] + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \right\}. \quad (2.141)$$

Die Ergebnisse der Wärmekapazität (2.139) und (2.141) sind in Abb. 2.3 für verschiedene Teilchenzahlen graphisch dargestellt. In der unteren Temperatur-Phase ist dafür noch zu beachten, dass sowohl die Wärmekapazität als auch die reduzierte Temperatur $T/T_c^{(0)}$ parametrisch im Wertebereich $T/T_c \in [0; 1]$ darzustellen sind. Für die obere Phase gilt dagegen die Fugazität $e^{\beta \hat{\mu}}$ als der passende Parameter. Dieser kann jedoch anders als im Abschnitt 2.2.2 nicht bis zum Wert eins durchvariiert werden, da es hier in die polylogarithmische Funktion $\zeta_1(e^{\beta \hat{\mu}})$ in (2.139) eingeht. Letztere divergiert an der Stelle $e^{\beta \hat{\mu}} = 1$ entsprechend der Robinson-Formel (2.101) wie $-\ln[-\beta \hat{\mu}]$. Dies würde am kritischen Punkt mit $-\beta \hat{\mu} \approx 0$ zu einem divergenten Ausdruck für die Wärmekapazität führen. Das entspricht natürlich keiner tieferschürfenden physikalischen Besonderheit, sondern schränkt lediglich die Anwendbarkeit der Beziehung (2.139) ein. Wie bereits zuvor bemerkt, verschwindet das reduzierte chemische Potential in der Tat nirgends, sondern nimmt unterhalb des kritischen Temperatur-Punktes lediglich die kleinen Werte $\hat{\mu} \sim -1/(\beta N)$ an. Der größtmögliche Wert der Fugazität ist demnach als $e^{\beta \hat{\mu}} = e^{-1/N}$ anzunehmen. Dieser ist in etwa auch der kritischen Temperatur zuzuordnen. Die daraus resultierende Vorgehensweise ergibt dann die endlichen von oben eingeschränkten Werte der Wärmekapazität, die in Abb. 2.3 zu sehen sind. Allerdings wird dadurch ein rechtsseitiger kritischer Temperaturwert erreicht, der mit dem linksseitigen Wert aus der Gleichung (2.135) nicht übereinstimmt. Das ergibt eine Lücke im Definitionsbereich der Wärmekapazität, die in Abb. 2.3 rein optisch durch die gepunkteten Verbindungs-Geraden geschlossen wurde. In Wirklichkeit können wir im Rahmen der semiklassischen Näherung erster Ordnung keine physikalisch sinnvollen Aussagen über diesen Temperaturbereich machen. Mit größer werdenden Teilchenzahlen N wird dieser Unbestimmtheits-Bereich jedoch immer kleiner, bis er im thermodynamischen Limes ganz verschwindet.

Aus Abb. 2.3 erkennt man weiterhin, dass die Kurven mit steigenden Teilchenzahlen gegen den thermodynamischen Limes konvergieren, welcher durch die schwarze Kurve dargestellt ist. Der Finite-Size-Effekt macht sich hier in der Verschiebung der maximalen Lagen entsprechend der Formel für die kritische Temperatur (2.135). Weiterhin wird der Wert der Wärmekapazität-Maxima

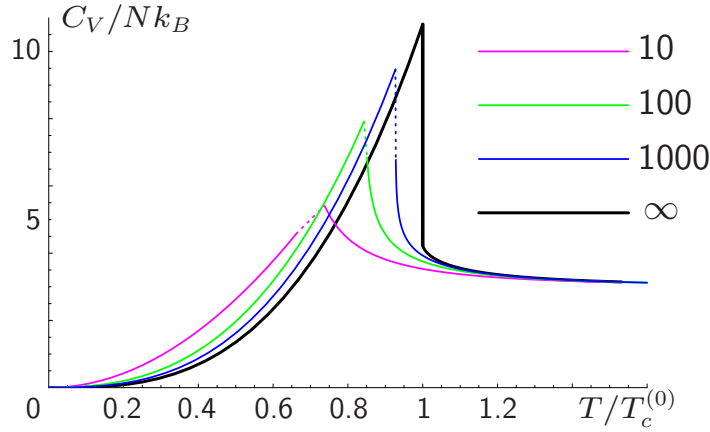


Abbildung 2.3: Wärmekapazität pro Teilchen für isotrope harmonische Fallen in erster semiklassischer Näherung (2.141) im unteren und (2.139) im oberen Temperaturbereich. Dargestellt sind Resultate für $N = 10, 100, 1000$ Teilchen im Vergleich zum thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$. Die gepunkteten Linien markieren Temperaturbereiche, in denen das in (2.139) vorkommende chemische Potential $\hat{\mu}$ die Beschränkung $\hat{\mu} \lesssim -1/(\beta N)$ aufgrund der endlichen Teilchenzahl N nicht erfüllt.

selbst reduziert und nimmt bei Annäherung an den kritischen Punkt von unten einen endlichen Wert an, der sich aus (2.141) zu

$$\begin{aligned} \frac{C_V(T \uparrow T_c)}{N} &= k_B \left\{ 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} + 9 \frac{\bar{\omega}}{\tilde{\omega}} \frac{\zeta^2(3) - 2\zeta(2)\zeta(4)}{\zeta^{5/3}(3)} \frac{1}{N^{1/3}} + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \right\} \\ &\approx 10.805 k_B - 14.012 \frac{\bar{\omega}}{\tilde{\omega}} \frac{k_B}{N^{1/3}} + \mathcal{O}(N^{-2/3}) . \end{aligned} \quad (2.142)$$

ergibt. Speziell für die im Experiment mit $N = 5000$ Rubidium-Atomen [10] realisierte harmonische Falle ist die Anisotropie $\omega_3/\omega_1 = \sqrt{8}$. Das entspricht dem von uns früher verwendeten Anisotropie-Parameter $x = 1/\sqrt{2}$ und $\bar{\omega}/\tilde{\omega} \approx 1.138$. Der linksseitige Grenzwert für die Wärmekapazität am kritischen Punkt kann somit auf $9.872 k_B$ abgeschätzt werden. Für sehr kleine Teilchenzahlen N und (oder) große Anisotropien $\bar{\omega}/\tilde{\omega}$ scheint dagegen die obige Formel problematisch zu sein, denn sie ergäbe negative Wärmekapazitäten. Doch sollte man dabei bedenken, dass es sich bei der semiklassischen Näherung um eine Störungsentwicklung um den thermodynamischen Limes handelt. Extreme Fälle kleiner Teilchenzahlen können damit nicht adäquat wiedergegeben werden. Und wie steht es mit dem rechtsseitigen Grenzwert der Wärmekapazität? Für alle endlichen Systeme lässt sich diese Frage aufgrund der oben erwähnten Probleme mit der logarithmischen Divergenz des ersten semiklassischen Korrektur-Terms nicht beantworten. Im thermodynamischen Limes spielt er aber keine Rolle, und wir finden den wohl definierten Grenzwert

$$\frac{C_V(T \downarrow T_c^{(0)})}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} k_B \left\{ 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} - 9 \frac{\zeta(3)}{\zeta(2)} \right\} \approx 4.228 k_B . \quad (2.143)$$

Damit finden wir eine Diskrepanz zwischen diesem Resultat und dem linksseitigen Wert am kritischen Punkt (2.142) im thermodynamischen Limes. Die Wärmekapazität erfährt an der kritischen

Temperatur offensichtlich einen Sprung, der in Abb. 2.3 deutlich zu sehen ist. Dieses Sprungverhalten spiegelt eine generelle Eigenschaft der Phasenübergänge zweiter Ordnung nach Ehrenfest-Kriterium wieder, denn dabei können einige zweifache Ableitungen des Energie-Potentials Unstetigkeiten aufweisen. Die hier beschriebene Wärmekapazität (2.97) ist eine solche zweifache Ableitung.

An dieser Stelle ist zu bemerken, dass sich die Wärmekapazität im homogenen Fall aus Abb. 2.1 anders verhält. Dort ist sie nämlich auch am kritischen Punkt noch stetig, obwohl bereits mit einem Knick versehen. Nach Ehrenfest-Kriterium würde hierbei ein Phasenübergang dritter Ordnung vorliegen, bei dem erst die dritte Ableitung des Energie-Funktional unstetig ist. Das steht keineswegs im Widerspruch zur Aussage im Abschnitt 2.2.2, wo wir einen Phasenübergang zweiter Ordnung nach dem Landau-Kriterium identifiziert haben. Danach werden die Phasenübergänge nämlich nicht nach dem Verhalten mehrfacher Ableitungen des Energie-Funktional unterschieden, sondern lediglich nach dem Verhalten des Ordnungsparameters. Dieser ist für Bose-Gase sowohl in harmonischen Fallen als auch in einem homogenen System durch die stetige Grundzustand-Besetzung N_0/N gegeben, wie aus Abb. 1.2 und 2.2 eindeutig zu sehen. Daher spricht man in diesen beiden Fällen von Phasenübergängen zweiter Ordnung.

Bei der Diskussion der Wärmekapazitäten in einem homogenen System und in einer harmonischen Falle im thermodynamischen Limes sollte es einen nicht verwundern, warum sich die beiden Limes so stark voneinander unterscheiden. Zwar beschreiben beide das Problem in einem unendlich großen Ensemble ohne Hintergrundpotential, im einen Fall hervorgerufen durch die nach Unendlichkeiten verschobenen Systemränder, im anderen durch das unendlich abgeflachte Potentialtopf. Doch es spielt wohl dabei eine entscheidende Rolle, wie der Grenzwert gebildet wird. Ein wichtiges Charakteristikum eines Systems ist sein Energiespektrum. Die Spektren beider unendlichen Systeme sind kontinuierlich, aber das eine (2.89) ist quadratisch in den Impulsen, während das andere (2.120) linear in den Oszillator-Quantenzahlen ist. Daraus resultieren verschiedene Energiedichten (Entartungsgrade der Energien), und diese verursachen die Unterschiede in den thermodynamischen und statistischen Eigenschaften. In harmonischen Fallen ist diese Dichte für größere Energien höher als im homogenen Fall, und das begünstigt Übergänge zwischen den Energieniveaus. Das äußert sich insbesondere in der meist etwas höheren Wärmekapazität in harmonischen Fallen (z.B. Faktor zwei Unterschied im Dulong-Petit-Bereich).

2.3.2 Höhere semiklassische Korrekturen

In diesem Unterabschnitt beschäftigen wir uns mit semiklassischen Korrekturen in einer harmonischen Falle, die über die im letzten Unterabschnitt behandelten ersten beiden Ordnungen hinausgehen. Das im letzten Unterabschnitt 2.3.1 entwickelte semiklassische Verfahren führt diesmal nicht direkt zum Erfolg, was wir am Beispiel der kritischen Temperatur zeigen können. Aus diesem Grunde wenden wir ein verbessertes Verfahren zur Untersuchung der kritischen Temperatur an, welches zuerst im Lehrbuch von Kleinert [51] entwickelt wurde.

Der Ausgangspunkt der folgenden Berechnungen ist die mittlere Teilchenzahl im harmonischen

Oszillator (2.124). Der Einfachheit halber setzen wir eine anisotrope Falle mit $\omega_i = \omega$ für alle $i = 1, 2, 3$ voraus. Die semiklassische Entwicklung von (2.124) nach dem Kleinheitsparameter (2.126) ergibt dann bis zur zweiten Ordnung

$$N = N_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^3} \left\{ \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) + \frac{3}{2} \beta\hbar\omega \zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}}) + \beta^2 \hbar^2 \omega^2 \zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}}) + \mathcal{O}(\beta^3 \hbar^3 \omega^3) \right\}. \quad (2.144)$$

Hierbei tritt die polylogarithmische Funktion $\zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}})$ auf, die für kleine $\beta\hat{\mu}$ -Werte nach der Robinson-Formel (2.101) wie $-\ln[-\beta\hat{\mu}]$ divergiert. Wollten wir daraus z.B. die kritische Temperatur wie in Unterabschnitten zuvor bestimmen, so müssten wir die obige Gleichung an der Stelle $\beta\hat{\mu} = 0$ auswerten. Da dies jedoch ab der zweiten semiklassischen Ordnung eine Divergenz bedeuten würde, kann diese naive Vorgehensweise keine physikalisch sinnvollen Ergebnisse liefern.

Unser zweiter Zugang basiert auf der kürzlich von Kleinert in [51] angewandten Prozedur zur Bestimmung kritischer Temperaturen in semiklassischen Näherungen. Darin wird die Teilchenzahl-Gleichung (2.124) für isotrope Fallen zuerst explizit als

$$N = N_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{(1 - e^{-n\beta\hbar\omega})^3} \left[3 e^{-n\beta\hbar\omega} - 3 e^{-2n\beta\hbar\omega} + e^{-3n\beta\hbar\omega} \right] \quad (2.145)$$

ausgeschrieben. Ausgehend von dieser exakten Beziehung, wird nun für den kritischen Punkt $T = T_c$ ($\beta = \beta_c$) das bereits bewährte Kriterium angewandt. Dabei wird nämlich der Grundzustands-Anteil N_0 vernachlässigt und für den thermischen Rest $\beta\hat{\mu} = 0$ gesetzt. Es gilt also

$$N = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-n\beta_c\hbar\omega})^3} \left[3 e^{-n\beta_c\hbar\omega} - 3 e^{-2n\beta_c\hbar\omega} + e^{-3n\beta_c\hbar\omega} \right]. \quad (2.146)$$

Die hierfür gestellten Forderungen gelten exakt eigentlich nur im thermodynamischen Limes, liefern für endliche Systeme jedoch noch brauchbare Näherungen. Um nun weiter voranzukommen, wird der Nenner von (2.146) semiklassisch nach dem Kleinheitsparameter

$$b \equiv \beta_c \hbar \omega \quad (2.147)$$

entwickelt. Im Grunde genommen, unterscheidet sich die hier vorgestellte Prozedur von der ursprünglichen dadurch, dass hierbei zuerst der Limes kritischer Temperatur $N_0 = \beta\hat{\mu} \rightarrow 0$ und erst anschließend die semiklassische Näherung durchgeführt wird. Letzteres hat dennoch gewisse Subtilitäten, die im Folgenden geschildert werden sollen.

Hier beginnen wir mit der direkten Anwendung der semiklassischen Näherung auf den in (2.146) vorkommenden Nenner. Dabei ergibt sich der folgende Ausdruck:

$$N = \frac{1}{b^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \left[3 e^{-nb} - 3 e^{-2nb} + e^{-3nb} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{2} nb + n^2 b^2 + \frac{3}{8} n^3 b^3 + \mathcal{O}(b^4) \right\}. \quad (2.148)$$

Die darin vorkommenden Summen lassen sich mit Hilfe der polylogarithmischen Funktionen (2.94)

umschreiben. Die obige Gleichung nimmt dadurch die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned}
N &= \frac{1}{b^3} \left[3 \zeta_3(e^{-b}) - 3 \zeta_3(e^{-2b}) + \zeta_3(e^{-3b}) \right] + \frac{3}{2b^2} \left[3 \zeta_2(e^{-b}) - 3 \zeta_2(e^{-2b}) + \zeta_2(e^{-3b}) \right] \\
&+ \frac{1}{b} \left[3 \zeta_1(e^{-b}) - 3 \zeta_1(e^{-2b}) + \zeta_1(e^{-3b}) \right] + \frac{3}{8} \left[3 \zeta_0(e^{-b}) - 3 \zeta_0(e^{-2b}) + \zeta_0(e^{-3b}) \right] \\
&+ \mathcal{O}(b) \quad . \quad (2.149)
\end{aligned}$$

Um diese Gleichung für kleine Parameter b auszuwerten, wenden wir darauf die Robinson-Entwicklungsformel (2.101) bzw. deren Spezifizierungen (B.14)–(B.16) aus dem Anhang B an. Nach einer längeren Rechnung ergibt sich schließlich bis zur Ordnung $\mathcal{O}(b)$

$$N = \frac{1}{b^3} \zeta(3) + \frac{3}{2b^2} \zeta(2) + \frac{1}{b} \left\{ -\ln[3b] + \frac{11}{16} \right\} - \frac{5}{8} \zeta(0) + \mathcal{O}(b) \quad . \quad (2.150)$$

Interessanterweise besteht der Term der Ordnung $1/b$ aus zwei unterschiedlichen Summanden. Beide sind verschiedenen Ursprungs, und zwar entstammt der erste logarithmische Term entstammt einer Kombination der ζ_3 , ζ_2 und ζ_1 -Terme in (2.149), während der zweite rationalzahlige von den ζ_0 -Termen kommt. Würden wir die Störungstheorie in kleinen b eine Ordnung weiter betreiben, als es in (2.148) bzw. (2.149) der Fall war, so ergäbe sich statt (2.150)

$$N = \frac{1}{b^3} \zeta(3) + \frac{3}{2b^2} \zeta(2) + \frac{1}{b} \left\{ -\ln[3b] + \frac{11}{16} + \frac{323}{1728} \right\} - \frac{5}{8} \zeta(0) + \mathcal{O}(b) \quad . \quad (2.151)$$

Vergleicht man nun die beiden Ausdrücke (2.150) und (2.151) miteinander, so stellt man fest, dass Terme aller b -Ordnungen außer dem $1/b$ -Term unverändert geblieben sind. Diese Tendenz setzt sich fort, wenn man der ursprünglichen Störungsentwicklung (2.148) immer weitere Entwicklungsterme hinzufügt. Alle Ordnungen tragen zum $1/b$ -Term bei, wodurch letzterer störungstheoretisch nicht gewonnen werden kann.

Dem oben beschriebenen Umstand kann man nur durch eine Resummation der semiklassischen Entwicklung entgegenwirken. Dafür schreiben wir die Teilchenzahl-Gleichung am kritischen Punkt (2.146) in Anlehnung an (2.148) etwas um. Während diese letzte Gleichung noch einen genäherten Ausdruck darstellt, wollen wir diesmal den Korrekturterm dazu mitschreiben und erhalten

$$N = S_3 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[3 e^{-nb} - 3 e^{-2nb} + e^{-3nb} \right] \left\{ \frac{1}{n^3 b^3} + \frac{3}{2n^2 b^2} + \frac{1}{nb} \right\} \quad (2.152)$$

mit der Abkürzung für den besagten Korrekturterm

$$S_3 \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \left[3 e^{-nb} - 3 e^{-2nb} + e^{-3nb} \right] \left\{ \frac{1}{(1 - e^{-nb})^3} - \frac{1}{n^3 b^3} - \frac{3}{2n^2 b^2} - \frac{1}{nb} \right\} \quad (2.153)$$

Durch diese im Grunde genommen identische Umformung von (2.146) erhalten wir zwei Terme, die nun auf verschiedene Weise bearbeitet werden können. Die Summe in (2.152) kann in Analogie zum Ausdruck (2.148) direkt ausgerechnet werden. Es ergibt sich dabei bis zur Ordnung $\mathcal{O}(b^0)$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[3 e^{-nb} - 3 e^{-2nb} + e^{-3nb} \right] \left\{ \frac{1}{n^3 b^3} + \frac{3}{2n^2 b^2} + \frac{1}{nb} \right\} = \frac{1}{b^3} \zeta(3) + \frac{3}{2b^2} \zeta(2) - \frac{1}{b} \ln[3b] + \mathcal{O}(b^0) \quad . \quad (2.154)$$

Der Ausdruck (2.153) repräsentiert den regularisierten Anteil der Teilchenzahl (2.152). Deren Summanden sind nämlich selbst für kleine Werte von nb nichtdivergent. Aus diesem Grund kann die Summation in (2.153) durch eine Integration ersetzt werden:

$$S_3 = \frac{1}{b} \int_0^\infty dx \left[3 e^{-x} - 3 e^{-2x} + e^{-3x} \right] \left\{ \frac{1}{(1 - e^{-x})^3} - \frac{1}{x^3} - \frac{3}{2x^2} - \frac{1}{x} \right\} + \mathcal{O}(b^0) . \quad (2.155)$$

Dies entspricht der führenden Ordnung der so genannten Euler-Maclaurin Entwicklung [51,55]. Deren Korrekturen können prinzipiell auch ausgerechnet werden, liefern jedoch lediglich Terme höchstens von der Ordnung b^0 , auf die wir uns des Weiteren einschränken. Um Terme noch höherer Ordnung zu erhalten, müssten wir bei der Zerlegung (2.152) noch weitere Entwicklungsterme dazuaddieren und diese beim Korrekturterm (2.153) abziehen. Die Integration in (2.155) kann nun explizit ausgeführt werden. Dazu bemerken wir erstens die Integraldarstellung der Beta-Funktion [51,50]

$$\int_0^\infty dx \frac{e^{-kx}}{(1 - e^{-x})^D} \equiv B(k, 1 - D) = \frac{\Gamma(k) \Gamma(1 - D)}{\Gamma(k + 1 - D)} \quad (2.156)$$

und zweitens die Integraldarstellung der Gamma-Funktion, mit der sich

$$\int_0^\infty dx \frac{e^{-kx}}{x^{D-m}} = k^{D-m-1} \Gamma(m + 1 - D) \quad (2.157)$$

ergibt. Bei diesen beiden Ausdrücken haben wir bewusst die Variable D verwendet anstelle der Zahl 3. Die einzelnen Terme in (2.155) sind nämlich an der Stelle $D = 3$ selbst divergent. Die jeweilige Divergenz kann für $D = 3 + \epsilon$ durch verschwindend kleine ϵ parametrisiert werden. Nach der für den regulären Anteil der Teilchenzahl (2.155) geforderten Subtraktion heben sich jedoch diese Divergenzen gegenseitig auf. Übrig bleibt dabei nur der endliche Ausdruck

$$S_3 = \frac{1}{b} \left(\gamma + \ln 3 - \frac{19}{24} \right) + \mathcal{O}(b^0) , \quad (2.158)$$

wobei $\gamma \approx 0.5772$ die so genannte Euler-Mascheroni-Konstante darstellt [51, Kapitel 2].

Die gerade geschilderte Vorgehensweise bildet übrigens den Grundstock der so genannten dimensional Regularisierung [50,56]. In der Tat geht man dabei in den Berechnungen auftretender Integralen rein formal zu nichtganzzahligen Raumdimensionen D über, um deren Divergenzen explizit zu parametrisieren. Dies ist eine Alternative zu den üblichen Regularisierungsverfahren mit Cut-off-Parametrisierungen, die im Übrigen für Eichtheorien die einzige ist, die alle Symmetrien respektiert.

Nun aber zurück zur Bestimmung der kritischen Temperatur in harmonischen Potentialen. Das dafür notwendige transzendente Resultat (2.158) beinhaltet die gesamte Information über den $1/b$ -Term in allen höheren semiklassischen Ordnungen. Damit können wir die Ergebnisse (2.154) und (2.158) unter (2.152) zusammenfassen und erhalten die Bedingung für den kritischen Punkt

$$N = \frac{1}{b^3} \zeta(3) + \frac{3}{2b^2} \zeta(2) - \frac{1}{b} \left(\ln b + \frac{19}{24} - \gamma \right) + \mathcal{O}(b^0) . \quad (2.159)$$

Um jetzt daraus die Verschiebung der kritischen Temperatur auszurechnen, definieren wir noch deren Verhältnis zum semiklassischen Resultat (2.134):

$$t_c \equiv \frac{T_c}{T_c^{(0)}} = \left(\frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{1}{b} . \quad (2.160)$$

Mit Hilfe dieser Beziehung ist die Gleichung (2.159) als

$$1 = t_c^3 + \frac{1}{N^{1/3}} \frac{3\zeta(2)}{2\zeta^{2/3}(3)} t_c^2 - \frac{1}{N^{2/3}} \frac{1}{\zeta^{1/3}(3)} t_c \left(\ln \left[\frac{\zeta^{1/3}(3)}{t_c N^{1/3}} \right] + \frac{19}{24} - \gamma \right) + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (2.161)$$

darstellbar. Diese Relation lässt sich noch explizit nach der reduzierten kritischen Temperatur t_c auflösen und ergibt bis inklusive der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-2/3})$

$$t_c = 1 - \frac{1}{N^{1/3}} \frac{\zeta(2)}{2\zeta^{2/3}(3)} + \frac{1}{N^{2/3}} \frac{1}{3\zeta^{1/3}(3)} \left(\ln \left[\frac{\zeta^{1/3}(3)}{N^{1/3}} \right] + \frac{3\zeta^2(2)}{4\zeta(3)} + \frac{19}{24} - \gamma \right) + \mathcal{O}(N^{-1}) . \quad (2.162)$$

Das früher störungstheoretisch erhaltene Resultat erster Ordnung (2.135) ist hier mit den ersten beiden Summanden wiedergegeben.

Die semiklassischen Korrekturen höherer Ordnung zur Grundzustand-Besetzung sowie zur Wärmekapazität werden wir in dieser Arbeit nicht mehr ausrechnen. Für weitere Informationen diesbezüglich sei an dieser Stelle auf die Arbeit [57] verwiesen. Stattdessen berechnen wir diese beiden Eigenschaften für endliche Systeme in einer harmonischen Falle exakt. Doch dazu mehr im nächsten Abschnitt.

2.3.3 Exakte Behandlung harmonischer Fallen

In diesem Abschnitt werden wir ein endliches bosonisches System in einer harmonischen Falle exakt untersuchen. Dadurch umgehen wir die Probleme der semiklassischen Entwicklung. Allerdings greifen wir bei dieser Vorgehensweise verstärkt auf numerische Untersuchungen zurück mit der dazugehörigen Unannehmlichkeit, keine analytischen Ausdrücke erhalten zu können. Dennoch lassen sich die hierbei erhaltenen Resultate mit analytischen semiklassischen Ergebnissen aus den früheren Unterabschnitten vergleichen. Wir werden weiterhin feststellen, dass es bei endlichen Systemen in der Tat keine Phasenübergänge gibt, womit z.B. auch keine bestimmte kritische Temperatur existiert. Es kann jedoch eine Größe definiert werden, die im thermodynamischen Limes der kritischen Temperatur entspricht. Diese übernimmt in endlichen Ensembles die Rolle des Kondensations-Punktes und lässt sich mit den Daten aus dem analytisch gewonnenen Resultat (2.162) vergleichen.

In diesem Abschnitt werden wir uns des Weiteren auf den Spezialfall einer isotropen harmonischen Falle beschränken. Das großkanonische Potential (2.121) lässt sich in diesem Fall in der Form

$$\mathcal{F}_{GK} = - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{n\beta\hat{\mu}} \sum_{k_1, k_2, k_3=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega(k_1+k_2+k_3)} \quad (2.163)$$

schreiben. Die n -Summation kann mit der Summation über Energie-Eigenwerte (k_1, k_2, k_3) vertauscht werden. Somit ergibt sich mit der polylogarithmischen Funktion (2.94)

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \sum_{k_1, k_2, k_3=0}^{\infty} \zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}} e^{-\beta\hbar\omega(k_1+k_2+k_3)}) . \quad (2.164)$$

Aufgrund der Beziehung

$$\zeta_1(x) = -\ln(1-x) \quad (2.165)$$

entspricht das der allgemeinen Formel (2.82) für den Spezialfall einer isotropen harmonischen Falle. Die in (2.164) noch auszuführende dreifache Summe hat an sich ein schlechtes Konvergenzverhalten. Diesem Umstand kann man aber in der hier behandelten isotropen Falle entgegenwirken. Dazu bemerken wir nur, dass der Summand selbst nur von der Summe $k \equiv k_1 + k_2 + k_3$ der einzelnen Energiekomponenten abhängt. Für eine beliebige Funktion f , die nur von der Summe einzelner Indizes abhängt, lässt sich allerdings die folgende Beziehung feststellen:

$$\sum_{k_1, k_2, k_3=0}^{\infty} f(k_1 + k_2 + k_3) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) f(k) . \quad (2.166)$$

Damit kann man z.B. das großkanonische Potential (2.164) weiterhin zu

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}} e^{-\beta\hbar\omega k}) \quad (2.167)$$

vereinfachen. Die hierbei auszuwertende einfache Summe konvergiert nun sehr schnell und ermöglicht effiziente numerische Berechnungen. Der Koeffizient $(k^2 + 3k + 2)/2$ wird in der Literatur auch als der Entartungsgrad der Energie bezeichnet [58]. In der Tat zeigt er an, wie viele Energiezustände einem bestimmten k -Wert entsprechen.

Die mittlere Teilchenzahl ergibt sich aus (2.167) nach (2.85) zu

$$N = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \zeta_0(e^{\beta\hat{\mu}} e^{-\beta\hbar\omega k}) . \quad (2.168)$$

Auch diese Gleichung entspricht aufgrund der einfachen Beziehung

$$\zeta_0(x) = \frac{1}{x^{-1} - 1} \quad (2.169)$$

dem Spezialfall der allgemeinen Formel (2.85) für eine isotrope harmonische Falle. Hält man nun die mittlere Teilchenzahl N in einem System fest, so kann die Gleichung (2.168) dahingehend interpretiert werden, dass sie zu einer vorgegebenen Temperatur T (oder β) das reduzierte chemische Potential $\hat{\mu} = \hat{\mu}(\beta)$ liefert. Das Problem der Wurzelsuche kann z.B. mit Hilfe des Newton-Verfahrens numerisch umgesetzt werden. Mit dem so gefundenen Wert des chemischen Potentials lassen sich anschließend viele weitere Systemgrößen bestimmen. Dazu zählt in erster Linie die Teilchenzahl im Grundzustand $N_0 = (e^{-\beta\hat{\mu}} - 1)^{-1}$, welche den Kondensatteilchen-Anteil angibt.

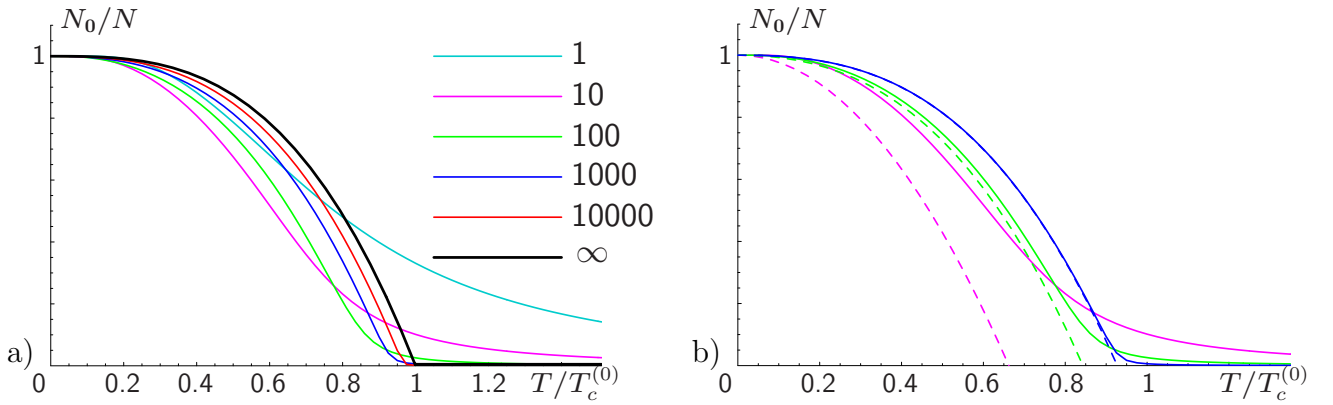


Abbildung 2.4: a) Anteil der Kondensatteilchen nach exakter großkanonischer Rechnung in einer isotropen Falle für $N = 1, 10, 100, 1000$ und 10000 Teilchen im Vergleich zum Resultat im thermodynamischen Limes aus 2.2 a). b) Vergleich der Ergebnisse exakter Rechnung (durchgezogene Kurven) mit der ersten semiklassischen Näherung für $N = 10, 100$ und 1000 aus Abb. 2.2 a) (gestrichelte Kurven).

Dieser Anteil entspricht übrigens dem ($k=0$)-Term in (2.168). Ist nun das chemische Potential für eine bestimmte Temperatur aus (2.168) numerisch bestimmt worden, so kennen wir damit auch die Teilchenzahl im Grundzustand. In Abb. 2.4 sind derartige Grundzustand-Anteile für verschiedene mittlere Teilchenzahlen graphisch dargestellt. Übrigens wurde die oben präsentierte Vorgehensweise bereits in Ref. [59] angewendet, um die Grundzustand-Anteile theoretisch zu berechnen. Die dort ausgerechneten Resultate für $N = 100, 1000$ und 10000 stimmen mit denen aus Abb. 2.4 überein.

Wie man aus der Graphik 2.4 a) erkennt, sind die Kurven für den Grundzustand-Anteil N_0/N in allen endlichen Ensembles glatt. Es ergeben sich für keine Temperaturen verschwindende Werte und es gibt keine wohldefinierte kritische Temperatur, bei der sich das Verhalten der Kurven drastisch ändert. Allerdings sieht man auch, dass diese großkanonischen Resultate mit steigender Teilchenzahl gegen das Ergebnis im thermodynamischen Limes konvergieren. Weiterhin ist in Abb. 2.4 b) der Vergleich zwischen den exakten Ergebnissen mit den Resultaten aus den früheren analytischen Untersuchungen im Unterabschnitt 2.3.1 dargestellt. Die darin gefundenen Finite-Size-Effekte sind hierbei durch gestrichelte Kurven repräsentiert und zeigen deutliche Abweichungen von exakten Ergebnissen, was insbesondere am Beispiel mit $N = 10$ zu sehen ist. Die erste semiklassische Ordnung unterdrückt nämlich den Kondensationsprozess zu stark. Die Situation verbessert sich jedoch dramatisch mit steigender Teilchenzahl. So stimmen die Ergebnisse für 100 Teilchen schon in einem weiten Temperaturbereich gut überein. Für 1000 Teilchen sind schließlich Unterschiede nur in einem kleinen Bereich um die kritische Temperatur auszumachen. Mit der kritischen Temperatur meinen wir natürlich diejenige aus der semiklassischen Näherung. Doch wie ist es mit einem Analogon der kritischen Temperatur für exakte Resultate bestellt? Diese Fragestellung wird im Folgenden erörtert.

Aus Abb. 2.4 a) sieht man, dass sich ein mit der steigenden Teilchenzahl immer ausgeprägter Bereich ausbildet, in dem sich das Verhalten der Kurvenverläufe deutlich ändert, bis es schließ-

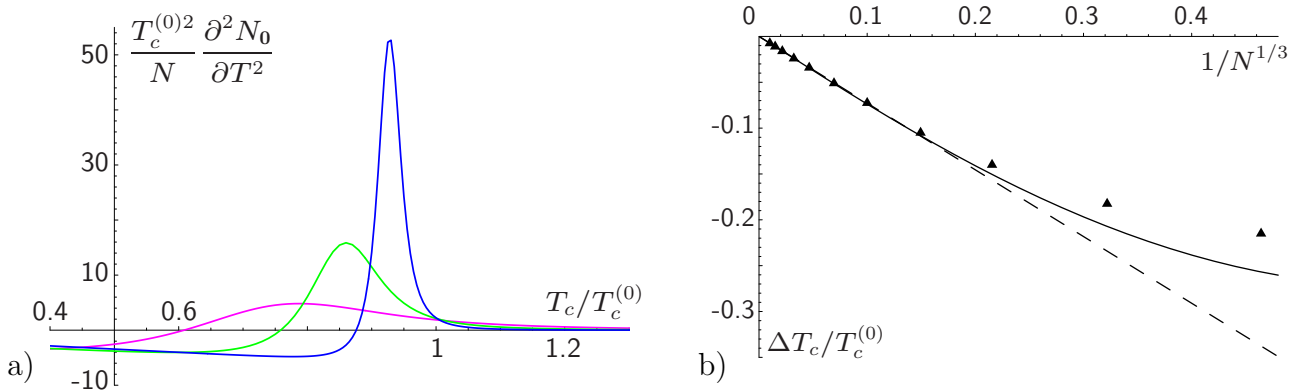


Abbildung 2.5: a) Krümmung der Kurven für die Teilchenzahl im Grundzustand aus Abb. 2.4 a) für $N = 10$ (rosa), 100 (grün) und 1000 (blau) Teilchen. b) Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem thermodynamischen Limes $\Delta T_c/T_c^{(0)} = t_c - 1$. Die gestrichelte Gerade ist das Resultat der ersten semiklassischen Näherung (2.135), die durchgezogene Kurve ist das Ergebnis (2.162) bis zur zweiten Ordnung. Dreiecke zeigen die Lagen der quasikritischen Punkte aus exakten großkanonischen Rechnungen für $N = 10, 30, \dots, 300.000$ und $1.000.000$ Teilchen an (von rechts nach links gegen $1/N^{1/3}$ geplottet). Diese werden aus den Maximallagen für die Krümmungen aus a) bestimmt.

lich im thermodynamischen Limes zu einem Knick bei der kritischen Temperatur kommt. Die Krümmung einer Kurve an der Knickstelle ist unendlich und das gibt den Anlass dazu, sich näher mit den Krümmungen der abgebildeten Kurven zu befassen. Es gibt nämlich im vorliegenden Fall immer eine bestimmte Temperatur, wo die jeweiligen Kurvenverläufe eine maximale Krümmung aufweisen. Diese Temperatur interpretieren wir als das Analogon der kritischen Temperatur in einem endlichen System und nennen sie quasikritische Temperatur. Das Temperatur-Verhalten der Krümmungen für einige der in Abb. 2.4 a) dargestellten Kurven soll noch anhand von Abb. 2.5 a) verdeutlicht werden. Wie man hieraus unschwer erkennt, zeigen solche Krümmungen eine Peakstruktur, die mit steigender Teilchenzahl immer ausgeprägter erscheint. Die Bereiche, über die sich solche Strukturen erstrecken, werden immer enger und die Lagen der quasikritischen Temperatur definierter. Es besteht jedoch ein gewisser Restzweifel an dem hier gewählten Kriterium für die Quasikritikalität. Es sind nämlich auch andere Möglichkeiten denkbar. So können z.B. Wendepunkte der N_0/N -Kurven in Betracht gezogen werden. Diese würden Temperaturbereiche mit konkavem Verhalten von den konvexen Bereichen trennen. In der Regel liegen solche Punkte bei etwas tieferen Temperaturen, als die Punkte maximaler Krümmung. Im thermodynamischen Limes unterhalb der kritischen Temperatur ist die Kurve jedoch immer konkav, und der kritische Wert markiert in der Tat das Ende eines solchen Bereichs. Dort würden somit beide quasikritischen Temperaturen mit dem eigentlichen kritischen Wert zusammenfallen. Denkbar ist auch ein Kriterium, das auf Beobachtungen der Wärmekapazität basiert. Letztere hat nämlich am kritischen Punkt ihr Maximum (siehe Abb. 2.2). Wir werden jedoch später noch zeigen, dass nach quantenmechanisch exakten Rechnungen die Kurven der Wärmekapazität ebenfalls glatt sind, wodurch auch dieses Kriterium keineswegs scharf ist.

Im Folgenden werden wir uns auf die oben angegebene Definition der quasikritischen Punkte mit Hilfe der maximalen Krümmung der N_0/N -Kurven beschränken. In Abb. 2.5 b) sind diese quasikritischen Werte durch Dreiecke gekennzeichnet. Dort sind sie in Abhängigkeit von der Teilchenzahl in der Form $1/N^{1/3}$ dargestellt, wodurch auch direkte Vergleiche zu unseren früheren analytischen Resultaten zur kritischen Temperatur ermöglicht werden. So ergibt sich für die Verschiebung der kritischen Temperatur in der ersten semiklassischen Näherung aus (2.135) ein in $1/N^{1/3}$ linearer Zusammenhang, der durch die gestrichelte Kurve dargestellt wird. Das Resultat der semiklassischen Rechnung bis inklusiv zweiten Ordnung (2.162) ist mit der durchgezogenen Linie angegeben. Für Teilchenzahlen $N > 1000$ stimmen beide semiklassischen Resultate gut überein und sind auch im Vergleich zu exakten quasikritischen Temperaturen akkurat. Für kleinere Teilchenzahlen zeigt jedoch das semiklassische Resultat erster Ordnung große Abweichungen von den Ergebnissen exakter Rechnungen. Die Approximation zweiter Ordnung weicht von ihnen ebenfalls stark ab, zeigt dennoch die korrekte Tendenz. Der Ursprung für derartige Abweichungen liegt zum einen in der Natur semiklassischer Näherungen, welche nun tatsächlich von großen Systemen ausgehen. Zum anderen ist das die intrinsische Unbestimmtheit des Begriffes der kritischen Temperatur und die damit verbundene Freiheit der Wahl einer quasikritischen Temperatur. Im übrigen ist dieses Problem auch durch die Wahl eines anderen Kriteriums für die Quasi-Kritikalität nicht in den Griff zu bekommen. Nebenbei bemerkt, funktionieren für genügend große Ensembles alle gängigen Kriterien gleich gut.

Nun wenden wir uns der Wärmekapazität zu, die auch diesmal nach der allgemein gültigen Beziehung (2.97) bestimmt wird. Nach Einsetzen des großkanonischen Potentials aus (2.164) und der mittleren Teilchenzahl aus (2.168) ergibt sich nach einer längeren Rechnung der folgende Ausdruck:

$$C_V = k_B (\beta \hbar \omega)^2 \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{k^4}{2} + \frac{3k^3}{2} + k^2 \right) \zeta_{-1}(e^{\beta \hat{\mu}} e^{-\beta \hbar \omega k}) - \left[\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{k^3}{2} + \frac{3k^2}{2} + k \right) \zeta_{-1}(e^{\beta \hat{\mu}} e^{-\beta \hbar \omega k}) \right]^2 / \left[\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \zeta_{-1}(e^{\beta \hat{\mu}} e^{-\beta \hbar \omega k}) \right] \right\}. \quad (2.170)$$

Dieser gilt im gesamten Temperaturbereich und braucht nicht wie im Unterabschnitt 2.3.1 in zwei getrennten Bereichen untersucht zu werden. Die weitere Auswertung dieser Gleichung geht analog zur Bestimmung des Grundzustand-Anteils N_0 zuvor. Man bestimme also zuerst aus der Relation (2.168) für eine fest vorgegebene Teilchenzahl N und Temperatur das passende chemische Potential $\hat{\mu} = \hat{\mu}(\beta)$. Mit diesem berechne man die drei in (2.170) erforderlichen Summen. Anschließend setze man sie mit dem bereits vorgegebenen Temperaturwert wiederum in (2.170) zusammen. Die auf diese Weise gewonnenen Resultate sind in Abb. 2.6 in Abhängigkeit der reduzierten Temperatur $T/T_c^{(0)}$ dargestellt, wobei $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur (2.134) im thermodynamischen Limes ist.

Aus Abb. 2.6 a) erkennen wir, dass die Kurven der Wärmekapazität für alle endliche Teilchenzahlen glatt sind und weder Sprünge noch Knickstellen aufweisen. Die Lagen der Maxima sind hier für kleinere Ensembles zu niedrigeren Temperaturen verschoben. Auch das entspricht dem Finite-Size-Effekt, den wir bei der Grundzustand-Besetzung N_0/N und bei der semiklassischen

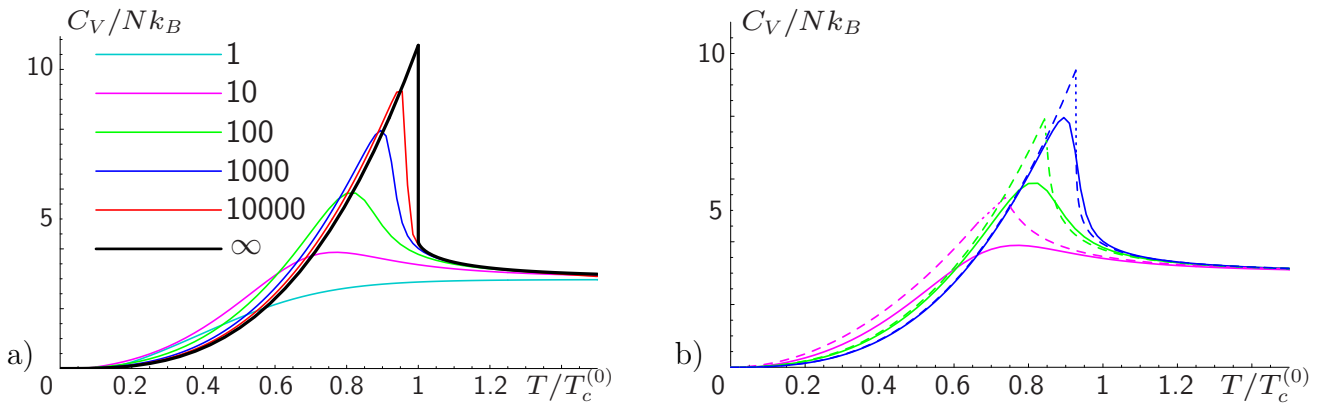


Abbildung 2.6: Wärmekapazität pro Teilchen in einer isotropen Falle a) für $N = 1, 10, 100, 1000$ und 10000 Teilchen nach der exakten großkanonischen Rechnung im Vergleich zum thermodynamischen Limes aus Abb. 2.3. b) Vergleich der Wärmekapazität aus exakter Rechnung (durchgezogene Kurven) mit der ersten semiklassischen Näherung (gestrichelte Kurven) aus Abb. 2.3 für $10, 100$ und 1000 Teilchen.

Untersuchung der Wärmekapazität festgestellt haben. Um letztere mit den entsprechenden Resultaten aus exakter Rechnung vergleichen zu können, sind diese in Abb. 2.6 b) zusammengestellt. Für $N = 10$ Teilchen ist die Diskrepanz zwischen dem semiklassischen und dem exakten Resultat über einen weiten Temperaturbereich sichtbar. Obwohl sich die Resultate bei einer Teilchenzahlerhöhung deutlich annähern, ist das Verhalten der Kurven im Bereich der kritischen Temperatur doch offensichtlich verschieden. Für sehr große Teilchenzahlen ergibt die semiklassische Näherung erster Ordnung durchaus vernünftige Resultate, außer vielleicht am kritischen Punkt selbst.

2.4 Bose-Gase im Kastenpotential

In diesem Abschnitt behandeln wir das ideale Bose-Gas, das in einem kubischen Kasten eingefangen ist, d.h. in einem Potential der Form

$$V(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & , \quad |x_j| \leq L/2 \quad \text{für alle Richtungen } j = 1, 2, 3, \\ \infty & , \quad |x_j| \geq L/2 \quad \text{für wenigstens ein } j = 1, 2, 3, \end{cases} \quad (2.171)$$

wobei L die Kantenlänge bedeutet. Im Prinzip kann ein solches Potential in Form eines hart-schaligen Behälters problemlos realisiert werden. In der Praxis ist dieser einfache Vorschlag für Bose-Gase unpraktikabel, weil es für sie existentiell ist, von der meist zu warmen umgebenden Materie thermisch so weit entkoppelt zu sein wie nur möglich. Das kann natürlich auch ein tief gekühlter Becher nicht leisten. Daher wird das kondensationsaktive Gas in magnetischen oder optischen Fallen eingefangen. Eine weitestgehend anharmonische Falle kann in der Tat zukünftig mit Hilfe bestimmter Laserdips erzeugt werden. Wie steil die realisierbaren Potentialflanken und wie kastenförmig die Potentiale dabei sein können, bleibt noch abzuwarten.

Aus theoretischer Sicht ist das Kastenpotential (2.171) jedoch auch an sich interessant. Wie wir

noch zeigen werden, stellt das homogene Problem aus dem Abschnitt 2.2 bzw. 2.2.2 einen Grenzwert eines unendlich großen Kastens dar. Ähnlich wie in einer harmonischen Falle, gibt es auch hier nichttriviale Effekte, die in einem endlichen Kasten eine Rolle spielen. Diese Effekte unterscheiden sich sogar in bestimmten Aspekten von denjenigen in harmonischen Fallen. Abgesehen von dem deutlichen Unterschied im thermodynamischen Limes selbst, werden wir hier feststellen, dass die Finite-Size-Effekte im Kasten zur Erhöhung der kritischen Temperatur führen statt zu ihrer Erniedrigung, wie wir es von dem letzten Abschnitt 2.3 kennen. Auch die Behandlung endlicher Systeme mit Hilfe semiklassischer Näherungen unterscheidet sich grundsätzlich von den vorherigen Untersuchungen in harmonischen Fallen.

Als Ausgangspunkt für theoretische Untersuchungen dieses Abschnitts dient uns die explizite Lösung der Schrödingergleichung (2.35). Diese wird für das Potential (2.171) mit den damit verbundenen Dirichletschen Randbedingungen durch die Wellenfunktion

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} (2L)^{-3/2} \prod_{j=1}^3 \left[e^{i k_j x_j} - (-1)^{k_j L/\pi} e^{-i k_j x_j} \right], & |x_j| \leq L/2 \text{ für alle } j=1, 2, 3, \\ 0, & |x_j| \geq L/2 \text{ für ein } j=1, 2, 3 \end{cases} \quad (2.172)$$

gelöst. Die dazugehörigen Energie-Eigenwerte lauten

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{k}^2. \quad (2.173)$$

Die Wellenvektoren $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ nehmen im Gegensatz zum homogenen Fall mit Eigenwerten (2.90) hierbei diskrete Werte an, die durch

$$k_j = \frac{\pi}{L} m_j \quad \text{mit} \quad m_j = 1, 2, \dots \quad (2.174)$$

für alle $j = 1, 2, 3$ beschrieben werden. Interessanterweise sind die Werte $m_j = 0$ für alle j ausgeschlossen, da sonst die Wellenfunktion (2.172) ohnehin verschwinden würde. Daher ist der Wellenvektor des Grundzustandes $\mathbf{k}_G = \pi(1, 1, 1)/L$ und der dazugehörige Energie-Eigenwert

$$E_G = \frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{k}_G^2 = \frac{3}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{ML^2}. \quad (2.175)$$

Das großkanonische Potential (2.81) für das ideale Bose-Gas im Kastenpotential (2.171) lässt sich damit als

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta \hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta \hat{\mu}}}{n} \left\{ \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} (m^2 - 1)} \right)^3 - 1 \right\}. \quad (2.176)$$

schreiben, wobei wir hierfür noch das reduzierte chemische Potential

$$\hat{\mu} \equiv \mu - E_G \quad (2.177)$$

verwendet haben. Des Weiteren werden wir in diesem Abschnitt zugunsten größerer Übersichtlichkeit noch eine Abkürzung für die dimensionslose Temperatur

$$\tau \equiv \frac{ML^2}{2\pi \hbar^2 \beta} = \frac{L^2}{\lambda^2} \quad (2.178)$$

verwenden, wobei wir uns für die letzte Gleichung noch an die thermische de Broglie-Wellenlänge (2.93) erinnern. Das großkanonische Potential (2.176) lässt sich damit schreiben als

$$\mathcal{F}_{GK} = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \left\{ \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right)^3 - 1 \right\}. \quad (2.179)$$

Die mittlere Teilchenzahl (2.85) ergibt sich daraus zu

$$N = N_G + \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right)^3 - 1 \right\} \quad (2.180)$$

mit dem Grundzustandsanteil

$$N_G = \frac{1}{e^{-\beta\hat{\mu}} - 1}, \quad (2.181)$$

welcher formal dem N_0 -Beitrag aus (2.125) ähnelt. Im nächsten Unterabschnitt diskutieren wir die semiklassischen Näherungsansätze zu dem hier dargestellten Problem und im darauffolgenden Unterabschnitt die exakten numerischen Berechnungen dazu.

2.4.1 Semiklassische Näherungen

Die semiklassische Näherung basiert, ähnlich wie in der harmonischen Falle, auch im einem Kastenpotential auf der Annahme, dass der Unterschied zwischen zwei benachbarten Quantenniveaus klein gegenüber der thermischen Energie $k_B T$ ist. Das bedeutet also mit dem Energiespektrum aus (2.173)

$$\beta\pi^2\hbar^2/(ML^2) \ll 1. \quad (2.182)$$

Diese Näherung ist gut erfüllt bei nicht zu niedrigen Temperaturen wegen der Kleinheit der Planckschen Konstante für Kästen mit genügend großen Kantenlängen L . Letzteres bedeutet bei festgehaltenen Teilchendichten $n = N/L^3$ gleichzeitig große Teilchenzahlen N . Diese semiklassische Bedingung lässt sich für den dimensionslosen Temperaturparameter (2.178) noch als $\tau \gg 1$ schreiben.

Mit Hilfe der semiklassischen Näherung sind wir in der Lage, die Ausdrücke (2.176) und (2.180) wenigstens in der niedrigsten Ordnung auszuwerten. Die darin vorkommenden m -Summen lassen sich z.B. in der niedrigsten Ordnung durch Integrale approximieren. Wir wählen jedoch eine alternative Berechnungsmethode mit Hilfe der Poissonschen Summenformel (2.69) oder deren Originalversion (A.7) aus dem Anhang A, womit sich auch semiklassische Korrekturen höherer Ordnung ausrechnen lassen. Dazu bemerken wir aber zuerst, dass aus Symmetriegründen die Umformung

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi m^2/4\tau} = \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-n\pi m^2/4\tau} - \frac{1}{2} \quad (2.183)$$

gilt. Die Poissonsche Formel (A.7) liefert dann unmittelbar die folgende duale Form

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} = e^{n\pi/4\tau} \left\{ \sqrt{\frac{\tau}{n}} - \frac{1}{2} + 2 \sqrt{\frac{\tau}{n}} \sum_{q=1}^{\infty} e^{-4\tau\pi q^2/n} \right\}. \quad (2.184)$$

Interessant ist an dieser Stelle zu bemerken, dass aufgrund dieser Beziehung eine für kleine Parameter τ schnell konvergierende Reihe auf der linken Seite in eine für große τ schnell konvergierende Reihe auf der rechten Seite umgewandelt wird (siehe dazu mehr im nächsten Abschnitt 2.4.2). Aufgrund dessen bezeichnen wir diese Gleichung auch als die Dualitätstransformation.

Unser Interesse gilt nun ferner dem semiklassischen Limes mit entsprechend großem Parameter τ . Dafür können wir alle Summanden der Gestalt $e^{-4\tau\pi q^2/n}$ gegenüber den reinen τ -Potenzen vernachlässigen und die Exponente $e^{n\pi/4\tau}$ im Vorfaktor von (2.184) entwickeln. Es ergibt sich nun

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} = \sqrt{\frac{\tau}{n}} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{n}{\tau}\right)^{1/2} + \frac{\pi n}{4\tau} + \mathcal{O}(\tau^{-3/2}) \right\}. \quad (2.185)$$

Daraus leiten wir die Gleichung für die mittlere Teilchenzahl (2.180) in semiklassischer Näherung, die wir noch mit den polylogarithmischen Funktionen (2.94) als

$$N = N_G + \tau^{3/2} \zeta_{3/2}(e^{\beta\hat{\mu}}) - \frac{3}{2} \tau \zeta_1(e^{\beta\hat{\mu}}) + \frac{3(\pi+1)}{4} \tau^{1/2} \zeta_{1/2}(e^{\beta\hat{\mu}}) + \mathcal{O}(\tau^0) \quad (2.186)$$

schreiben können.

Betrachten wir zuerst diesen Ausdruck in der führenden semiklassischen Ordnung. Für das reduzierte chemische Potential (2.177) finden wir mit (2.175) noch die Abschätzung $\hat{\mu} = \mu + \mathcal{O}(\tau^{-1})$. Nun lautet die mittlere Teilchenzahl

$$N = N_G + \tau^{3/2} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) . \quad (2.187)$$

Erinnern wir uns noch an die Definition der dimensionslosen Temperatur τ aus (2.178) und identifizieren das Volumen $L^3 = V$ und den Grundzustand-Beitrag $N_G = N_0$, so finden wir sofort das Resultat vom homogenen Bose-Gas (2.107). Analog ergibt sich für das großkanonische Potential (2.176) in der führenden semiklassischen Ordnung das Resultat (2.112). Das bestätigt nun die Aussage, dass das homogene Bose-Gas aus dem Abschnitt 2.2.2 den thermodynamischen Limes eines Bose-Gases im Kastenpotential darstellt. In diesem Limes gilt nämlich die semiklassische Näherung (2.182) exakt. Seine thermodynamische Eigenschaften kennen wir also bereits.

Um zu sehen, welche Abweichungen in einem endlichen Kasten gegenüber dem homogenen System entstehen, müssten wir die semiklassischen Korrekturen dazu ausrechnen. Das Problem stellt sich jedoch bereits in der niedrigsten Korrekturordnung als nichttrivial heraus. Das zeigen wir im Folgenden anhand der Grundzustand-Besetzung unterhalb der kritischen Temperatur. Dafür nehmen wir wie in den Abschnitten zuvor an, dass das reduzierte chemische Potential entsprechend der Beziehung $-\beta\hat{\mu} \sim N_G^{-1} \sim N^{-1}$ klein ist. Damit schreiben wir die mittlere Teilchenzahl (2.186) nur bis einschließlich der Ordnung $\mathcal{O}(\tau)$ aus und verwenden für die darin vorkommenden polylogarithmischen Funktionen die Zerlegung nach der Robinson-Formel (2.101)

$$N = N_G + \tau^{3/2} \zeta(3/2) + \frac{3}{2} \tau \ln[-\beta\hat{\mu}] + \mathcal{O}([-\tau/\beta\hat{\mu}]^{1/2}) . \quad (2.188)$$

Diese Gleichung ist nicht direkt analytisch zugänglich, kann aber für niedrige Temperaturen näherungsweise ausgewertet werden. Dazu vergewissern wir uns, dass aufgrund der Beziehung (2.178) noch

$$\tau = \frac{N^{2/3}}{\zeta^{2/3}(3/2)} \frac{T}{T_c^{(0)}} \equiv \frac{N^{2/3}}{\zeta^{2/3}(3/2)} t \quad (2.189)$$

gilt, wobei $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur (2.104) im thermodynamischen Limes darstellt und t als die reduzierte Temperatur bezeichnet wird. Nach Identität (2.181) können wir die Gleichung $-\beta\mu = \ln[1 + 1/N_G]$ feststellen und erhalten damit für genug große Gesamtteilchenzahlen N die Tieftemperaturentwicklung

$$\frac{N_G}{N} = 1 + \frac{3 \ln N}{2N^{1/3}\zeta^{2/3}(3/2)} \frac{T}{T_c^{(0)}} + \mathcal{O}([T/T_c^{(0)}]^2) . \quad (2.190)$$

Wie man hieraus unschwer erkennt, übersteigt der Grundzustand-Anteil für niedrige Temperaturen den Wert eins. Das ist offensichtlich physikalisch nicht haltbar und stellt, wie wir gleich sehen werden, nur einen Artefakt der semiklassischen Näherung dar. Würde man nämlich in der Gleichung (2.186) nicht auf die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\tau^{1/2})$ verzichten wie es in (2.188) geschah, so ergäbe sich der Ausdruck

$$N = N_G + \tau^{3/2} \zeta(3/2) + \frac{3}{2} \tau \ln[-\beta\hat{\mu}] + \frac{3(\pi+1)}{4} \tau^{1/2} \sqrt{\pi} (-\beta\hat{\mu})^{-1/2} + \mathcal{O}([-\beta\hat{\mu}]^{-1}) . \quad (2.191)$$

Vergleichen wir nun die Größenordnungen einzelner Terme miteinander, so stellen wir fest, dass der neu dazugekommene Term aufgrund der Abschätzungen $\tau \sim N^{2/3}$ und $-\beta\hat{\mu} \sim 1/N$ wie $N^{5/6}$ anwächst, wogegen der vorletzte Term lediglich mit $N^{2/3} \ln N$ skalierte. Diese Tendenz setzt sich auch weiterhin fort, und das bedeutet, jeder Term der höheren semiklassischen Ordnung liefert einen größeren Beitrag zur Gesamtteilchenzahl. Diese störungstheoretische Vorgehensweise bricht also bereits ab der ersten semiklassischen Korrektur zusammen.

Trotz der gerade geschilderten Probleme der naiven semiklassischen Entwicklung, lassen sich in einer etwas abgewandelten Form physikalisch sinnvollen Ergebnisse erzielen. Das werden wir im Folgenden anhand der Berechnung der kritischen Temperatur zeigen. Die dabei verwendete Vorgehensweise basiert auf dem Ansatz aus [51], den wir bereits im Abschnitt 2.3.2 im Bezug auf das Bose-Gas in harmonischen Fallen diskutierten. Für das Kastenpotential wurde diese Methode in der Publikation [42] verwendet. Als Ausgangspunkt dient uns nach wie vor die Gleichung für die mittlere Teilchenzahl (2.180). Die darin vorkommende Summe über alle Energiemoden schreiben wir in der Form

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} = 1 + e^{-3n\pi/4\tau} \sigma(\tau/n) , \quad (2.192)$$

wobei wir noch die Abkürzung für den Anteil thermisch angeregter Teilchen

$$\sigma(\tau/n) \equiv \sum_{m=2}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-4)/4\tau} \quad (2.193)$$

verwenden. Die letztere Reihendarstellung lässt sich noch mit Hilfe der Poissonschen Summenformel (A.7) auswerten und ergibt analog zur Gleichung (2.185) den folgenden Ausdruck:

$$\sigma(\tau/n) = \sqrt{\frac{\tau}{n}} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left(\frac{n}{\tau}\right)^{1/2} + \frac{\pi n}{\tau} + \mathcal{O}(\tau^{-3/2}) \right\}. \quad (2.194)$$

Mit dessen Hilfe lässt sich die Teilchenzahl-Gleichung (2.180) aufgrund der Zerlegung (2.192) als

$$N = N_G + \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ 3 e^{-3n\pi/4\tau} \sigma(n/\tau) + 3 e^{-6n\pi/4\tau} \sigma^2(n/\tau) + e^{-9n\pi/4\tau} \sigma^3(n/\tau) \right\} \quad (2.195)$$

ausschreiben. Diese Gleichung ist exakt und weist somit noch keine Probleme der semiklassischen Entwicklung auf. Um die Frage nach der kritischen Temperatur $T = T_c$ bzw. $\tau = \tau_c$ anzugehen, verwenden wir die von früher bekannten Näherungen, nämlich $N_G/N \approx 0$ und gleichzeitig $\beta\hat{\mu} \approx 0$. Damit geht die obige Identität in eine Bestimmungsgleichung für die kritischen Temperaturen über:

$$N = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ 3 e^{-3n\pi/4\tau_c} \sigma(n/\tau_c) + 3 e^{-6n\pi/4\tau_c} \sigma^2(n/\tau_c) + e^{-9n\pi/4\tau_c} \sigma^3(n/\tau_c) \right\}. \quad (2.196)$$

Verwenden wir nun zu deren weiteren Auswertung die Näherung (2.194), ohne die Exponentialfunktionen zu entwickeln. Dadurch ergeben sich nach n -Summationen reguläre Ausdrücke, während die semiklassische Entwicklung nicht komplett vollzogen ist. Dieser Umstand unterscheidet die nachfolgenden Berechnungen von der naiven Vorgehensweise, die zum divergenten Ergebnis (2.191) führte. Des Weiteren erhalten wir hier mit Hilfe der polylogarithmischen Funktionen (2.94) die folgende Näherung zur Bestimmungsgleichung (2.196):

$$N = \tau_c^{3/2} \zeta_{3/2}(e^{-9\pi/4\tau_c}) + \frac{3\tau_c}{2} \left[2 \zeta_1(e^{-6\pi/4\tau_c}) - 3 \zeta_1(e^{-9\pi/4\tau_c}) \right] \quad (2.197)$$

$$+ \frac{3\tau_c^{1/2}}{4} \left[4 \zeta_{1/2}(e^{-3\pi/4\tau_c}) - 12 \zeta_{1/2}(e^{-6\pi/4\tau_c}) + (4\pi + 9) \zeta_{1/2}(e^{-9\pi/4\tau_c}) \right] + \mathcal{O}(\tau_c^0).$$

Die darin vorkommenden Exponenten sind für große τ_c klein und die polylogarithmischen Funktionen nach der Robinsinschen Formel (2.101) entwickelbar. So erhalten wir aus (2.197)

$$N = \zeta(3/2) \tau_c^{3/2} + \frac{3\tau_c}{2} \left\{ \ln \left[\frac{81\pi}{16\tau_c} \right] - 2\pi + \frac{4\sqrt{3} - 6\sqrt{6} + 4\pi + 9}{3} \right\} + \frac{3(\pi+1)}{4} \zeta(1/2) \tau_c^{1/2} + \mathcal{O}(\tau_c^0). \quad (2.198)$$

Um es jedoch vorwegzunehmen, ist diese unmittelbare Entwicklung wie auch schon im harmonischen Fall zuvor (siehe Abschnitt 2.3.2, Gleichung (2.150)) nicht viel Wert. Denn würden wir in der Gleichung (2.197) die τ_c^0 -Terme ausschreiben und danach entwickeln, so ergäbe sich im Gegensatz zur obigen Näherung (2.198) der folgende Ausdruck:

$$N = \zeta(3/2) \tau_c^{3/2} + \frac{3\tau_c}{2} \left\{ \ln \left[\frac{81\pi}{16\tau_c} \right] - 2\pi + \frac{4\sqrt{3} - 6\sqrt{6} + 4\pi + 9}{3} - \frac{10\pi + 18}{9\pi} \right\}$$

$$+ \frac{3(\pi+1)}{4} \zeta(1/2) \tau_c^{1/2} + \mathcal{O}(\tau_c^0). \quad (2.199)$$

Wie man aus dem Vergleich zwischen (2.198) und (2.199) sieht, stimmen sie im führenden genauso wie im letzten Term überein, der lineare τ_c -Term hat sich jedoch geändert. Da dieses Verhalten auch für höhere Entwicklungen der Gestalt (2.197) eigen ist, schließen wir daraus, dass sich im Kastenpotential bereits die führende semiklassische Korrektur zum thermodynamischen Limes der störungstheoretischen Behandlung entzieht. Diese muss also in einem Resummations-Verfahren bestimmt werden. Erinnern wir uns an dieser Stelle, dass wir in einer harmonischen Falle im Abschnitt 2.3.2 ein ähnliches Verhalten gefunden haben, allerdings erst in der Korrektur zweiter semiklassischer Ordnung. Ein weiterer Unterschied zwischen dem Kasten-Potential und der harmonischen Falle besteht in der Vorgehensweise bei der Resummation. Während wir im harmonischen Fall in der Lage waren, durch das Abziehen gewisser Terme den übriggebliebenen regulären Anteil (2.155) analytisch zu behandeln, gelingt uns Ähnliches diesmal nicht. Eine numerische Untersuchung führt jedoch ohne zu einer Lösung, die nun in der Form

$$N = \zeta(3/2) \tau_c^{3/2} + \frac{3 \tau_c}{2} \ln \left[C_3 \frac{\pi}{2\tau_c} \right] + \frac{3(\pi+1)}{4} \zeta(1/2) \tau_c^{1/2} + \mathcal{O}(\tau_c^0) \quad (2.200)$$

mit dem numerischen Wert für den nicht störungstheoretischen Koeffizient $C_3 = 0.9574$ angegeben werden kann. Derselbe Wert im Rahmen der angegebenen Genauigkeit wurde kürzlich mit einer semi-analytischen Methode im Kleinerts Lehrbuch [51] erhalten.

Nun betrachten wir (2.200) als die Bestimmungsgleichung für die kritische Temperatur T_c . Um dies explizit zu sehen, erinnern wir uns noch an die Relation (2.189) und schreiben (2.200) in der Form

$$1 = t_c^{3/2} + \frac{t_c}{N^{1/3}} \frac{3}{2 \zeta^{2/3}(3/2)} \ln \left[\frac{\pi \zeta^{2/3}(3/2)}{2 N^{2/3}} \frac{C_3}{t_c} \right] + \frac{t_c^{1/2}}{N^{2/3}} \frac{3(\pi+1) \zeta(1/2)}{4 \zeta^{1/3}(3/2)} + \mathcal{O}(N^{-1}) \quad (2.201)$$

um. Damit ergibt sich weiterhin die explizite Gleichung für die reduzierte kritische Temperatur

$$t_c = 1 - \frac{1}{N^{1/3} \zeta^{2/3}(3/2)} \ln \left[\frac{\pi \zeta^{2/3}(3/2)}{2 N^{2/3}} C_3 \right] + \frac{1}{N^{2/3} \zeta^{4/3}(3/2)} \left\{ \frac{3}{4} \ln^2 \left[\frac{\pi \zeta^{2/3}(3/2)}{2 N^{2/3}} C_3 \right] - \ln \left[\frac{\pi \zeta^{2/3}(3/2)}{2 N^{2/3}} C_3 \right] - \frac{\pi+1}{2} \zeta(1/2) \zeta(3/2) \right\} + \mathcal{O}(N^{-1}). \quad (2.202)$$

Für große Teilchenzahlen sind die logarithmischen Terme negativ und führen zu einer Erhöhung der kritischen Temperatur. Diese ist in Abb. 2.7 graphisch in Abhängigkeit des Kleinheitsparameters $N^{-1/3}$ dargestellt. Dabei bedeuten die Werte am linken Bildrand große Teilchenzahlen und die am rechten Bildrand entsprechend niedrige Teilchenzahlen bis etwa $N = 100$. Das komplette Resultat (2.202) ist mit der durchgezogenen Linie abgebildet, während das Ergebnis der niedrigsten Ordnung $N^{-1/3}$ durch die lang gestrichelte Linie dargestellt ist. Die numerische Lösung der Gleichung (2.201) nach der reduzierten kritischen Temperatur führt dagegen zu einem Ergebnis, das durch die kurz gestrichelte Kurve dargestellt ist. Der Unterschied zwischen dieser und der durchgezogenen Kurve liegt lediglich in der Art der Auswertung von (2.201), da beide Resultate der semiklassischen Näherung zweiter Ordnung sind. Die Gleichung (2.202) stellt nur eine konsequente störungstheoretische Entwicklung von (2.201) bis einschließlich zweiter Ordnung

dar. Der Unterschied kann demnach nur in den höheren Entwicklungskoeffizienten liegen. Wie die ersten Erfahrungen zeigten, unterscheiden sich numerische Resultate durch Hinzunahme einer weiteren Ordnung eher wenig von der kurz gestrichelten Kurve, während das zu (2.202) analoge störungstheoretisch ausgewertete Ergebnis etwas stärker von der durchgezogenen Kurve nach oben abweicht und sich dem numerischen Resultat nähert. In der harmonischen Falle stimmen dagegen Resultate aus der numerischen Lösung von (2.161) mit deren störungstheoretischen Auswertung in (2.162) bereits in der zweiten Ordnung im weiten Temperaturbereich gut überein. Ein noch größerer Unterschied zwischen den bosonischen Systemen in der harmonischen Falle und im Kastenpotential betrifft Veränderungen der kritischen Temperatur selbst. Nicht nur, dass diese im Kastenpotential etwa drei bis vier mal so stark ausfallen wie in der Falle, sondern auch die Vorzeichen der Effekte sind verschieden. Der Finite-Size-Effekt im Kastenpotential führt in der Tat zu einer Vergrößerung der kritischen Temperatur. Das zeugt hier von einer Erhöhung der Stabilität gegenüber den thermischen Fluktuationen in kleineren Ensembles.

Diese Besonderheit des Finite-Size-Effektes im Kastenpotential wurde zuerst in Ref. [60] bemerkt. Darin untersuchten die Autoren unter anderem den Effekt eines nichtverschwindenden Werts der Grundzustands-Energie (2.175) auf die kritische Temperatur. In ihrer Berechnungen ersetzten sie die dreifache Summe über alle Energiemoden (m_1, m_2, m_3) in der Teilchenzahl-Gleichung (2.180) durch ein dreidimensionales Impuls-Integral, beachteten dabei allerdings das Fehlen der $(m_j = 0)$ -Moden. Bei der technischen Umsetzung wurden hierbei alle Zustände explizit entfernt, die auf den jeweiligen Koordinatenebenen im Impulsraum lagen und somit wenigstens eine verschwindende Impuls-Komponente besaßen. Ihre Auswertung der Verschiebung der kritischen Temperatur in der niedrigsten semiklassischen Ordnung lieferte das Ergebnis

$$t_c = 1 - \frac{1}{N^{1/3} \zeta^{2/3}(3/2)} \ln \left[\frac{3\pi \zeta^{2/3}(3/2)}{4 N^{2/3}} \right]. \quad (2.203)$$

Der entsprechende Kurvenverlauf ist in Abb. 2.7 durch die gestrichpunktete Kurve dargestellt. Wie man daraus unschwer erkennt, weicht dieses Ergebnis von der niedrigsten Ordnung aus (2.202) selbst für große Teilchenzahlen (linkes Bildrand) etwas ab. Trotz der formalen Ähnlichkeit von (2.203) mit der Gleichung (2.202) in deren niedrigsten Ordnung finden wir durch den direkten Vergleich, dass hierbei der Wert von $C_3 = 0.9574$ durch $3/2$ zu ersetzen wäre. Das ist durchaus bezeichnend, denn der wahre Wert dieser Größe ist, wie wir wissen, nicht mit störungstheoretischen Mitteln zu erhalten. Offensichtlich handelt es sich bei der oben geschilderten Berechnung aus [60] um eben eine solche Störungstheorie niedrigster Ordnung. Natürlich weisen die Autoren des besagten Artikels auf weitere mögliche Verfeinerungen ihrer Herangehensweise hin. Dazu gehören unter anderem Vermeidungen der doppelten Zustands-Zählungen, die an den Kreuzungen zwischen den Koordinatenebenen entstehen. Eine weitere Verbesserung wäre durch die Berücksichtigung einer endlichen Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand zu erwarten. Aber, und das ist die Lehre, die wir aus diesem Abschnitt ziehen, solange solche semiklassischen Korrekturen rein störungstheoretisch beschafft werden, kann noch nicht einmal die führende Korrektur mit Sicherheit vorausgesagt werden.

Nach dem oben besagten wäre eine weiterführende Untersuchung des Anteils der Teilchen im Grundzustand und der Wärmekapazität eines Bose-Gases im Kastenpotential in semiklassischer

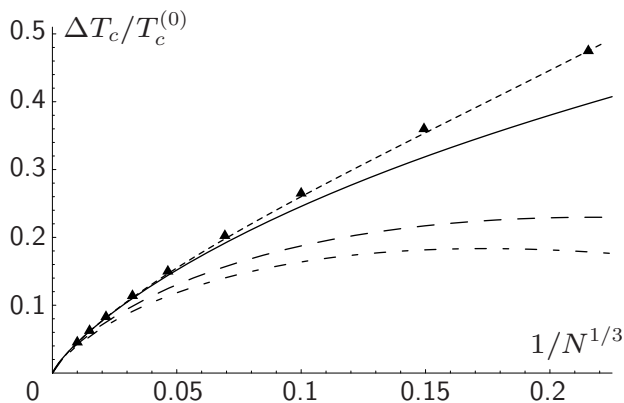


Abbildung 2.7: Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem Wert im thermodynamischen Limes $\Delta T_c/T_c^{(0)} = t_c - 1$ in Abhängigkeit der mittleren Teilchenzahl N . Die lang gestrichelte Kurve entspricht dem Resultat erster Ordnung in $1/N^{1/3}$ aus (2.202) und die durchgezogene Kurve dem vollen Resultat zweiter Ordnung daraus. Die kurz gestrichelte Linie ist das Resultat numerischer Auswertung der Gleichung (2.201). Die gestrichpunktete Kurve stellt das Ergebnis (2.203) aus [60] dar. Dreiecke repräsentieren exakte numerische Werte der quasikritischen Punkte für $N = 100, 300, \dots, 300.000$ und $1.000.000$ Teilchen (von rechts nach links).

Näherung nichttrivial und deshalb auch interessant. Eine solche Untersuchung würde allerdings den Rahmen dieser Schrift sprengen. Aus diesem Grund verzichten wir auf derartige semiklassischen Berechnungen und diskutieren stattdessen im anschließenden Abschnitt eine quantenmechanisch exakte Berechnung dieser Größen.

2.4.2 Exakte Behandlung der Bose-Gase im Kastenpotential

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, die quantenmechanisch exakten Berechnungen des Anteils der Grundzustandsteilchen und der Wärmekapazität bosonischer Ensembles in Kastenpotentialen endlicher Größe durchzuführen. Ähnlich wie im Abschnitt 2.3.3 handelt es sich dabei um Computerunterstützte numerische Untersuchungen. Dadurch werden wir zwar keine analytischen Resultate erhalten, sehen uns dennoch in der Lage, das im letzten Unterabschnitt analytisch erhaltene Resultat für die kritischen Temperaturen (2.202) mit den numerisch gewonnenen Daten dieses Abschnitts zu vergleichen.

Wir beginnen mit der Analyse der Gleichung für die mittlere Teilchenzahl im Kastenpotential (2.180). Diese verwenden wir, um bei einer bestimmten Temperatur, dem bestimmten τ -Wert, das reduzierte chemische Potential $\hat{\mu}$ zu berechnen. Diese Vorgehensweise ist im Prinzip nicht anders als diejenige in der harmonischen Falle im Abschnitt 2.3.3. Der Unterschied besteht darin, dass wir die Summe über alle Energiemoden m in (2.180) nicht explizit analytisch ausführen können. Es ergibt sich nämlich anstelle der geometrischen Reihe, wie es in der harmonischen Falle war, der

Ausdruck

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} = \frac{1}{2} e^{n\pi/4\tau} \left[\vartheta_3(0, e^{-n\pi/4\tau}) - 1 \right]. \quad (2.204)$$

Darin kommt die Jacobische bzw. elliptische Theta-Funktion [61]

$$\vartheta_3(u, e^{-n\pi/4\tau}) \equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-n\pi m^2/4\tau} e^{2i u m} \quad (2.205)$$

vor. Diese Funktion ist tabellarisch gegeben und kann für große (n/τ) -Werte aus den wenigen Summanden mit niedrigen Summationsindizes m bestimmt werden. Für kleine (n/τ) -Werte gilt dagegen $e^{-n\pi/4\tau} \approx 1$, womit alle Summanden in (2.205) von derselben Größenordnung sind. Zur Auswertung der elliptischen Theta-Funktion für solche Werte kann dennoch deren duale Form

$$\vartheta_3(0, e^{-n\pi/4\tau}) = 2 \sqrt{\frac{\tau}{n}} \sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{-4\tau\pi q^2/n} \quad (2.206)$$

verwendet werden. Dies kann mit Hilfe der Poissonschen-Summenformel (A.7) gefunden werden und entspricht der bereits vom letzten Abschnitt 2.4.1 bekannten Dualitätstransformation (2.184). Diese Form erlaubt es uns, die elliptische Theta-Funktion auch für kleine (n/τ) -Werte aus den wenigen Summanden mit niedrigen Summationsindizes in (2.206) zu erhalten, da die anderen Summanden sehr schnell abfallen. Das soll noch anhand der Graphiken in Abb. 2.8 verdeutlicht werden. Daraus erkennt man, dass die numerisch exakte schwarze Kurve für die elliptische Theta-Funktion im Tieftemperaturbereich sehr gut durch die Gleichung (2.205) wiedergegeben wird, bei der wir explizit nur die drei niedrigsten Termen mit $m = -1, 0$ und 1 berücksichtigen (rote gestrichelte Kurve). Für höhere Temperaturen (etwa bei $\tau/n > 0.5$) gibt es allerdings sichtbare Abweichungen. Dafür stimmt in diesem Bereich die Näherung der niedrigsten drei Terme mit $q = -1, 0$ und 1 aus (2.206) umso besser. Wie man an der grünen gestrichelten Kurve aus Abb. 2.8 erkennt, bricht diese Näherung jedoch bei tieferen Temperaturen mit etwa $\tau/n < 0.2$ zusammen. Im Temperaturbereich $0.2 < \tau/n < 0.5$ stimmen beide Näherungen selbst in den niedrigsten Ordnungen gut überein. Unter Berücksichtigung weiterer Summanden vergrößert sich dieser Übereinstimmungsbereich, so dass die beiden kompletten Reihen (2.205) und (2.206) letztlich im gesamten Temperaturbereich identisch sind. Für numerische Berechnungen reichen aber in der Regel bereits wenige Summanden von diesen Darstellungen in ihren jeweiligen Gültigkeitsbereichen aus. Der Tieftemperaturbereich muss dann mit dem Hochtemperaturbereich lediglich an einer geeigneten Stelle zusammengeschweißt werden.

Nun kommen wir zu dem am Anfang dieses Unterabschnittes erwähnten Problem des Auffindens des chemischen Potentials für eine fest vorgegebene Temperatur aus der Gleichung (2.180). Die darin vorkommende n -Summe konvergiert nur langsam, und da die einzelnen Summanden nicht in einer einfachen geschlossenen Form vorliegen, ist dieses Unterfangen numerisch etwas aufwändig, kann aber in einem überschaubaren Zeitrahmen erledigt werden. Nachdem wir die passenden Werte des chemischen Potentials gefunden haben, können wir nach der Identität (2.181) den Anteil der Teilchen im Grundzustand ausrechnen. Es ergeben sich Kurvenverläufe, die in Abb. 2.9 a) in

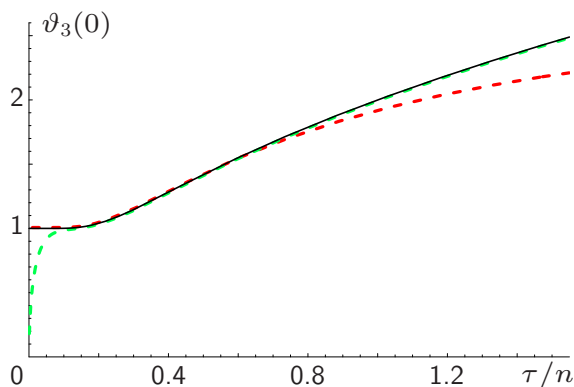


Abbildung 2.8: Jacobische (elliptische) Theta-Funktion $\vartheta_3(0, e^{-n\pi/4\tau})$ in Abhängigkeit vom Parameter τ/n (schwarze durchgezogene Kurve). Die rote gestrichelte Kurve repräsentiert die niedrigste Approximation $1 + 2e^{-n\pi/4\tau}$ aus (2.205). Die grüne gestrichelte Kurve entspricht der niedrigsten Näherung $2\sqrt{\tau/n} [1 + 2e^{-4\tau\pi/n}]$ aus (2.206).

Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur $T/T_c^{(0)}$ dargestellt sind, wobei $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.104) bedeutet.

Aus Abb. 2.9 a) sehen wir, dass alle farbig dargestellten Kurven in endlichen Ensembles glatt verlaufen und gegenüber der schwarzen Kurve vom thermodynamischen Limes nach rechts in Richtung höherer Temperaturen verschoben sind. Auch der Bereich, in dem sich das Verhalten der Kurven am drastischsten ändert, verschiebt sich für kleinere Ensembles zu höheren Temperaturen. Das entspricht dem uns schon häufig begegneten Finite-Size-Effekt der kritischen Temperaturen. Die quasikritischen Temperaturen lassen sich hier in Analogie zum Abschnitt 2.3.3 aus dem Temperaturwert ablesen, an dem die besagten Kurven ihre größten Krümmungen aufweisen. Solche quasikritischen Temperaturwerte sind in Abb. 2.7 für Ensembles aus $N = 100, 300, \dots, 300.000$ und $1.000.000$ Teilchen mit Hilfe der Dreiecke dargestellt. Wie man daraus erkennt, stimmen die so identifizierten Werte für große Teilchenzahlen ab etwa $N = 100.000$ gut mit den semiklassischen Resultaten aus der Gleichung (2.202) überein. Dabei gibt deren zweite Ordnung (durchgezogene Linie) eine Übereinstimmung für deutlich kleinere Teilchenzahlen als die Näherung erster Ordnung (lang gestrichelte Kurve). Schließlich fällt die kurz gestrichelte Kurve, die aus der numerischen Lösung der Gleichung (2.201) gewonnen wurde, mit den Dreiecken praktisch zusammen. Das soll an dieser Stelle aber nicht überbewertet werden, denn die Verhältnisse der semiklassischen Näherung haben mit denen im quasikritischen Bereich bei exakten Rechnungen auch in einem Kastenpotential für kleinere Ensembles nicht viel gemein. Viel wichtiger ist zu sehen, dass die semiklassischen Korrekturen eine richtige Tendenz zeigen. Das relativ schlechte Abschneiden der nach (2.203) bestimmten Kurve selbst für große Teilchenzahlen ist wenig verwunderlich, insbesondere wenn man deren rein störungstheoretischen Ursprung bedenkt.

Nun gehen wir zur Bestimmung der Wärmekapazität in einem Ensemble aus endlich vielen Bosonen über. Diese bestimmen wir nach der Vorschrift (2.97) aus bestimmten Ableitungen des großkanonischen Potentials (2.179) und der mittleren Teilchenzahl (2.180). Nach einer längeren

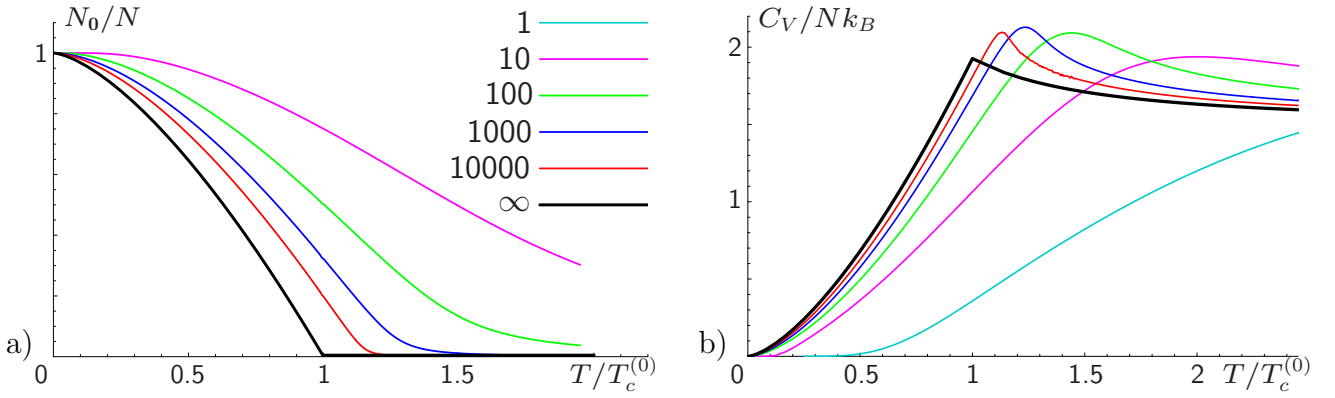


Abbildung 2.9: a) Anteil der Teilchen im Grundzustand im Kastenpotential (2.171) mit Dirichletschen Randbedingungen für verschiedene Teilchenzahlen N in Abhängigkeit der reduzierten Temperatur. b) Wärmekapazität pro Teilchen für Systeme wie in a). Die schwarzen Kurven sind Resultate im thermodynamischen Limes aus Abb. 1.2 bzw. 2.1.

aber einfachen Rechnung ergibt sich das folgende Resultat:

$$\frac{C_V}{k_B} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \tau^2 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right)^3 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right)^3 \quad (2.207)$$

$$- \left[\sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right)^3 \right]^2 / \left[\sum_{n=1}^{\infty} n e^{n\beta\hat{\mu}} \left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right)^3 \right].$$

In dieser Formel erscheinen noch τ -Ableitungen von den uns bereits bekannten kubischen Formen, die den Summationen über den Energiemoden entsprechen. Diese lassen sich nach (2.204) mit Hilfe der elliptischen Theta-Funktionen ausdrücken und berechnen. Natürlich könnten wir diese τ -Ableitungen noch explizit ausführen, das würde uns allerdings auf die Funktionen führen, die noch nicht einmal tabellarisch bekannt sind und dessen Auswertungen die Situation eher unnötig verkomplizieren würden. Aus diesem Grunde belassen wir diese Ableitungen zuerst so wie sie sind und rechnen zuerst die kubischen Formen numerisch aus. Deren Ableitungen werden dann anschließend ebenfalls numerisch gebildet. Um nun die Wärmekapazität nach (2.207) zu bestimmen, bedarf es noch der expliziten Kenntnis der reduzierten chemischen Potentiale $\hat{\mu}$. Diese bestimmen wir aber für vorgegebene Temperaturwerte nach wie vor aus der Teilchenzahl-Gleichung (2.180). Damit lassen sich die Wärmekapazitäten für vorgegebene mittlere Teilchenzahlen ausrechnen. Einige von ihnen sind in Abb. 2.9 zusammengestellt.

Aus diesen graphischen Darstellungen erkennen wir wiederum den Finite-Size-Effekt, der dafür sorgt, dass die Maxima der Wärmekapazität für kleinere Ensembles zu höheren Temperaturen verschoben sind. Außerdem ändern sich die Maximalwerte selbst und übersteigen sogar für genügend große Teilchenzahlen den Maximalwert im thermodynamischen Limes. Für hohe Temperaturen nähern sich die Kurven dem Dulong-Petit Resultat mit Wärmekapazität von $3/2k_B$ pro Teilchen. Außerdem verschwinden ihre Werte im Tieftemperaturbereich entsprechend dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik. Dieses Verschwinden scheint für kleinere Ensembles eher exponentiell zu sein als nach einem Potenzgesetz abzulaufen. Der Grund dafür ist eine endliche Energielücke

zwischen dem ersten angeregten und dem Grundzustand. Deren Anregung hat nämlich zuerst eine exponentielle Anregungsenergie- und somit auch Temperaturabhängigkeit. Dieser Exponentialbereich wird allerdings für höhere Temperaturen von einem Potenzgesetz abgelöst. Für größere Teilchenzahlen wird die Lücke effektiv kleiner, womit auch die Übergangstemperatur zwischen dem exponentiellen und dem potenzähnlichen Bereich tiefer wird. Im thermodynamischen Limes dominiert das Potenzverhalten $(T/T_c^{(0)})^{3/2}$ aus (2.115) im gesamten Temperaturbereich unterhalb der kritischen Temperatur.

2.5 Propagatoren

In diesem Abschnitt diskutieren wir Propagatoren (2.71) in verschiedenen Systemen, angefangen vom homogenen Bose-Gas bis hin zu exakten Ausdrücken in der harmonischen Falle und im Kästenpotential. Aus technischer Sicht dient es in erster Linie der Vorbereitung für störungstheoretische Behandlungen wechselwirkender bosonischer Ensembles im Kapitel 4. Es lassen sich weiterhin daraus so wichtige lokale Größen wie die Teilchenzahldichte (2.87) ableiten, die für experimentelle Beobachtungen der Bose-Einstein-Kondensation von grundsätzlicher Bedeutung ist. Schließlich geben Propagatoren noch Auskunft über das Langdistanz-Verhalten der Quanten-Korrelationen.

Wir beginnen mit dem Propagator für homogene Bose-Gase. Dafür setzen wir die Wellenfunktionen (2.88) und Energie-Eigenwerte (2.90) in die Definitionsgleichung (2.71) und schreiben die erforderliche Summe über verschiedenen Energiemoden nach der Vorschrift (2.106) aus. Es ergibt sich nun

$$G^{\text{hom}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G_G^{\text{hom}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ \times \frac{1}{\lambda^3} e^{\beta \mu (n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \left(\frac{\hbar \beta}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right\}, \quad (2.208)$$

wobei λ die thermische Wellenlänge (2.93) darstellt. Der erste Summand auf der rechten Seite steht für den Grundzustand-Beitrag zum Propagator, der in Analogie zur Propagatordefinition in (2.71) als

$$G_G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ \times e^{\beta(\mu - E_G)(n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \psi_G(\mathbf{x}_1) \psi_G^*(\mathbf{x}_2) \quad (2.209)$$

geschrieben werden kann. Mit der Grundzustandswellenfunktion $\psi_G(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) = 1/\sqrt{V}$ für das homogene Bose-Gas aus (2.88) und dem dazugehörigen Energie-Eigenwert im Grundzustand $E_G = E_0 = 0$ ergibt sich dafür

$$G_G^{\text{hom}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \frac{1}{V} e^{\beta \mu (n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})}. \quad (2.210)$$

Der für die Anwendungen wichtigste Spezialfall eines in der Imaginärzeit lokalen Propagators lautet für das homogene Bose-Gas

$$G^{\text{hom}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) = \frac{N_0}{V} + \frac{1}{\lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\mu}}{n^{3/2}} \exp \left\{ - \frac{M (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2}{2n \hbar^2 \beta} \right\}, \quad (2.211)$$

wobei N_0 die Teilchenzahl im Grundzustand (2.108) ist. Unmittelbar daraus lässt sich die Teilchendichte nach der Gleichung (2.87) als

$$n^{\text{hom}}(\mathbf{x}) = n^{\text{hom}} = \frac{N_0}{V} + \frac{1}{\lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}) \quad (2.212)$$

bestimmen, wobei hierfür noch die polylogarithmische Funktion (2.94) verwendet wurde. Dieser Ausdruck besteht nun aus zwei Termen. Der erste steht für den Kondensat-Anteil mit den Teilchen im Grundzustand und der zweite für den Anteil thermisch angeregter Teilchen. Beide sind ortsunabhängig und somit auch für die Bezeichnung des hier vorliegenden Systems als “homogen” verantwortlich. Das Temperatur-Verhalten unterscheidet aber die beiden Termen, während nämlich diese Abhängigkeit im thermischen Anteil explizit mit der Fugazität $e^{\beta\mu}$ vorgegeben ist, ist sie im Kondensat-Anteil durch die Gleichung (2.111) im Abschnitt 2.2.2 bestimmt.

Eine weitere interessante Eigenschaft des homogenen Bose-Gases tritt zum Vorschein, wenn man den Ein-Teilchen-Propagator (2.211) nach seinem Langdistanz-Verhalten mit $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| \rightarrow \infty$ untersucht. Es ergibt sich nämlich in diesem Limit

$$G^{\text{hom}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) \rightarrow \frac{N_0}{V}. \quad (2.213)$$

Der thermische Dichteanteil scheint in diesem Limit keine Rolle zu spielen, der Kondensat-Anteil überlebt es jedoch unbeschadet. Dieser Effekt gibt den Anlass zur so genannten ODLRO (Off Diagonal Long Range Order), die eine unmissverständliche Aussage über den Ordnungsparameter im jeweiligen System trifft [62]. Betrachten wir dafür die Cluster-Eigenschaft zweier Felder im großen Abstand

$$\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau) \rangle \xrightarrow{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| \rightarrow \infty} \langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau) \rangle \langle \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau) \rangle, \quad (2.214)$$

welche einfach die fehlende Korrelation zweier physikalischer Größen bei großen Distanzen zum Ausdruck bringt. Erinnern wir uns jetzt daran, dass der Quadratmittelwert auf der linken Seite von (2.214) laut der Gleichung (2.59) eigentlich genau einem zeitlich lokalen Propagator entspricht. Falls dieser nun bei längeren Distanzen nicht verschwindet, so ist es ein eindeutiger Hinweis darauf, dass die Mittelwerte einzelner Felder $\langle \psi(\mathbf{x}_1, \tau) \rangle$ und $\langle \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau) \rangle$ ebenfalls nicht verschwinden. Dem System liegen somit endliche Ordnungsparameter in Form bestimmter Feld-Mittelwerte vor. Aus dem Grenzwertproblem (2.213) sind solche als die Mittelwerte des Grundzustandsfeldes identifiziert, das heißt diejenige Feldkonfiguration (2.41), für die $a_{\mathbf{k}m} \sim \sqrt{N_0} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{0}}$ gilt. Alle anderen Feldkonfigurationen löschen sich bei längeren Distanzen im Mittel weitestgehend aus.

Nach der obigen Beschreibung des Propagators in einem homogenen bosonischen System schreiten wir nun zum Propagator in einem aus experimenteller Sicht realistischeren Fall des harmonischen

Potentials fort. Dafür setzen wir die Eigenfunktionen (2.117) und die Energie-Eigenwerte (2.120) in (2.71) ein. Die Auswertung dieses Problems erfordert die Summation der Hermitepolynome, welche keineswegs trivial ist. Unter Zuhilfenahme der Mehler-Formel kann das Problem in den Griff bekommen werden [63], wonach sich ein folgender Ausdruck ergibt:

$$\begin{aligned}
G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= G_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\
&\quad \times \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\pi \hbar} \right)^{3/2} e^{\beta \tilde{\mu} (n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \left[\prod_{j=1}^3 \left(1 - e^{-2\omega_j (n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2)} \right)^{-1/2} \right. \\
&\quad \times \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{M\omega_j}{2\hbar} \frac{(x_{1j}^2 + x_{2j}^2) \cosh \omega_j (n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2) - 2x_{1j}x_{2j}}{\sinh \omega_j (n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2)} \right\} \\
&\quad \left. - \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{M\omega_j}{2\hbar} (x_{1j}^2 + x_{2j}^2) \right\} \right] \quad (2.215)
\end{aligned}$$

mit dem reduzierten chemischen Potential (2.122) und der mittleren Frequenz (2.130). Der erste Summand steht für den Grundzustand-Beitrag (2.209) zum harmonischen Propagator. Mit der Grundzustandswellenfunktion $\psi_G(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x})$ aus (2.117) lässt sich (2.209) unter Berücksichtigung der Eigenschaft der Hermite-Polynome $H_0(z) = 1$ zu

$$\begin{aligned}
G_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \lim_{\eta \searrow 0} \frac{\Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) e^{-\beta \tilde{\mu}} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta)}{e^{-\beta \tilde{\mu}} - 1} e^{\tilde{\mu}(\tau_1 - \tau_2)/\hbar} \\
&\quad \times \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\pi \hbar} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{M\omega_j}{2\hbar} (x_{1j}^2 + x_{2j}^2) \right\} \quad (2.216)
\end{aligned}$$

berechnen. Für den Spezialfall der Lokalität in der Imaginärzeit reduziert sich der volle harmonische Propagator (2.215) zu

$$\begin{aligned}
G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) &= G_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) + \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\pi \hbar} \right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta \tilde{\mu}} \left[\prod_{j=1}^3 \left(1 - e^{-2n\hbar\beta\omega_j} \right)^{-1/2} \right. \\
&\quad \times \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{M\omega_j}{2\hbar} \frac{(x_{1j}^2 + x_{2j}^2) \cosh n\hbar\beta\omega_j - 2x_{1j}x_{2j}}{\sinh n\hbar\beta\omega_j} \right\} - \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{M\omega_j}{2\hbar} (x_{1j}^2 + x_{2j}^2) \right\} \left. \right] \quad (2.217)
\end{aligned}$$

mit dem zeitlich lokalen Grundzustand-Beitrag

$$G_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) = N_0 \left(\frac{M\tilde{\omega}}{\pi \hbar} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{M\omega_j}{2\hbar} (x_{1j}^2 + x_{2j}^2) \right\}. \quad (2.218)$$

Dabei erinnern wir uns noch an die Teilchenzahl im Grundzustand N_0 aus der Gleichung (2.125). Aus (2.218) lässt sich nun die Teilchendichte (2.87) im harmonischen Potential berechnen.

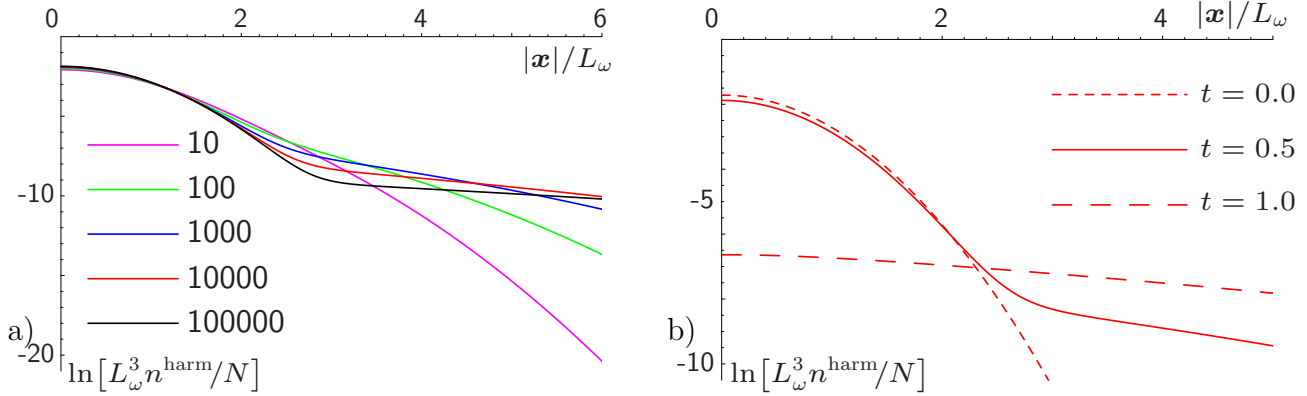


Abbildung 2.10: a) Logarithmischer Plot der Dichte in einer isotropen harmonischen Falle in Abhängigkeit des reduzierten Radius $|\mathbf{x}|/L_\omega = \sqrt{M\omega/\hbar} |\mathbf{x}|$ nach (2.219). Die Kurven repräsentieren die Situation für Ensembles aus $N = 10, \dots, 100.000$ Teilchen und die reduzierte Temperatur $t = T/T_c^{(0)} = 0.5$. b) Dasselbe wie in a), aber für die Teilchenzahl $N = 10.000$ und verschiedene reduzierte Temperaturen $t = 0, 0.5$ und 1 .

Unter Berücksichtigung der mittleren effektiven Breite einer harmonischen Falle $L_\omega = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$ aus (2.127) lautet das Ergebnis

$$n^{\text{harm}}(\mathbf{x}) = n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}) + \frac{1}{L_{\omega_1} L_{\omega_2} L_{\omega_3}} \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left[\prod_{j=1}^3 \left(1 - e^{-2n\hbar\beta\omega_j} \right)^{-1/2} \right. \\ \left. \times \exp \left\{ -\sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \tanh \frac{n\hbar\beta\omega_j}{2} \right\} - \exp \left\{ -\sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \right\} \right], \quad (2.219)$$

wobei die Grundzustand-Dichte n_G^{harm} als

$$n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}) = G_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = \frac{N_0}{L_{\omega_1} L_{\omega_2} L_{\omega_3}} \frac{1}{\pi^{3/2}} \exp \left\{ -\sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \right\} \quad (2.220)$$

gegeben ist. Die Dichteverläufe sind für Systeme in isotropen Fällen mit verschiedenen Gesamtteilchenzahlen und Temperaturen in Abb. 2.10 a) und b) in logarithmischer Darstellung geplottet.

Aus Abb. 2.10 sehen wir, dass bei der halben kritischen Temperatur das Bose-Gas in einer harmonischen Falle aus zwei verschiedenen Komponenten besteht, was sich in dem Knick der jeweiligen Kurven manifestiert. Die eine zeigt flacheres Abstands-Verhalten und dominiert bei größeren Abständen von der Fallenmitte, während sich die andere vorwiegend um das Zentrum herum lokalisiert. Der Unterschied zwischen den beiden Komponenten wird bei einer konstanten mittleren Dichte umso größer, je mehr Teilchen im System vorliegen, was man aus Abb. 2.10 a) erkennt. Es liegt die Vermutung nahe, dass es sich bei den beiden Komponenten um das Grundzustand-Kondensat und den thermisch angeregten Rest handelt, welche jedoch die eine und welche die andere ist, soll anhand Abb. 2.10 b) geklärt werden. Dort sehen wir den Unterschied in der Abhängigkeit der Dichteverteilung für $N = 10.000$ Teilchen bei verschiedenen Temperaturen. Die

kurz gestrichelte Kurve entspricht dem Verlauf bei einer verschwindenden Temperatur, bei der, wie wir wissen, alle Teilchen im Grundzustand-Kondensat sind. Die lang gestrichelte Kurve entspricht dagegen der Situation bei der $T = T_c^{(0)}$, was etwas oberhalb der kritischen Temperatur liegt (siehe dazu Finite-Size-Untersuchungen im Abschnitt 2.3.1 oder 2.3.3). Dort liegen praktisch alle Teilchen in der angeregten thermischen Wolke vor. Nun bemerken wir sofort, dass die Kondensatkurve den zentralen Bereich dominiert, während sich der thermische Rest noch in den Randgebieten wiederfindet. Die durchgezogene Kurve mit $T = T_c^{(0)}/2$ vereinigt in sich nun die beiden Komponenten mit ihren jeweiligen Abstands-Charakteristiken. Diese Feststellung ist für experimentelle Realisierungen von entscheidender Bedeutung. Genau genommen ist man weder in der Lage, die Temperatur einer ultrakalten bosonischen Wolke direkt zu messen noch die Teilchenzahl darin zu bestimmen, vom Anteil der Kondensatteilchen ganz zu schweigen. Was man in Experimenten beobachtet, sind in der Tat nur solche Dichte-Bilder, aus denen man alle wichtigen Informationen indirekt extrahiert. Abb. 1.3 im einleitenden Kapitel 1 ist dabei nur ein Beispiel für derartige Dichte-Verteilungen in einer harmonischen Falle, und die erhöhten Dichten im Falenzentrum sind Zeugen für das Auftreten der Kondensat-Komponente.

Für Untersuchungen des Langdistanz-Verhaltens betrachten wir beispielsweise den Propagator (2.217) mit $\mathbf{x}_2 = -\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}$

$$G^{\text{harm}}(-\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = G_G^{\text{harm}}(-\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) + \frac{1}{L_{\omega_1} L_{\omega_2} L_{\omega_3}} \frac{1}{\pi^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left[\prod_{j=1}^3 \left(1 - e^{-2n\hbar\beta\omega_j} \right)^{-1/2} \right. \\ \left. \times \exp \left\{ -\sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \coth \frac{n\hbar\beta\omega_j}{2} \right\} - \exp \left\{ -\sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \right\} \right]. \quad (2.221)$$

Diese Form ähnelt sehr dem Ausdruck für die Dichte (2.219), unterscheidet sich jedoch vom letzteren durch Verwendung von \coth -Funktion anstelle von \tanh . Das ist allerdings auch schon der einzige Unterschied, denn für den Grundzustandsanteil stellen wir die folgende wichtige Beziehung her:

$$G_G^{\text{harm}}(-\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}), \quad (2.222)$$

die wir durch den Vergleich mit der Grundzustand-Dichte (2.220) unmittelbar aus der Gleichung (2.218) erhalten. Das kann man auch als eine Folge aus der Symmetrie der Grundzustandswellenfunktion gegenüber den Raumspiegelungen sehen. Das lässt sich über eine Überlagerung von allen restlichen angeregten Teilchen natürlich nicht sagen. Vielmehr löschen sich die Zustände dort teilweise aus, so dass man weiterhin sogar zeigen kann, dass ihr Langdistanz-Verhalten gegenüber dessen im Grundzustand für größere Ensembles stark unterdrückt ist. Dazu definieren wir das relative Gewicht der angeregten Teilchen im bilokalen Propagator (2.221) als

$$\xi^{\text{harm}}(\mathbf{x}) \equiv \frac{G^{\text{harm}}(-\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) - n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x})}{n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x})}. \quad (2.223)$$

Da es uns nicht möglich ist, diese Größe analytisch zu untersuchen, müssen wir es numerisch tun. Das numerische Ergebnis ist in doppelt-logarithmischer Darstellung für verschiedene Abstände

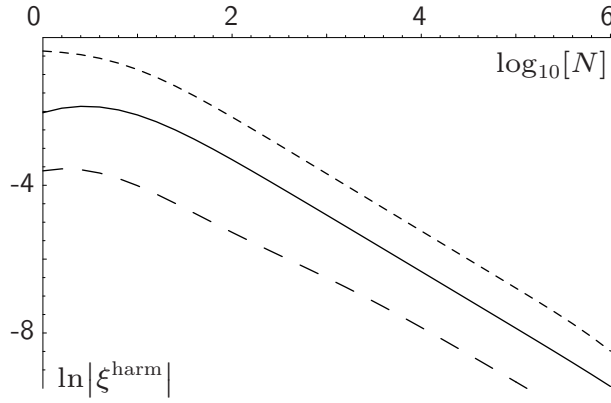


Abbildung 2.11: Doppellogarithmisches Plot der relativen Gewichte der thermisch angeregten Teilchen ξ^{harm} aus (2.223) in Abhängigkeit der Ensemble-Größe N . Die lang gestrichelte Kurve ist für den relativen Abstand $|\mathbf{x}|/L_\omega = 0.5$ ausgerechnet, die durchgezogene für $|\mathbf{x}|/L_\omega = 1.0$ und die kurz gestrichelte für $|\mathbf{x}|/L_\omega = 5.0$. Alle Kurven gelten für Temperatur $T = T_c^{(0)}/2$.

gegen die mittlere Teilchenzahl in Abb. 2.11 präsentiert. Daraus sieht man, dass das Verhältnis (2.223) zwar mit dem dimensionslosen Abstand $|\mathbf{x}|/L_\omega$ bei einer festen Teilchenzahl etwas zunimmt. Bei einem festgehaltenen Abstand in Einheiten der Oszillatorlänge und der steigenden Ensemble-Größe ist aber dieses Verhältnis in der Tat stark unterdrückt. Im thermodynamischen Limes finden wir also auch in der harmonischen Falle das folgende Verhalten:

$$G^{\text{harm}}(-\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}) [1 + \xi^{\text{harm}}(\mathbf{x})] \xrightarrow{|\mathbf{x}|, L_\omega \rightarrow \infty} n_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}) . \quad (2.224)$$

Darin äußert sich der ODLRO-Effekt in der harmonischen Falle. Das führt entsprechend der Cluster-Eigenschaft (2.214) auch diesmal dazu, dass im thermodynamischen Limes die Feldkonfiguration des Grundzustandes mit dem Ordnungsparameter identifiziert werden kann. Übrigens ist der Fakt, dass wir für die Anfangs- und Endpunkte die Wahl $\mathbf{x}_2 = -\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}$ getroffen haben, für diese letzte Aussage nicht entscheidend. Für den allgemeinen Fall wäre die Aussage (2.224) durch $G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) \rightarrow N_0 \psi_G(\mathbf{x}_1) \psi_G^*(\mathbf{x}_2)$ zu ersetzen.

Um die Beschreibungen des harmonischen Propagators abzuschließen, geben wir noch dessen Ausdruck in der semiklassischen Näherung (2.126) an. Den brauchen wir noch für spätere Untersuchungen im Kapitel 4. Um diese Näherung in der niedrigsten Ordnung zu erhalten, entwickeln wir die hyperbolischen Funktionen aus (2.215) bis einschließlich erster Ordnung in $\beta\hbar\omega$. Das einzige, was gegen diese einfache Vorgehensweise spricht, ist der Fakt, dass der Kleinheitsparameter $\beta\hbar\omega$ dabei immer in der Kombination mit dem Laufindex n vorkommt, der nun beliebig groß sein kann. Allerdings heben sich für sehr große n 's alle n -abhängigen Terme in der eckigen Klammer von (2.215) mit dem zweiten n -unabhängigen Term gegenseitig weg, so dass gerade solche Groß- n -Terme nicht ins Gewicht fallen. Damit können wir unserer semiklassischen Vorgehensweise sicher

sein und erhalten mit der thermischen de Broglie-Wellenlänge (2.93)

$$\begin{aligned}
G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &\approx G_G^{\text{harm}}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\
&\times \frac{1}{\lambda^3} e^{\beta \hat{\mu} (n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \left(\frac{\hbar \beta}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right\} \quad (2.225) \\
&\times \exp \left\{ -\frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \frac{M \omega_j^2}{2} \left[\frac{(x_{1j} + x_{2j})^2}{4} + \frac{(x_{1j} - x_{2j})^2}{12} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Wie man daraus erkennt, würde dieser semiklassische harmonische Propagator im Limes $\beta \hbar \omega = 0$ dem Propagator im homogenen Fall (2.208) identisch sein. Erst der führende Korrekturterm dazu beinhaltet somit Information über die harmonische Falle.

Zum Schluss kommen wir noch zum Propagator im Kastenpotential (2.171). Dieser bietet interessante Vergleichsmöglichkeit zum homogenen Fall, den wir am Anfang dieses Abschnittes behandelt haben. Da sein imaginärzeitlich lokaler Spezialfall dafür besonders aufschlussreich ist, beschränken wir uns des Weiteren nur auf diesen. Mit den Wellenfunktionen (2.172) und den Energie-Eigenwerten (2.173) mit (2.174) ergibt er sich entsprechend der Beziehung (2.71) zu

$$\begin{aligned}
G^{\text{kast}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) &= G_G^{\text{kast}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) + \frac{1}{L^3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta \hat{\mu}} \left\{ \frac{1}{8} e^{3n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ML^2}} \right. \\
&\times \prod_{j=1}^3 \left[\vartheta_3 \left(\frac{\pi(x_{1j} - x_{2j})}{2L}, e^{-n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ML^2}} \right) - \vartheta_4 \left(\frac{\pi(x_{1j} + x_{2j})}{2L}, e^{-n\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ML^2}} \right) \right] \\
&\left. - \prod_{j=1}^3 \left[\cos \frac{\pi(x_{1j} - x_{2j})}{L} + \cos \frac{\pi(x_{1j} + x_{2j})}{L} \right] \right\} \quad (2.226)
\end{aligned}$$

mit dem Grundzustand-Anteil

$$G_G^{\text{kast}}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) = \frac{N_G}{L^3} \prod_{j=1}^3 \left[\cos \frac{\pi(x_{1j} - x_{2j})}{L} + \cos \frac{\pi(x_{1j} + x_{2j})}{L} \right]. \quad (2.227)$$

Hierbei verwendeten wir das reduzierte chemische Potential $\hat{\mu}$ aus (2.177) und die Teilchenzahl im Grundzustand N_G aus (2.181). Außerdem wurden in (2.226) die elliptischen Theta-Funktionen ϑ_3 und ϑ_4 verwendet, die nach den Gleichungen

$$\vartheta_3(u, q) \equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} q^{m^2} e^{2ium} \quad \text{und} \quad \vartheta_4(u, q) \equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m q^{m^2} e^{2ium} \quad (2.228)$$

definiert sind [61]. Die erste der beiden haben wir übrigens schon mit der Beziehung (2.205) im Abschnitt 2.4.2 eingeführt.

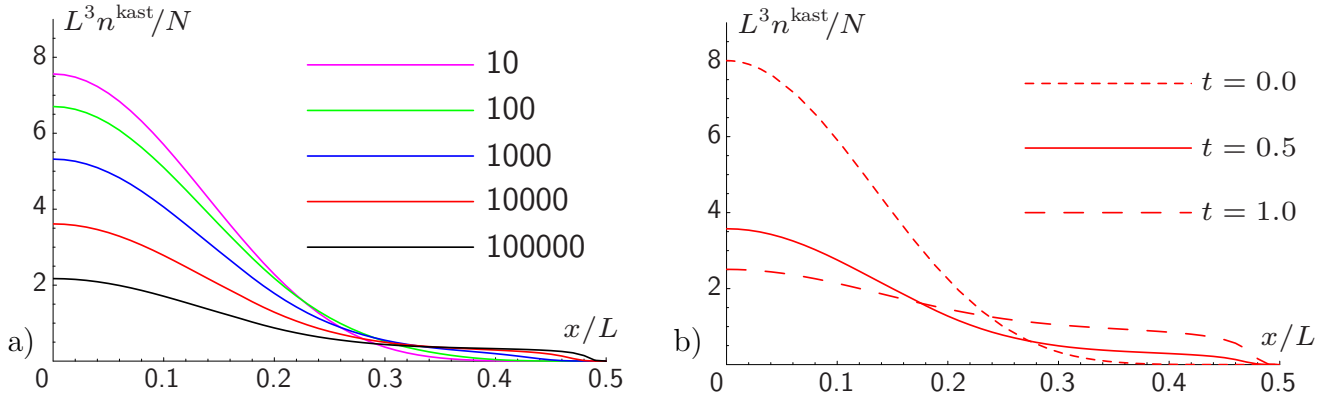


Abbildung 2.12: a) Plot der Dichte im Kastenpotential auf der Hauptdiagonale $\mathbf{x} = (x, x, x)$ in Abhängigkeit des Abstandes x vom Kastenzentrum in Einheiten der Kastenlänge L nach (2.229). Die Kurven repräsentieren die Situation für Ensembles aus $N = 10, \dots, 100.000$ Teilchen und die reduzierte Temperatur $t = T/T_c^{(0)} = 0.5$. b) Dasselbe wie in a), aber für die Teilchenzahl $N = 10.000$ und verschiedene reduzierte Temperaturen $t = 0, 0.5$ und 1 .

Nun können wir unmittelbar aus dem Propagator (2.226) nach der Gleichung (2.87) die Teilchendichte im Kasten bestimmen. Es ergibt sich

$$n^{\text{kast}}(\mathbf{x}) = n_G^{\text{kast}}(\mathbf{x}) + \frac{1}{L^3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ \frac{1}{8} e^{3n\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2ML^2}} \prod_{j=1}^3 \left[\vartheta_3\left(0, e^{-n\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2ML^2}}\right) - \vartheta_4\left(\frac{\pi x_j}{L}, e^{-n\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2ML^2}}\right) \right] - \prod_{j=1}^3 \left[1 + \cos\frac{2\pi x_j}{L} \right] \right\} \quad (2.229)$$

mit der Grundzustand-Dichte

$$n_G^{\text{kast}}(\mathbf{x}) = \frac{N_G}{L^3} \prod_{j=1}^3 \left[1 + \cos\frac{2\pi x_j}{L} \right]. \quad (2.230)$$

Diese hängt nicht nur vom Abstand zum Kastenzentrum, sondern auch noch sehr stark von der Richtung des Ortsvektors ab. Unsere weiteren Untersuchungen wollen wir jedoch auf die Hauptdiagonale $\mathbf{x} = (x, x, x)$ einschränken (für andere Fälle würden alle Berechnungen analog dazu verlaufen). Die aus (2.229) berechneten Dichten sind in Abb. 2.12 a) für Ensembles mit verschiedenen Teilchenzahlen zusammengefasst. In Abb. 2.12 b) sind entsprechende Resultate für $N = 10.000$ Teilchen und drei verschiedenen Temperaturen präsentiert.

Den Resultaten (2.229) und (2.230) kann man entnehmen, dass die Dichten an den Kastenrändern mit $x_j/L = \pm 1/2$ für mindestens eins der $j = 1, 2, 3$ verschwinden, was auch in Abb. 2.12 mit dem Randpunkt $(x, x, x) = (1, 1, 1)L/2$ sichtbar wird. Das ist ein bedeutender Unterschied zu der harmonischen Falle, wo es keine wirkliche Volumenbegrenzungen gibt und wo sich speziell höherenergetische Teilchen weiter vom Zentrum entfernen können. Eine der daraus resultierenden Folgen erkennt man aus Abb. 2.12 a). Daraus wird nämlich sichtbar, wie das Kastenvolumen bei einer festen nicht verschwindenden Temperatur mit steigenden Teilchenzahlen immer gleichmäßiger ausgefüllt wird. Das Verschwinden am Rande läuft dann umso abrupter. Einen ähnlichen

Effekt erhält man für eine feste Teilchenzahl mit steigenden Temperaturen, wie man aus Abb. 2.12 b) erkennt. Bei der verschwindenden Temperatur erkennt man an der kurz gestrichelten Kurve eine deutlich erhöhte Dichte in der Kastenmitte mit einem $\cos^6(\pi x/L)$ -Verhalten. Dies ergibt sich nach (2.230), wenn sich alle Teilchen im Grundzustand befinden. Interessanterweise zeigt sich dieses Verhalten der reduzierte Dichte $L^3 n_G^{\text{kast}}/N$ als völlig unabhängig von der Teilchenzahl. Bei höheren Temperaturen verbreitern sich die Dichteverteilungen, bis sie oberhalb der kritischen Temperatur zu einer weitestgehend homogenen Dichtewolke werden. Das erkennt man im Ansatz schon an der lang gestrichelten Kurve für die Temperatur $T = T_c^{(0)}$ mit dem kritischen Wert $T_c^{(0)}$ aus (2.104) wieder.

Aus dem oben Gesagten bekommt man den Eindruck, dass sich im thermodynamischen Limes eine homogene Dichteverteilung ausbildet. Das kann man für den Dichteanteil der thermisch angeregten Teilchen auch schon aus der Gleichung (2.229) erkennen. Wertet man sie nämlich in der semiklassischen Näherung führender Ordnung aus, so erhält man in der Tat das homogene Gegenstück (2.212), so zumindest im nichtkondensierten Anteil. Die Dichte im Grundzustand-Kondensat (2.230) hat dagegen mit dem entsprechenden ortsunabhängigen Ausdruck aus (2.212) nichts gemein, denn, wie wir bereits bemerkten, ändert eine Teilchenzahlvergrößerung nichts an der Form der Grundzustand-Dichte. Übrigens würde man auch für den Grundzustand eine homogene Dichteverteilung erhalten, wenn man statt der Dirichlet-Randbedingung die etwas weniger physikalische periodische oder die von-Neumann-Randbedingung verwenden würde, siehe dazu z.B. [64]. Die extreme Sensitivität im Verhalten des Grundzustandes gegenüber den Randeffekten ist der Ausdruck der pathologisch großen Kompressibilität in einem idealen homogenen Bose-Gases [65]. Diese Pathologie kann mittels einer schwachen abstoßenden Wechselwirkung beseitigt werden, wodurch auch die Grundzustand-Dichte bis auf einen kleinen Randbereich praktisch homogen wird.

Hinsichtlich des Langdistanz-Verhaltens eines im Kasten eingeschlossenen Bose-Gases lässt sich eine zum harmonischen Fall analoge Betrachtung durchführen. Es gilt auch diesmal die Beobachtung, dass aufgrund der Symmetrie des Grundzustandes die Beziehung $G_G^{\text{kast}}(-\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = n_G^{\text{kast}}(\mathbf{x})$ gilt, die man unmittelbar aus (2.227) sieht. Ebenfalls gilt auch für den Kastenpotential, dass das relative Gewicht der angeregten Teilchen $\xi^{\text{kast}}(\mathbf{x})$, das wir in Analogie zu (2.223) definieren können, für größere Ensembles unterdrückt ist. Somit gilt auch diesmal eine zu (2.224) analoge Feststellung, wodurch der Grundzustand-Kondensat also den Ordnungsparameter liefert.

2.6 Probleme der großkanonischen Beschreibung

In dem abschließenden Abschnitt dieses Kapitels diskutieren wir die Fluktuationsstärke der Teilchenzahl in einem idealen Bose-Gas im gesamten Temperaturbereich. Es ist zu erwarten, dass die Fluktuationen im thermodynamischen Limes überall stark unterdrückt sind. In der Nähe des kritischen Punktes sollen diese erwartungsgemäß noch am größten sein und am absoluten Temperaturnullpunkt komplett verschwinden. Doch stattdessen steht eine seit mehreren Jahrzehnten bekannte Tatsache im Raum, die möglicherweise auf Schrödinger zurückgeht [66] und überraschen-

derweise das Gegenteil davon besagt. Unterhalb der kritischen Temperatur, oder was man sich in einem endlichen Ensemble darunter vorstellt, scheinen die Fluktuationen nämlich überhaupt nicht unterdrückt zu sein, selbst im thermodynamischen Limes nicht. Die Fluktuationen sind somit gewaltig (makroskopisch) und widersprechen unserer physikalischen Intuition.

Zuerst müssen wir jedoch an dieser Stelle klären, was mit den starken Fluktuationen gemeint ist und wie man zu dieser Feststellung kommt. Dazu untersuchen wir die Größe

$$(\Delta N)^2 \equiv \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 , \quad (2.231)$$

die als die quadratische Fluktuationsbreite oder auch als die Varianz der Teilchenzahl bezeichnet wird. Sie lässt sich aus dem großkanonischen Potential (2.82) entsprechend der Gleichung

$$(\Delta N)^2 = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \mathcal{F}_{GK} \quad (2.232)$$

bestimmen. Das Resultat dieser zweifachen Ableitung nach dem chemischen Potential lautet unter Verwendung der mittleren Teilchenzahl $N_{\mathbf{k}}$ im Energiezustand \mathbf{k} aus (2.85)

$$(\Delta N)^2 = \sum_{\mathbf{k}} [N_{\mathbf{k}}^2 + N_{\mathbf{k}}] . \quad (2.233)$$

Betrachtet man nun den Grundzustand-Beitrag zu dieser Varianz, so ergibt sich eine einfache aber folgenreiche Formel

$$(\Delta N_G)^2 = N_G (N_G + 1) . \quad (2.234)$$

Wenn man sich jetzt noch an die Tatsache erinnert, dass speziell für verschwindende Temperaturen alle Teilchen im Grundzustand sitzen, das heißt $N_G = N$, dann erhält man im thermodynamischen Limes die Beziehung

$$\Delta N_G \xrightarrow{T=0, N \rightarrow \infty} N , \quad (2.235)$$

wobei wir die Bezeichnung $\Delta N_G \equiv \sqrt{(\Delta N_G)^2}$ für die Fluktuationsbreite verwenden. Demnach wächst die Teilchenzahlfluktuation im Grundzustand offensichtlich mit der mittleren Teilchenzahl im großkanonischen Ensemble linear an. Betrachtet man (2.234) genauer, so stellt man weiterhin fest, dass diese Fluktuation den Wert der mittleren Teilchenzahl sogar noch etwas übertrifft, was aber an sich nicht weiter schlimm ist. Interessanterweise sind alle obigen Aussagen zur Teilchenzahlfluktuation völlig allgemeingültig gefasst, also ohne Belang, ob es sich um das homogene Bose-Gas oder um eins in der harmonischen Falle handelt.

Für den Spezialfall des harmonischen Fallenpotentials ist die relative Stärke der Fluktuation in Abb. 2.13 a) zusammengestellt. Die Berechnungen dazu entstammen einer quantenmechanisch exakter Behandlung, die wir in Analogie zum Abschnitt 2.3.3 durchgeführt haben. Aus dieser Abbildung erkennen wir, dass die Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand an sich nie verschwinden, aber deren auf ein einzelnes Teilchen bezogene Werte oberhalb der kritischen Temperatur $T_c^{(0)}$ aus (2.134) mit den steigenden Teilchenzahlen stark unterdrückt sind. Ganz anders ist die Situation unterhalb $T_c^{(0)}$ wo die relative Fluktuation sich der nichtverschwindenden

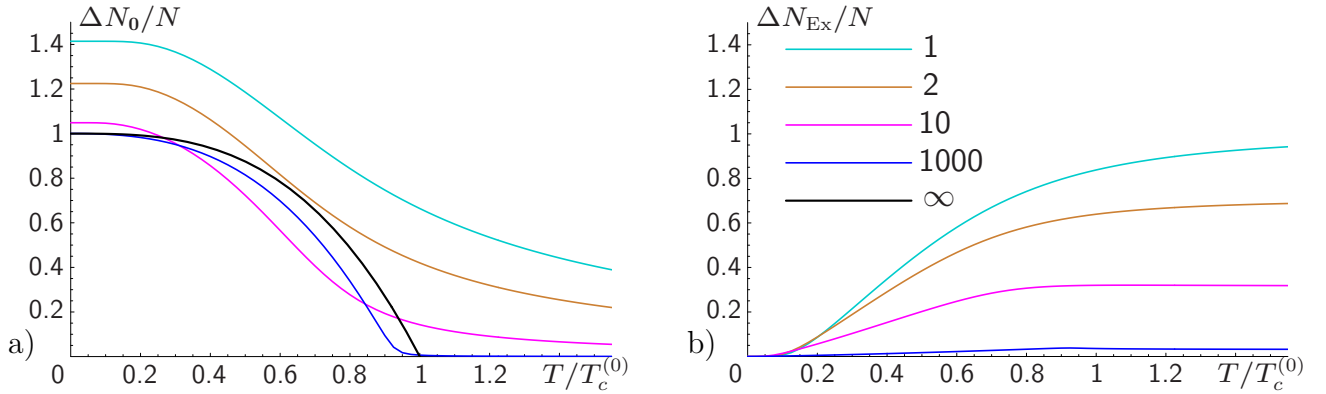


Abbildung 2.13: a) Teilchenzahlfluktuation im Grundzustand einer harmonischen Falle in Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur für verschiedene Teilchenzahlen $N = 1, 2, 10, 1000$ und im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$. b) Wie in a), aber für die angeregten Teilchen.

Grundzustand-Besetzung nähert. Beim Temperaturnullpunkt nähern sich deren Werte schließlich einer eins von oben an.

Und wie steht es mit den Fluktuationen der angeregten Teilchen aus? Um diese Frage zu beantworten, bedienen wir uns nochmals der Gleichung (2.233) und separieren den Grundzustand-Anteil weg. Dadurch erhalten wir mit Hilfe der Bose-Einstein-Verteilung (2.85) für deren Varianz den Ausdruck

$$(\Delta N_{\text{Ex}})^2 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)}}{[e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1]^2} - (\Delta N_G)^2 . \quad (2.236)$$

Diese Größe lässt sich für die harmonische Falle noch etwas spezifizieren. Dazu verwenden wir den Energie-Eigenwert (2.120) und das reduzierte chemische Potential (2.122). Beschränken wir uns noch auf die isotrope Falle, so können wir weiterhin die Summenformel (2.166) anwenden und erhalten

$$(\Delta N_{\text{Ex}})^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \frac{e^{-\beta\hat{\mu}} e^{\beta\hbar\omega k}}{[e^{-\beta\hat{\mu}} e^{\beta\hbar\omega k} - 1]^2} . \quad (2.237)$$

Die numerische Auswertung dieser Gleichung läuft in Analogie zur Vorgehensweise im Abschnitt 2.3.3 und ergibt Kurvenverläufe, die in Abb. 2.13 b) graphisch dargestellt sind. Daraus erkennt man sofort, dass die Fluktuationen aller angeregten Teilchen am Temperaturnullpunkt verschwinden. Bei steigenden Temperaturen wachsen sie dann etwas an und erreichen im Hochtemperaturbereich anschließend einen konstanten Wert, der, wie genaueren Untersuchungen zeigen, mit $\Delta N_{\text{Ex}}/N \rightarrow 1/N^{1/2}$ gegeben ist (siehe dazu z.B. [67,68]). Mit der steigenden Teilchenzahl zeigt sich außerdem, dass solche Fluktuationen der angeregten Zustände umso stärker unterdrückt sind, je größer das System ist.

Das oben geschilderte Verhalten der Fluktuationen ist keineswegs typisch für das spezielle Problem des Fallenpotentials. Wie wir bereits nach der Gleichung (2.235) bemerkten, sind die wichtigsten

Züge sogar systemunabhängig gültig. So bringen auch analoge Untersuchungen in einem Kastenpotential ähnliche Resultate hervor. Im Folgenden werden sie aus diesem Grund nicht weiter angeführt. Fassen wir nun die allgemeingültige Situation nochmals zusammen. Die Untersuchungen der großkanonischen Ensembles nach der Bose-Einstein-Verteilung ergeben für angeregte Zustände Fluktuationen, die bezogen auf ein einzelnes Teilchen im thermodynamischen Limes verschwinden. Das ist eine Situation, die physikalisch sinnvoll zu sein scheint. Doch für den Grundzustand verschwinden derartige Fluktuationen nicht. Somit lassen sie an der Richtigkeit der von uns gefundenen Resultate zweifeln.

Es bleibt aber noch zu klären, ob solche unphysikalischen Fluktuationen den Bose-Einstein-kondensierten Systemen prinzipiell eigen sind oder lediglich von Unzulänglichkeiten in deren Beschreibungen zeugen. Genauere Untersuchungen haben gezeigt, dass die zweite Alternative der Wahrheit entspricht. Genau genommen erweist sich die Beschreibung im großkanonischen Ensemble als inadäquat [69,64]. Selbstverständlich ist das ideale wechselwirkungsfreie Bose-Gas nicht komplett experimentell realisierbar und allein schon dadurch nur näherungsweise relevant. Bekanntermaßen unterdrücken abstoßende Wechselwirkungen auch im großkanonischen Formalismus die Fluktuationen auf das Normalmaß. Weil nämlich mit eingeschalteter Wechselwirkung die Teilchen-Fluktuationen den Energie-Fluktuationen entsprechen, sind große Fluktuationen energetisch kostspielig und deshalb unterdrückt [67]. Prinzipiell ist aber die Bose-Einstein-Kondensation ein rein statistischer Effekt, der keine Wechselwirkungen benötigt. Man darf sich also schon fragen, warum die großkanonische Beschreibung idealer Gase solche Probleme überhaupt aufwirft.

Zur Lösung des Rätsels bemerke man zuerst, dass die Fluktuationen nur in Anwesenheit des Kondensates unterhalb der kritischen Temperatur unphysikalisch groß sind. Die Langdistanz-Ordnung (ODLRO), die im Grundzustand vorliegt, scheint also im gewissen Sinne dafür verantwortlich zu sein. Stellt man sich ein großkanonisches Ensemble vor, so denkt man dabei an ein Subsystem, welches mit seiner Umgebung die Energie und Teilchen austauscht. Doch in einem so offenen System kann auch das Grundzustands-Kondensat nicht dem Subsystem allein gehören, sondern muss ein Teil des ganzen Reservoirs sein. Das Geschehen darin ist aber durch die Langdistanz-Ordnung bestimmt. Die Voraussetzung der statistischen Unabhängigkeit eines großkanonischen Subsystems, die für die Herleitung der Bose-Einstein-Verteilung von grundsätzlicher Bedeutung war, kann damit allerdings nicht erfüllt sein [64].

Die unphysikalisch makroskopischen Fluktuationen sind nur ein Beispiel der inadäquaten Behandlung der kondensierten Phase durch die großkanonische Bose-Einstein-Verteilung. Auch die gesamte Teilchenzahl-Statistik wird nicht korrekt wiedergegeben, was im Abschnitt 3.4 noch genauer diskutiert wird. Und wie steht es mit dem mittleren Kondensatteilchen-Anteil und den thermodynamischen Eigenschaften? Wie in Ref. [64] geschildert, gibt es diesbezüglich keine Probleme. Dort wird allgemein bewiesen, dass alle lokale Größen wie die Teilchenzahldichte und somit auch mittlere Teilchenzahlen, aber auch alle globale thermodynamische Eigenschaften selbst im großkanonischen Ensemble in Anwesenheit der Kondensation ihre Gültigkeit behalten. Bezüglich der thermodynamischen Eigenschaften kann man sich vorstellen, dass im Limes großer Teilchenzahlen der Grundzustand nichts zum großkanonischen Potential beiträgt. Letzteres ist deswegen weitestgehend insensitiv gegenüber unphysikalisch großen Fluktuationen des Grundzustandes. Die

angeregten Zustände werden allerdings auch in der großkanonischen Beschreibung qualitativ richtig erfasst, und nur solche sind von Bedeutung. Dass die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand korrekt wiedergegeben wird, liegt an den von uns vorgegebenen Rahmenbedingungen. Die mittlere Teilchenzahl in angeregten Zuständen N_{Ex} kann nämlich im großkanonischen Ensemble widerspruchsfrei beschrieben werden, weil ihre Fluktuationen entsprechend Abb. 2.13 b) keine Anomalie aufweisen. Wenn wir uns jetzt auf eine feste mittlere Gesamtteilchenzahl N festlegen, dann ist die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand N_G damit automatisch als die Differenz $N_G = N - N_{\text{Ex}}$ gegeben. Allein das rettet schon die großkanonischen Voraussagen über den Kondensatteilchen-Anteil N_G/N .

Eine der Vorschriften zur Beseitigung der anomalen makroskopischen Fluktuationen im Grundzustand ist auf Bogoliubov zurückzuführen [70]. Sie besteht darin, dass der Grundzustands-Kondensat nicht durch eine Feldvariable oder einen Operator beschrieben wird, sondern lediglich durch eine makroskopische Wellenfunktion. Dadurch gibt es konstruktionsbedingt auch gar keine Fluktuationen im Kondensat. Das stellt allerdings eine Näherung dar, die nur im Limes großer Teilchenzahlen als exakt anzusehen ist [48,70,71], liefert jedoch ein leistungsfähiges Konzept insbesondere bei Untersuchungen wechselwirkender Systeme. Ein weiterer Vorschlag, der zu normalen Fluktuationsraten im Grundzustand führt, basiert auf dem letzten Punkt des vorherigen Absatzes. Er wurde z.B. in [64] und [69] verwendet und besteht in der Forderung, dass die Gesamtteilchenzahl nicht nur im Mittel vorgegeben wird, sondern sogar eine fest vorgegebene Zahl ist. Die Fluktuationen der Gesamtteilchenzahl sind dadurch nach Konstruktion gleich null. Die Fluktuation der Grundzustandsteilchenzahl ist dann zwangsläufig gleich derjenigen für alle angeregten Teilchen und somit, wie wir aus Abb. 2.13 b) sehen können, mikroskopisch klein. Im Prinzip entspricht diese Vorgehensweise derjenigen in einem kanonischen Ensemble, die angeregten Teilchen werden dabei jedoch nach wie vor durch die Bose-Einstein-Verteilung beschrieben und weisen demnach großkanonische Züge auf. Einer systematischen Beschreibung der Bose-Gase in einem kanonischen Ensemble mit einer von Beginn an fest vorgegebener Teilchenzahl wenden wir uns im nächsten Kapitel zu. Dabei werden wir nicht auf die Bose-Einstein-Verteilung zurückgreifen und erhalten dennoch alle für die Kondensation typischen Merkmale.