

BOSE-EINSTEIN-KONDENSATION IN ENDLICHEN SYSTEMEN



Dissertation
eingereicht im Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin

Konstantin Glaum

Institut für Theoretische Physik
Freie Universität Berlin
Arnimallee 14, 14195 Berlin

Dezember 2007

Die in vorliegender Dissertation dargestellte Arbeit wurde in der Zeit zwischen April 2002 und Dezember 2007 im Fachbereich Physik an der Freien Universität Berlin unter Betreuung von Prof. Dr. Hagen Kleinert durchgeführt

Erstgutachter: Prof. Dr. Hagen Kleinert

Zweitgutachter: Prof. Dr. Jürgen Bosse

Tag der Disputation: 28. Januar 2008

Publikationsliste

- [1] A. Pelster and K. Glaum: *Recursive Graphical Construction of Tadpole-Free Feynman Diagrams and Their Weights in ϕ^4 -Theory* in W. Janke, A. Pelster, H.-J. Schmidt, and M. Bachmann (Herausgeber): *Fluctuating Paths and Fields – Dedicated to Hagen Kleinert on the Occasion of his 60th Birthday*, World Scientific, Singapore, 269–280 (2001)
- [2] A. Pelster and K. Glaum, *Many-Body Vacuum Diagrams and Their Recursive Graphical Construction*, Physica Status Solidi B **237**, 72–81 (2003)
- [3] A. Pelster and K. Glaum, *Recursive Graphical Solution of Closed Schwinger-Dyson Equations in ϕ^4 -Theory – Generation of Connected and One-Particle Irreducible Feynman Diagrams*, Physica A **335**, 455–485 (2004)
- [4] K. Glaum, A. Pelster, H. Kleinert, and T. Pfau, *Critical Temperature of Weakly Interacting Dipolar Condensates*, Physical Review Letters **98**, 080407 (2007)
- [5] K. Glaum and A. Pelster, *Bose-Einstein Condensation Temperature of Dipolar Gas in Anisotropic Harmonic Trap*, Physical Review A **76**, 023604 (2007)
- [6] K. Glaum, H. Kleinert, and A. Pelster, *Condensation of Ideal Bose Gas Confined in a Box within a Canonical Ensemble*, Physical Review A **76**, 063604 (2007)

Kurzzusammenfassung

In dieser Promotionsschrift werden Untersuchungen thermodynamischer und statistischer Eigenschaften von Bose-Einstein-Kondensaten in endlichen Systemen präsentiert. Grosskanonische Beschreibungen idealer Bose-Gase liefern analytische und numerische Ergebnisse für die Wärmekapazitäten und Grundzustand-Besetzungen in verschiedenen Potentialen. Verbesserte analytische Berechnungen der Kondensations-Temperatur führen zu akkuraten quantitativen Beschreibungen der Finite-Size-Effekte. Entgegen einer weit verbreiteten Meinung liefert die grosskanonische Bose-Einstein-Verteilung jedoch eine falsche Beschreibung der Teilchenzahl-Statistik im Kondensations-Bereich. Eine alternative Beschreibung der Bose-Einstein-Kondensation für Systeme im thermischen Gleichgewicht ist innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie möglich. Die Rechnungen dazu werden im Rahmen der Vielteilchen-Theorie mit Hilfe der Pfadintegral-Methode durchgeführt. Es ergeben sich dabei physikalisch sinnvolle Resultate für thermodynamische Grössen im gesamten Temperaturbereich. Insbesondere wird darin auch das von Feynman fehlerhaft behandelte Problem des homogenen Gases in einer geeigneten Weise korrigiert. Weiterhin wird bestätigt, dass die Teilchenzahl-Statistik innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie adäquat beschrieben wird. Ein weiteres Forschungsgebiet, das in dieser Schrift beleuchtet wird, beschäftigt sich mit thermodynamischen Eigenschaften der schwach kontakt- und dipolar wechselwirkenden Bose-Gasen. Hierbei wird der Einfluss der Wechselwirkungen auf die Kondensations-Temperatur der in harmonischen Fallen eingefangenen Bosonen studiert. Das besondere Augenmerk gilt dabei der charakteristischen Sensitivität der Dipol-Dipol-Wechselwirkung gegenüber der Fallen-Anisotropie.

Abstract

In this thesis, the investigations of thermodynamical and statistical properties of Bose-Einstein condensates in finite systems are presented. Descriptions of ideal Bose gases within grand-canonical ensemble yield analytical and numerical results for the specific heat and the ground-state occupancy in different potentials. Advanced analytical studies of the condensation temperature give accurate descriptions of finite-size effects. Contrary to common opinion, the grand-canonical Bose-Einstein distribution is shown to fail describing particle-number counting statistics in the condensate region. An alternative description of a Bose-Einstein condensation is given within the canonical ensemble theory of systems in thermal equilibrium. There, the suitable path-integral formulation is applied in the framework of many-body theory. This procedure leads to reasonable thermodynamic properties for all temperatures. The originally misleading treatment of a homogeneous Bose gas by Feynman is properly corrected here. Furthermore, it is corroborated that the particle counting statistics is adequately reproduced within the canonical ensemble. A different field of study illuminated here concerns thermodynamical properties of weakly contact and dipolar interacting Bose systems. The interaction influence of the condensation temperature of harmonically trapped bosons is investigated. In particular, our attention is turned to the characteristic sensitivity of the dipolar interaction with respect to the anisotropy of the trap.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Historisches	1
1.2	Experimentelle Realisierung der Bose-Einstein-Kondensation	7
1.3	Bose-Einstein-Kondensation in endlichen Systemen	11
1.4	Überblick der Promotionsschrift	15
2	Großkanonische Beschreibung idealer Bose-Gase	19
2.1	Feldtheoretische Beschreibung	20
2.1.1	Funktionalintegral-Darstellung der Zustandssumme	21
2.1.2	Wechselwirkungsfreie Zustandssumme	26
2.1.3	Freier Propagator	28
2.1.4	Wechselwirkungsfreies großkanonisches Potential	33
2.2	Spezialfall des homogenen Bose-Gases	35
2.2.1	Direkte Auswertung homogener Bose-Gase	36
2.2.2	Homogenes Bose-Gas mit Grundzustand	38
2.3	Bose-Gase in harmonischen Fallen	41
2.3.1	Semiklassische Näherung	43
2.3.2	Höhere semiklassische Korrekturen	49
2.3.3	Exakte Behandlung harmonischer Fallen	53
2.4	Bose-Gase im Kastenpotential	58
2.4.1	Semiklassische Näherungen	60
2.4.2	Exakte Behandlung der Bose-Gase im Kastenpotential	66
2.5	Propagatoren	70
2.6	Probleme der großkanonischen Beschreibung	78

3	Ideale Bose-Gase im kanonischen Ensemble	83
3.1	Kanonische Beschreibung	84
3.1.1	Pfadintegral-Darstellung der Imaginärzeit-Amplitude	86
3.1.2	Kanonische Zustandssumme	91
3.1.3	Großkanonische Zustandssumme und kanonische Rekursion	95
3.1.4	Kondensationseffekte in kanonischen Ensembles	97
3.1.5	Propagator im kanonischen N -Teilchen-Ensemble	101
3.2	Kanonische Untersuchungen für spezielle Potentiale	106
3.2.1	Spezialfall des homogenen Bose-Gases	107
3.2.2	Bose-Gas im Kastenpotential	114
3.2.3	Bose-Gase in harmonischen Fallen	120
3.3	Sattelpunkts-Näherung kanonischer Zustandssummen	123
3.4	Fluktuationen und Teilchenzahl-Statistik	126
4	Schwach wechselwirkende Bose-Gase	135
4.1	Vielteilchentheorie mit schwacher Wechselwirkung	136
4.1.1	Feldtheoretische Begriffe	136
4.1.2	Selbstenergie	139
4.1.3	Einführung in die Diagrammtechnik	141
4.1.4	Rekursion für Selbstenergie	143
4.1.5	Molekularfeld-Näherung	149
4.2	Modell der Wechselwirkung	152
4.2.1	Kontakt-Wechselwirkung	152
4.2.2	Dipolare Wechselwirkung	156
4.3	Kritische Temperatur in dipolaren Bose-Gasen	158
4.3.1	Semiklassische Näherung	160
4.3.2	Selbstenergie- und Vakuum-Diagramme führender Ordnung	163
4.3.3	Berechnung der kritischen Temperatur	168
4.3.4	Diskussion der Resultate	172
5	Zusammenfassung	177

A Poissonsche Summen-Formel	181
B Robinsonsche Entwicklungs-Formeln	183
C Numerische Auswertung der kanonischen Rekursion	187
Literaturverzeichnis	192
Danksagung	205

Kapitel 1

Einleitung

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

1.1 Historisches

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

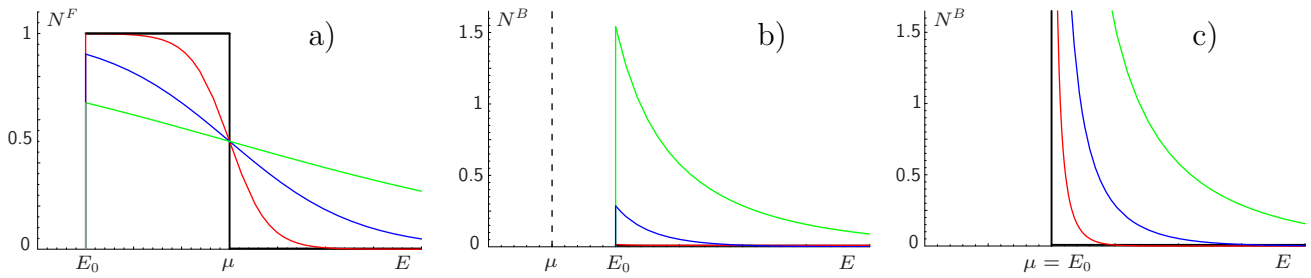


Abbildung 1.1: a) Besetzungszahlen für verschiedene Energien nach der Fermi-Dirac-Verteilung (1.4) für eine fest vorgegebene Grundzustandsenergie E_0 und chemisches Potential $\mu > E_0$. b) und c) Besetzungszahlen nach der Bose-Einstein-Verteilungen (1.3) für $\mu < E_0$ bzw. $\mu = E_0$. Die Verteilungen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

und werden Fermionen genannt.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

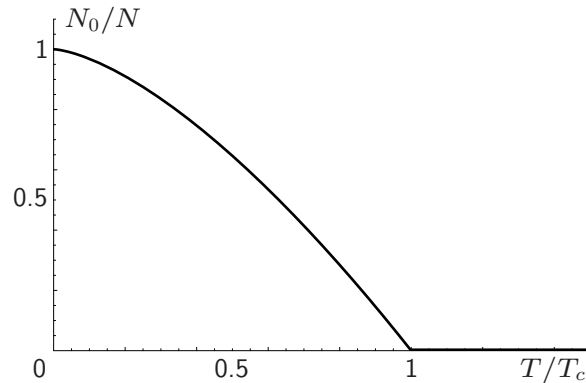


Abbildung 1.2: Temperaturabhängigkeit der Kondensat-Fraktion in einem homogenen System nach Gleichung (1.6).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.2 Experimentelle Realisierung der Bose-Einstein-Kondensation

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

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

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

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

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

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

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

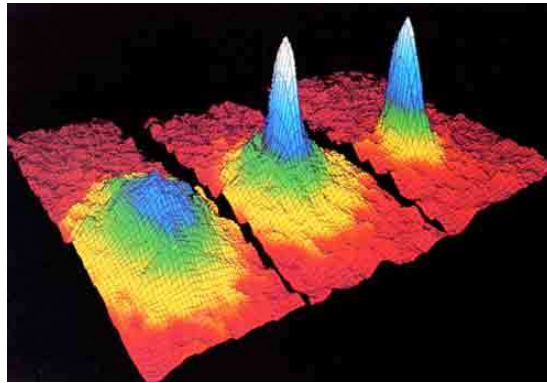


Abbildung 1.3: Dichteprofil des Rubidium-Gases in einer (anisotropen) harmonischen Falle aus [35]. Von links nach rechts sind Messungen für Temperaturen etwas oberhalb des kritischen Wertes, dessen halben Wertes und fast am absoluten Temperatur-Nullpunkt dargestellt.

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

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

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

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

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

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

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

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

1.3 Bose-Einstein-Kondensation in endlichen Systemen

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

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

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

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

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

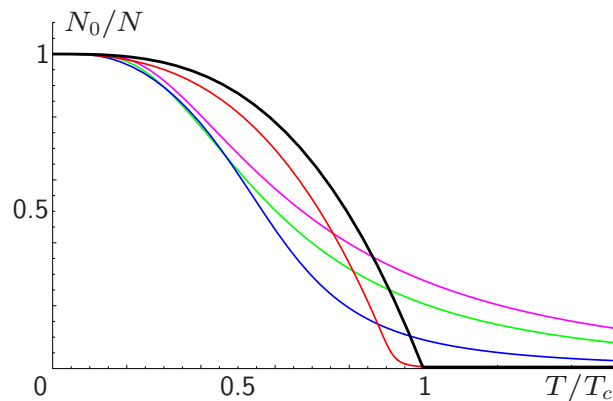


Abbildung 1.4: Grundzustands-Fraktion für kanonische bosonische Ensembles mit mittleren Teilchenzahlen $N = 1$ (lila), $N = 2$ (grün), $N = 10$ (blau), $N = 1000$ (rot) und im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ (schwarz) in einer harmonischen Falle. Die Darstellung ist in Abhängigkeit der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

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

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

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

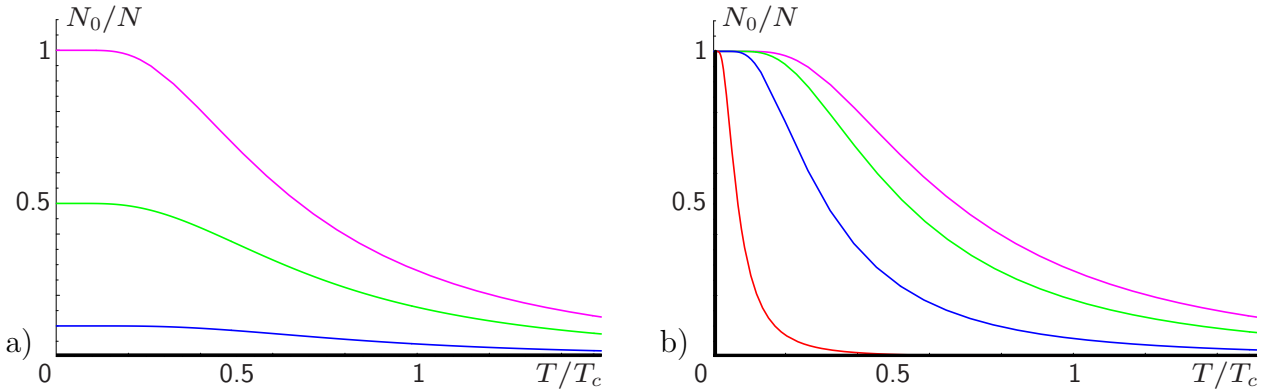


Abbildung 1.5: Grundzustands-Fraktion für kanonischen Ensembles aus $N = 1$ (rosa), $N = 2$ (grün), $N = 10$ (blau), $N = 1000$ (rot) Teilchen und im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ (schwarz). Dargestellt ist die Temperaturabhängigkeit a) für Fermionen und b) für klassisch unterscheidbare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

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

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

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

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

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

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

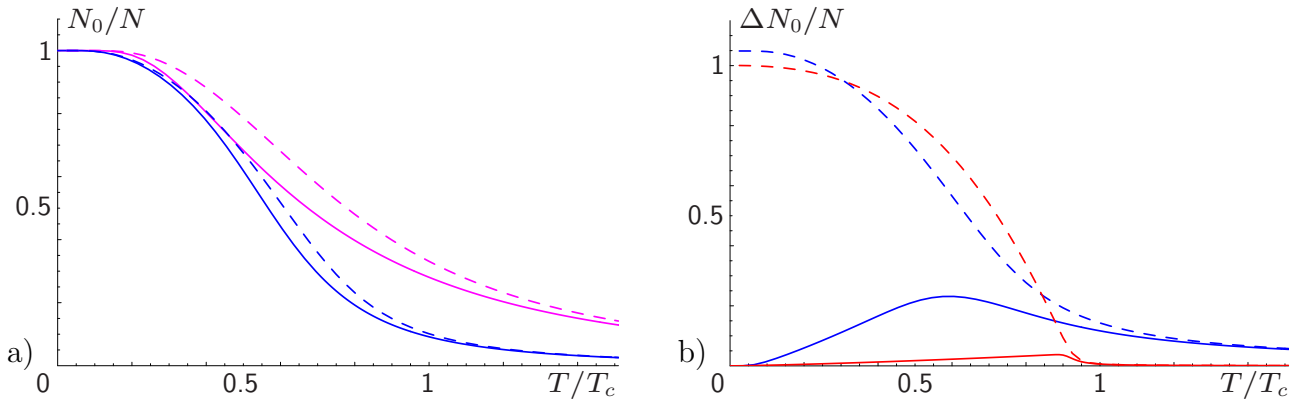


Abbildung 1.6: a) Vergleich zwischen kanonischen (durchgezogene Kurven) und großkanonischen (gestrichelte Kurven) Ensembles für die Grundzustands-Fraktion von $N = 1$ (lila) und $N = 10$ (blau) Bosonen in einer harmonischen Falle. b) Dasselbe für die Fluktuation der Teilchenzahl im Grundzustand von $N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

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

1.4 Überblick der Promotionsschrift

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 dagegegn 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

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

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

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

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

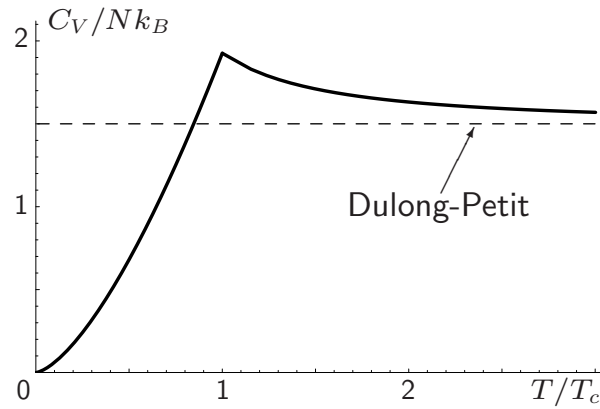


Abbildung 2.1: Reduzierte Wärmekapazität im homogenen Fall nach (2.99) für $T > T_c$ und nach (2.115) für $T < T_c$. Die gestrichelte Linie zeigt das klassische Dulong-Petit-Resultat.

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

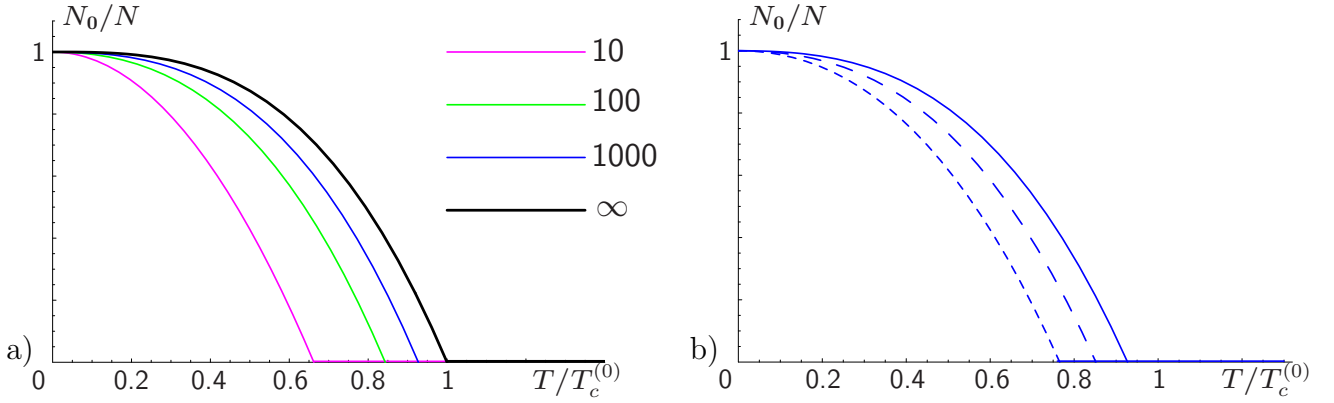


Abbildung 2.2: Anteil der Kondensatteilchen in semiklassischer Näherung erster Ordnung a) in einer isotropen Falle für $N = 10, 100, 1000$ und unendlich viele Teilchen, b) in einer anisotropen Falle mit $\omega_1 = \omega_2 = x\omega$ und $\omega_3 = \omega/x^2$ für $N = 1000$ Teilchen und $x = 1/3$ (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

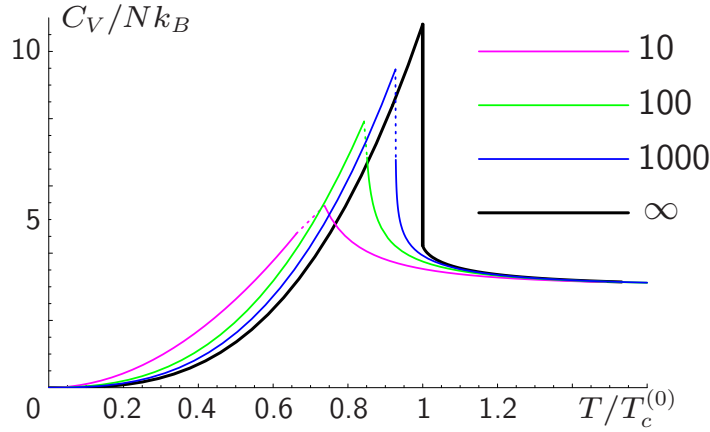


Abbildung 2.3: Wärmekapazität pro Teilchen für isotrope harmonische Fallen in erster semiklassischer Näherung (2.141) im unteren und (2.139) im oberen Temperaturbereich. Dargestellt sind Resultate für $N = 10, 100, 1000$ Teilchen im Vergleich zum thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$. Die gepunkteten 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 Robin-son-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 Grundzustand-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:

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

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 $\mathcal{O}(b)$

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

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)

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

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

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

mit der Abkürzung für den besagten Korrekturterm

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

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 $\mathcal{O}(b^0)$

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

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.

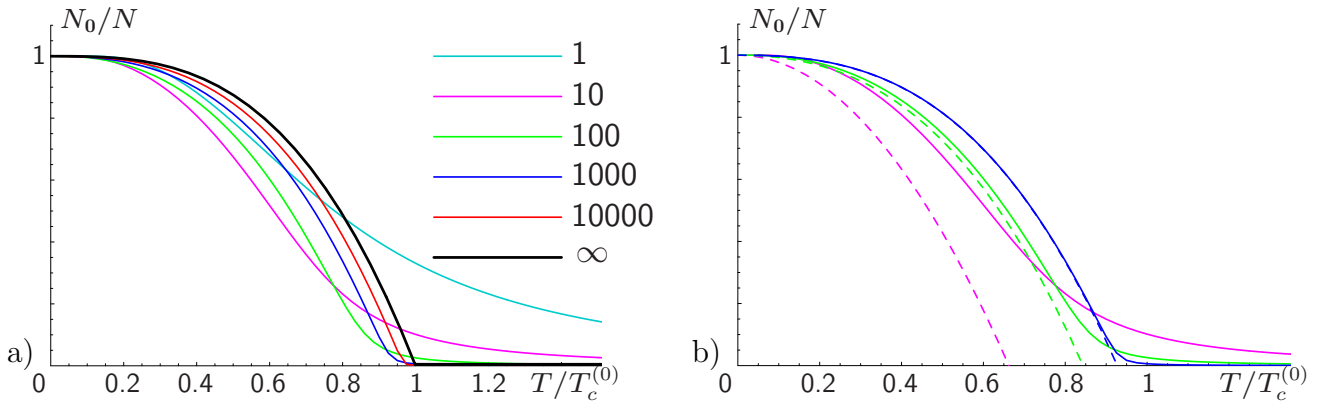


Abbildung 2.4: a) Anteil der Kondensatteilchen nach exakter großkanonischer Rechnung in einer isotropen Falle für $N = 1, 10, 100, 1000$ und 10000 Teilchen im Vergleich zum Resultat im thermodynamischen Limes aus 2.2 a). b) Vergleich der Ergebnisse exakter Rechnung (durchgezogene Kurven) mit der ersten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

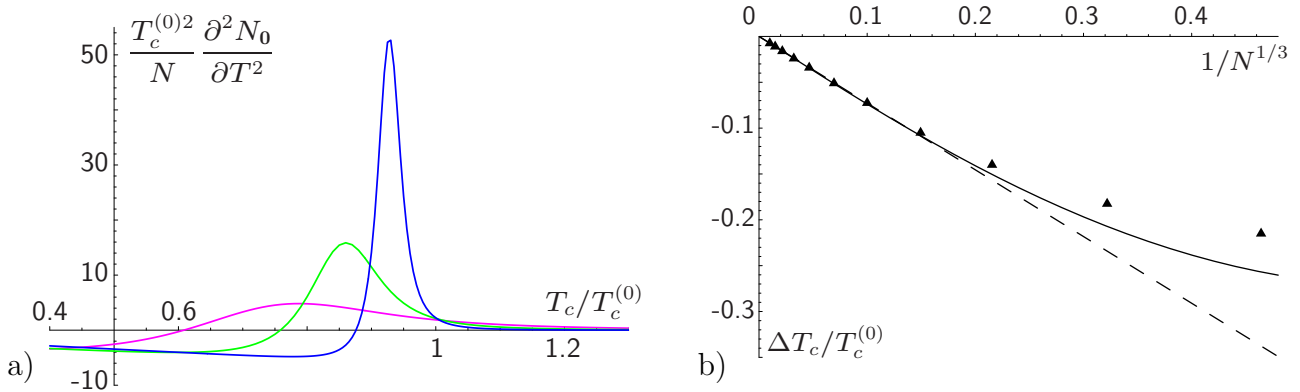


Abbildung 2.5: a) Krümmung der Kurven für die Teilchenzahl im Grundzustand aus Abb. 2.4 a) für $N = 10$ (rosa), 100 (grün) und 1000 (blau) Teilchen. b) Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem thermodynamischen Limes $\Delta T_c/T_c^{(0)} = t_c - 1$. Die gestrichelte Gerade ist das Resultat 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

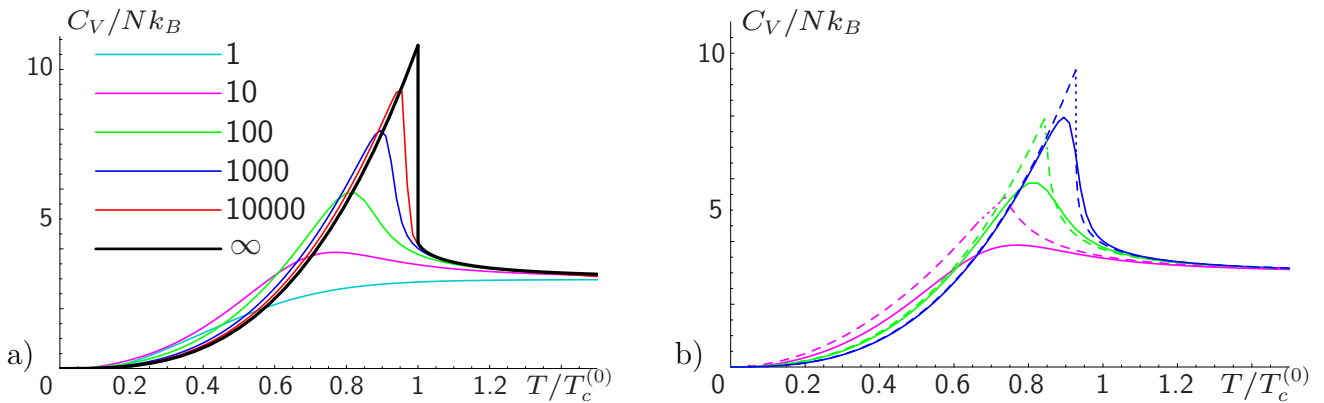


Abbildung 2.6: Wärmekapazität pro Teilchen in einer isotropen Falle a) für $N = 1, 10, 100, 1000$ und 10000 Teilchen nach der exakten großkanonischen Rechnung im Vergleich zum thermodynamischen Limes aus Abb. 2.3. b) Vergleich der Wärmekapazität aus exakter Rechnung (durchgezogene Kurven) mit der ersten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

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):

$$N = \tau_c^{3/2} \zeta_{3/2}(e^{-9\pi/4\tau_c}) + \frac{3\tau_c}{2} \left[2 \zeta_1(e^{-6\pi/4\tau_c}) - 3 \zeta_1(e^{-9\pi/4\tau_c}) \right] \\ + \frac{3\tau_c^{1/2}}{4} \left[4 \zeta_{1/2}(e^{-3\pi/4\tau_c}) - 12 \zeta_{1/2}(e^{-6\pi/4\tau_c}) + (4\pi + 9) \zeta_{1/2}(e^{-9\pi/4\tau_c}) \right] + \mathcal{O}(\tau_c^0). \quad (2.197)$$

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

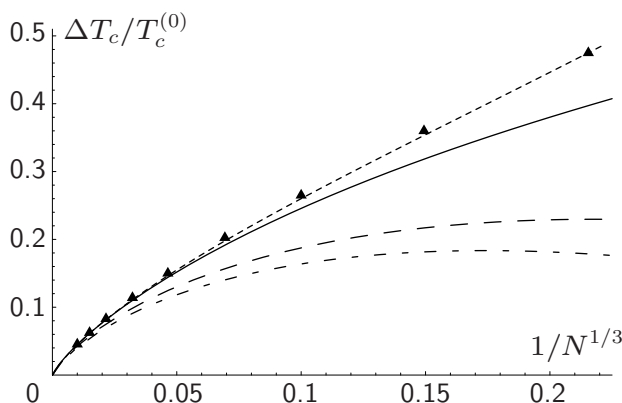


Abbildung 2.7: Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem Wert im thermodynamischen Limes $\Delta T_c/T_c^{(0)} = t_c - 1$ in Abhängigkeit der mittleren Teilchenzahl N . Die lang gestrichelte Kurve entspricht dem Resultat erster Ordnung in $1/N^{1/3}$ aus (2.202) und die durchgezogene Kurve 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

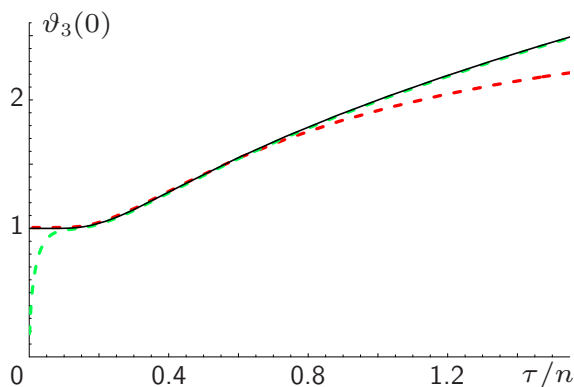


Abbildung 2.8: Jacobische (elliptische) Theta-Funktion $\vartheta_3(0, e^{-n\pi/4\tau})$ in Abhängigkeit vom Parameter τ/n (schwarze durchgezogene Kurve). Die rote gestrichelte Kurve repräsentiert die niedrigste Approximation $1 + 2e^{-n\pi/4\tau}$ aus (2.205). Die grüne gestrichelte Kurve entspricht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

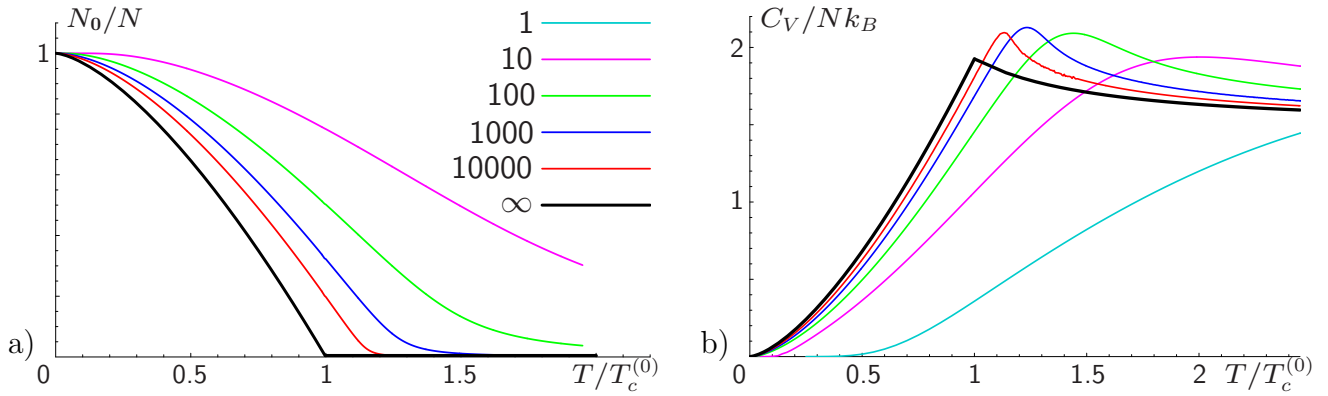


Abbildung 2.9: a) Anteil der Teilchen im Grundzustand im Kastenpotential (2.171) mit Dirichletschen Randbedingungen für verschiedene Teilchenzahlen N in Abhängigkeit der reduzierten Temperatur. b) Wärmekapazität pro Teilchen für Systeme wie in a). Die schwarzen Kurven sind Resultate im thermodynamischen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

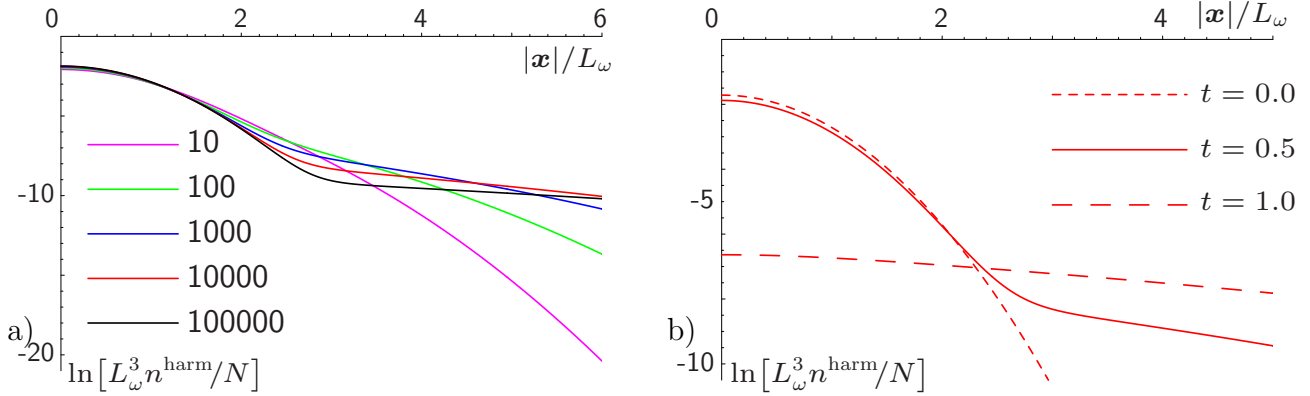


Abbildung 2.10: a) Logarithmischer Plot der Dichte in einer isotropen harmonischen Falle in Abhängigkeit des reduzierten Radius $|x|/L_\omega = \sqrt{M\omega/\hbar} |x|$ nach (2.219). Die Kurven repräsentieren die Situation für Ensembles aus $N = 10, \dots, 100.000$ Teilchen und die reduzierte Temperatur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

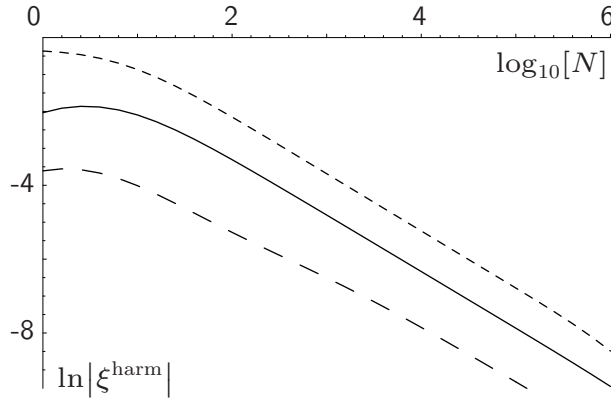


Abbildung 2.11: Doppellogarithmisches Plot der relativen Gewichte der thermisch angeregten Teilchen ξ^{harm} aus (2.223) in Abhängigkeit der Ensemble-Größe N . Die lang gestrichelte Kurve ist für den relativen Abstand $|\mathbf{x}|/L_\omega = 0.5$ ausgerechnet, die durchgezogene für $|\mathbf{x}|/L_\omega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

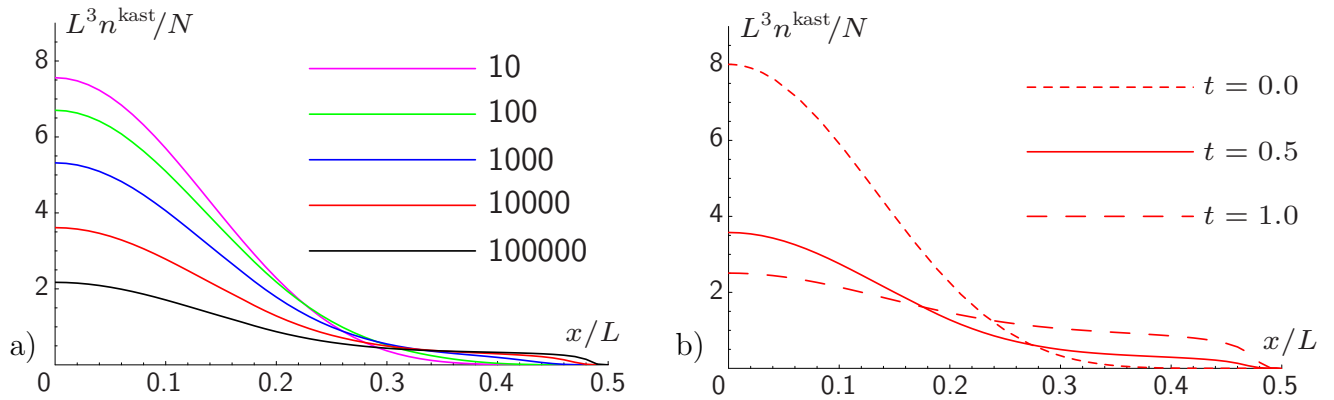


Abbildung 2.12: a) Plot der Dichte im Kastenpotential auf der Hauptdiagonale $\mathbf{x} = (x, x, x)$ in Abhängigkeit des Abstandes x vom Kastenzentrum in Einheiten der Kastenlänge L nach (2.229). Die Kurven repräsentieren die Situation für Ensembles aus $N = 10, \dots, 100.000$ Teilchen und die reduzierte 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 verschwindender 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

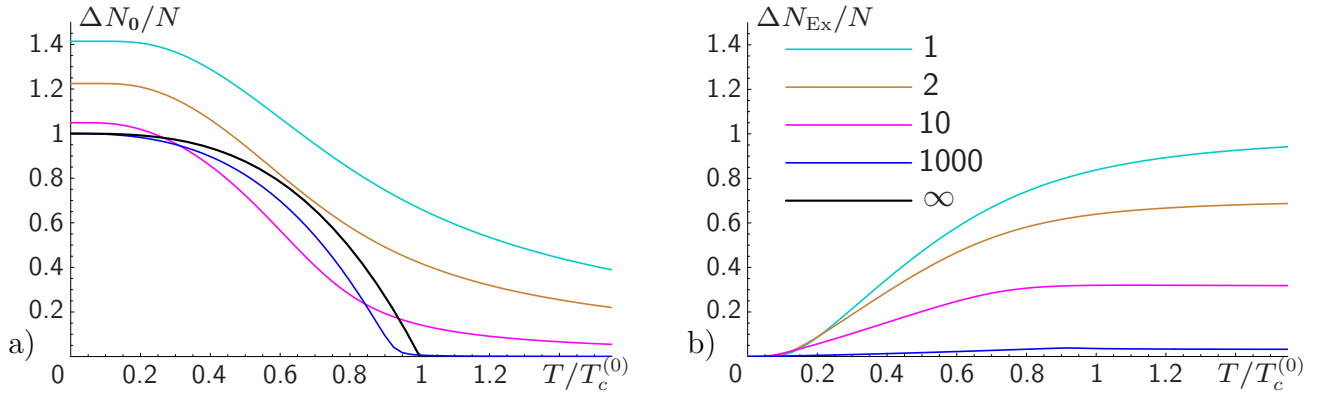


Abbildung 2.13: a) Teilchenzahlfluktuation im Grundzustand einer harmonischen Falle in Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur für verschiedene Teilchenzahlen $N = 1, 2, 10, 1000$ und im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$. b) Wie in a), aber für die angeregten Teilchen.

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 insensitive 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.

Kapitel 3

Ideale Bose-Gase im kanonischen Ensemble

In diesem Kapitel beschreiben wir wechselwirkungsfreie bosonische Systeme bestehend aus einer von Anfang an fest vorgegebenen Anzahl an Teilchen. Dies geschieht im Rahmen der kanonischen Ensembletheorie. Als theoretischer Unterbau dient uns hierbei der Feynmansche Pfadintegralformalismus [51,72], den wir zuerst für das Beispiel eines einzigen Teilchens einführen. Seine Verallgemeinerung auf Vielteilchen-Systeme ist unmittelbar ersichtlich, das Konzept der Ununterscheidbarkeit der Bosone muss dabei allerdings explizit berücksichtigt werden.

Die wichtigste Größe für Untersuchungen dieses Kapitels wird die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme sein, die wir am Anfang des Abschnitts 3.1 angeben. Nach Einführung des Pfadintegral-Formalismus im Unterabschnitt 3.1.1 lässt sich die N -Teilchen-Zustandssumme im Abschnitt 3.1.2 als eine Kombination von periodischen Orbits darstellen, die sich um den so genannten Feynmanschen Imaginärzeit-Zylinder des Umfangs $\hbar\beta$ herumwinden [43]. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der einzelnen Teilchen ergeben sich jedoch periodische Bahnen mit nicht-trivialen Periodizitäten, die als Mehrfach-Zyklen bezeichnet werden. Sie lassen sich als korrelierte Verbände interpretieren, die zur Bose-Einstein-Kondensation führen. Da die im Unterabschnitt 3.1.2) direkt hergeleitete Formel für die N -Teilchen-Zustandssumme für konkrete Berechnungen unpraktikabel ist, muss sie noch umgeschrieben werden. Die Lösung dieses Problems wird im Unterabschnitt 3.1.3 mit Hilfe des in Ref. [73] vorgestellten Verfahrens in Form einer Rekursionsbeziehung gefunden. Darauf aufbauend, wird im Unterabschnitt 3.1.4 die Bestimmungsgleichung für die Grundzustand-Besetzung in einem kanonischen Ensemble angegeben. Weiterhin wird im Unterabschnitt 3.1.5 die Greens-Funktion in einem N -Teilchen-Ensemble hergeleitet.

Nach diesen theoretischen Vorbereitungen gehen wir im Abschnitt 3.2) zu Berechnungen der Wärmekapazität und der Grundzustand-Besetzung in konkreten Systemen über. Dabei beginnen wir im Unterabschnitt 3.2.1 mit dem Modell eines homogenen Gases, wie es in der Originalarbeit von Feynman studiert wurde [43]. Die direkte Auswertung zeigt jedoch ein unphysikalisches Verhalten sowohl für die Wärmekapazität als auch für den Anteil der kondensierten Teilchen. Diese Problematik wird hier durch eine leichte Modifikation des homogenen Modells behoben, die wir in der Publikation [42] vorgeschlagen haben. In anschließenden Unterabschnitten 3.2.2 und 3.2.3

behandeln wir das Problem des idealen Bose-Gases im Kastenpotential mit Dirichletschen Randbedingungen sowie in einer harmonischen Falle. Darin finden wir, dass die Wärmekapazität, die Grundzustand-Besetzung sowie die Teilchendichte sich im kanonischen Ensemble nur geringfügig von entsprechenden Ergebnissen im großkanonischen Ensemble unterscheiden, und das umso weniger, je größer die Teilchenzahl ist.

Im Anschluss daran untersuchen wir im Abschnitt 3.3 die Möglichkeit, kanonischen Resultate aus den entsprechenden großkanonischen durch die so genannte Sattelpunkts-Entwicklung zu gewinnen. Dabei stellen wir jedoch fest, dass sich dieses Vorhaben, mal abgesehen von der Berechnung in der führenden Ordnung, als nicht praktikabel herausstellt. Das zeugt von einer nicht-trivialen Verknüpfung zwischen der kanonischen und großkanonischen Ensemble-Theorie. Um diesen Eindruck noch weiter zu untermauern, diskutieren wir zum Abschluss dieses Kapitels im Abschnitt 3.4) die Teilchenzahl-Fluktuationen und die Teilchenzahl-Statistik im Grundzustand für Bose-Gase im kanonischen Ensemble. Wie am Ende des letzten Kapitels erwartet, stellen sich diese Größen im kanonischen Ensemble als physikalisch sinnvoll heraus. Damit bieten sie eine qualitative Verbesserung gegenüber den entsprechenden großkanonischen Resultaten, die man direkt aus der Bose-Einstein-Verteilung erhält.

3.1 Kanonische Beschreibung

In diesem Abschnitt stellen wir das Konzept der kanonischen Beschreibung für Vielteilchensysteme mit einer festen Teilchenzahl N vor. Unser Ziel ist es, für ein solches System die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme

$$Z_N \equiv \text{Tr}_N e^{-\beta \hat{H}_N} . \quad (3.1)$$

zu berechnen. Dabei ist \hat{H}_N der N -Teilchen-Hamilton-Operator, der von den Orts- und Impulsoperatoren $\hat{\mathbf{x}}_i$ und $\hat{\mathbf{p}}_i$ einzelner Teilchen abhängt und speziell im wechselwirkungsfreien Fall wie

$$\hat{H}_N(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N, \hat{\mathbf{p}}_N) = \sum_i \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i) = \sum_i \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2M} + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}_i) \right] \quad (3.2)$$

separiert, wobei M die Masse eines einzelnen Teilchens und $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}}_i)$ den Operator der lokalen potentiellen Energie für das i -te Teilchen darstellt. Weiterhin stellt der Ausdruck Tr_N in (3.1) die Operation der Spurbildung über die N -Teilchen-Zustände dar.

Anders als bei der zweitquantisierten feldtheoretischen Beschreibung im Abschnitt 2.1 wählen wir diesmal für die Vielteilchenzustände die erstquantisierte Version. Das heißt, wir verzichten auf die Angabe der Teilchenzahlen an jedem Ort des Raumes wie für den Zustand in (2.5). Diese Angabe wäre nämlich hier mit der Nebenbedingung der konstanten Gesamtteilchenzahl N zu vervollständigen, deren explizite Implementierung unpraktikabel für die nachfolgenden Berechnungen wäre. In der erstquantisierten Beschreibung greifen wir stattdessen z.B. auf einen N -Teilchenzustand im Ortsraum $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$ zurück, bei dem sich das erste Teilchen am Ort \mathbf{x}_1 aufhält, das zweite am Ort \mathbf{x}_2 usw. Diese Zustände bilden ein vollständiges Basissystem mit der entsprechenden

Vollständigkeitsrelation im $3N$ -dimensionalen Ortsraum

$$\int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle \langle \mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1| = \mathbb{1}_N, \quad (3.3)$$

wobei $\mathbb{1}_N$ das Eins-Element auf dem N -Teilchen-Sektor des Fock-Raumes bedeutet. Diese Zustände können als orthonormal entsprechend der Beziehung

$$\langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle = \delta(\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}_1) \delta(\mathbf{x}'_2 - \mathbf{x}_2) \dots \delta(\mathbf{x}'_N - \mathbf{x}_N) \quad (3.4)$$

gewählt werden.

Mit dieser Basis lässt sich die N -Teilchen-Zustandssumme (3.1) etwas konkreter als Integral

$$Z_N = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N \langle \mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | e^{-\beta \hat{H}_N} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle \quad (3.5)$$

ausschreiben. Das Matrixelement darin ist ein Spezialfall der so genannten Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a) \equiv \langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | e^{-\hat{H}_N(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle, \quad (3.6)$$

in der τ_a und τ_b die Imaginärzeiten des Ausgangs- bzw. Endzustandes bedeuten (das Konzept der Imaginärzeit wurde im Abschnitt 2.1 erläutert). Die Zustandssumme (3.5) wird daraus bei $\tau_a = 0$ und $\tau_b = \hbar\beta$ ausgewertet und lautet

$$Z_N(\beta) = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; 0). \quad (3.7)$$

An dieser Stelle sei noch bemerkt, dass bei der obigen Beschreibung jedes Teilchen durch den Index i durchnummeriert wurde. Deswegen sichert sie noch nicht die physikalisch gegebene Ununterscheidbarkeit der einzelnen Teilchen. Diese soll sich für Bosonen in einer Symmetrie der Zustände bezüglich der Vertauschung zweier beliebiger Teilchen äußern. Im Gegensatz dazu würde eine solche Vertauschung für Fermionen ein Vorzeichenwechsel des gesamten Zustandes verursachen (Antisymmetrie). Des weiteren beschränken wir uns auf Beschreibungen bosonischer Ensembles und schreiben dafür die total symmetrisierten N -Teilchen-Ortszustände

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \equiv \frac{1}{N!} \sum_P |\mathbf{x}_{P(1)}, \mathbf{x}_{P(2)}, \dots, \mathbf{x}_{P(N)}\rangle. \quad (3.8)$$

Der Index B dient darin der Unterscheidung bosonischer Zustände von denjenigen aus N klassisch unterscheidbaren Teilchen. Die Summe in (3.8) läuft über alle $N!$ Permutationen P der Zahlen $1, 2, \dots, N$ und $p(P)$ bezeichnet deren Parität. Durch die Schreibweise (3.8) wird die Symmetrie gegenüber beliebigen Vertauschungen zweier Teilchenzustände automatisch erfüllt, weil eine Vertauschung der Permutationen die Permutations-Menge selbst nicht ändert. Es sei an dieser Stelle noch erwähnt, dass die symmetrisierten Zustände (3.8) vollständig sind und der zu (3.3) analogen Vollständigkeitsrelation

$$\int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \langle \mathbf{x}_N, \dots, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1|^B = \mathbb{1}_N^B \quad (3.9)$$

genügen, wobei 1_N^B die Identität im entsprechenden Zustands-Raum darstellt.

In Analogie zur Imaginärzeit-Amplitude (3.6) lässt sich auch ihre symmetrisierte Version für bosonische Ensembles definieren. Dafür muss man lediglich als Ortszustände ihre Pendantes aus (3.8) verwenden:

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B \equiv {}^B \langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1 | e^{-\hat{H}_N(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle^B. \quad (3.10)$$

Mit (3.8) explizit ausgeschrieben liefert das nach einer Umsortierung der Anfangsorte

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B &= \frac{1}{(N!)^2} \sum_{P'} \sum_{P''} \langle \mathbf{x}'_{P''P'(N)}, \dots, \mathbf{x}'_{P''P'(2)}, \mathbf{x}'_{P''P'(1)} | \\ &\times e^{-\hat{H}_N(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \rangle. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Bemerken wir an dieser Stelle, dass das Produkt zweier Permutationen entsprechend $P''P' = P$ wiederum eine Permutation ist. Dabei reduziert sich die Doppelsumme über P' und P'' auf eine einfache P -Summe multipliziert mit der Zahl $N!$ der Permutationen über einen Dummy-Index. Damit erhalten wir mit (3.6)

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B \equiv \frac{1}{N!} \sum_P (\mathbf{x}'_{P(N)}, \dots, \mathbf{x}'_{P(2)}, \mathbf{x}'_{P(1)}; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a). \quad (3.12)$$

Weiterhin bemerken wir noch, dass beliebige Vertauschungen der Orte in den Ausgangs- und End-Zuständen die bosonische Imaginärzeit-Amplitude nicht verändert. Diese Eigenschaft lässt sich mit zwei fixierten Permutationen P_1 und P_2 als

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}'_{P_1(1)}, \mathbf{x}'_{P_1(2)}, \dots, \mathbf{x}'_{P_1(N)}; \tau_b | \mathbf{x}_{P_2(1)}, \mathbf{x}_{P_2(2)}, \dots, \mathbf{x}_{P_2(N)}; \tau_a)^B \\ = (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a)^B \end{aligned} \quad (3.13)$$

hinschreiben und ist mit (3.8) unmittelbar aus der Definition (3.10) ersichtlich.

Um diesen Unterabschnitt abzuschließen, definieren wir noch die Zustandssumme für kanonische Ensembles aus N Bosonen. Sie ergibt sich mit der Imaginärzeit-Amplitude (3.12) in Analogie zu (3.7) als

$$Z_N^B(\beta) = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; 0)^B. \quad (3.14)$$

Die Imaginärzeit-Amplitude stellt im kanonischen Formalismus ein wichtiges theoretisches Konzept dar. Daher beschäftigen wir uns mit ihr im nächsten Unterabschnitt etwas eingehender und leiten ihre Pfadintegral-Darstellung her.

3.1.1 Pfadintegral-Darstellung der Imaginärzeit-Amplitude

Das Ziel dieses Unterabschnittes ist in erster Linie die Herleitung der Pfadintegral-Darstellung für die Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude. Das dient nicht nur einer Einführung in den Pfadintegral-Formalismus, sondern liefert auch ein dynamisches Bild für Imaginärzeit-Amplituden. Das wird

sich für spätere Untersuchungen als hilfreich erweisen. In der Herleitung halten wir uns weitestgehend an die Darstellung im Lehrbuch von Kleinert [51, Kapitel 2].

Den Ausdruck für die Imaginärzeit-Amplitude eines einzigen Teilchens erhalten wir aus der allgemeinen Form (3.6) zu

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) \equiv \langle \mathbf{x}' | e^{-\hat{H}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} | \mathbf{x} \rangle . \quad (3.15)$$

Als erstes bemerken wir, dass diese Größe die Dynamische Evolution des Anfangszustandes $|\mathbf{x}\rangle$ zum Endzustand $|\mathbf{x}'\rangle$ in der Imaginärzeit darstellt. Dies wird unmittelbar klar, wenn man das Imaginärzeit-Intervall (τ_a, τ_b) mit L Gitterplätzen in $L+1$ kleine Intervalle $\epsilon = (\tau_b - \tau_a)/(L+1)$ aufteilt und einen Gitterplatz nach dem anderen durchläuft. Die Zahl L der Imaginärzeit-Gitterplätze wird dabei so groß gewählt, dass ϵ als klein behandelt werden kann. Technisch wird die Gitterung des Imaginärzeitintervalls durch die Faktorisierung der Exponenten in (3.15) realisiert, so dass wir die Form

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \langle \mathbf{x}' | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} \underbrace{\mathbb{1}_1 e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} \dots \mathbb{1}_1 e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar}}_{L \text{ Faktoren}} | \mathbf{x} \rangle \quad (3.16)$$

erhalten. Da die Hamilton-Operatoren miteinander kommutieren, ist eine solche Zerlegung eine vorerst exakte Operation. Zwischen jeweils zwei Kurzzeit-Entwicklungen kann eine Vollständigkeitsrelation der Ortszustände (3.3) eingeschoben werden, die sich für ein einziges Teilchen auf $\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \mathbb{1}_1$ reduziert. Damit erhält man die Gitterversion der Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \prod_{j=1}^L \left[\int d^3x_j \right] \langle \mathbf{x}' | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_L \rangle \langle \mathbf{x}_L | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_{L-1} \rangle \dots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} | \mathbf{x} \rangle . \quad (3.17)$$

Demnach entwickelt sich der Zustand von einem imaginärzeitlichen Gitterplatz an einem bestimmten Ausgangsort zum nächsten Gitterplatz, wo es zwar einen beliebigen Ort erreichen kann, allerdings mit einer Wahrscheinlichkeits-Amplitude, die durch die Exponential-Funktion $e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar}$ vorgegeben wird. Genau diese Amplitude gilt es, im Folgenden zu berechnen.

Da die Ortszustände den Hamilton-Operator \hat{H} im allgemeinen nicht diagonalisieren, werden wir die Standard-Zerlegung

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) = \hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (3.18)$$

verwenden, wobei $\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})$ den kinetischen Energieoperator und $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})$ wie in (3.2) den Operator der potentiellen Energie darstellt. Der erste hängt nur vom Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ ab. Der zweite ist eine Funktion des Ortsoperators $\hat{\mathbf{x}}$ und wird daher von allen Ortszuständen diagonalisiert. Da die beiden Energieoperatoren nicht miteinander kommutieren, stellen wir fest, dass die Kurzzeit-Entwicklungs-Amplituden nicht exakt faktorisieren. Entsprechend der Baker-Campbell-Hausdorff-Beziehung (siehe z.B. [51, Kapitel2]) gilt aber näherungsweise

$$e^{-\epsilon \hat{H}/\hbar} = e^{-\epsilon \hat{T}(\hat{\mathbf{p}})/\hbar} e^{-\epsilon \hat{V}(\hat{\mathbf{x}})/\hbar} e^{\epsilon^2 [\hat{T}(\hat{\mathbf{p}}), \hat{V}(\hat{\mathbf{x}})]/2\hbar^2 + \dots} . \quad (3.19)$$

Da jedoch ϵ als klein angenommen wurde, reicht die Näherung niedrigster Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ für weitere Untersuchungen bereits aus, solange die Potentiale sanft genug sind. Um nun bei Berechnung

der Kurzzeit-Übergangsamplitude weiter voranzukommen, verwenden wir noch die Vollständigkeit der Impulszustände

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = \mathbb{1}_1 \quad (3.20)$$

und erhalten

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \int \frac{d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \langle\mathbf{x}_{j+1}|\mathbf{p}_j\rangle\langle\mathbf{p}_j|\mathbf{x}_j\rangle e^{-\epsilon\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})/\hbar} e^{-\epsilon\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})/\hbar} e^{\mathcal{O}(\epsilon^2)}. \quad (3.21)$$

Hierfür gelten noch folgende Eigenwertgleichungen: $\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})|\mathbf{p}_j\rangle = T(\mathbf{p}_j)|\mathbf{p}_j\rangle$ und $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x}_j\rangle = V(\mathbf{x}_j)|\mathbf{x}_j\rangle$, so dass sich die obige Identität weiter zu

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \int \frac{d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \langle\mathbf{x}_{j+1}|\mathbf{p}_j\rangle\langle\mathbf{p}_j|\mathbf{x}_j\rangle \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} [T(\mathbf{p}_j) + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)]\right\} \quad (3.22)$$

vereinfacht. Die noch übrig gebliebenen Skalarprodukte repräsentieren entsprechend der Beziehung $\langle\mathbf{p}_j|\mathbf{x}_j\rangle = e^{-i\mathbf{p}_j\mathbf{x}_j/\hbar}$ ebene Wellen. Damit ergibt sich für die Kurzzeit-Entwicklung

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \int \frac{d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} \left[-i\mathbf{p}_j \frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} + T(\mathbf{p}_j) + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)\right]\right\}. \quad (3.23)$$

An dieser Stelle können wir uns noch an die explizite Form der nichtrelativistischen kinetischen Energie $T(\mathbf{p}_j) = \mathbf{p}_j^2/2M$ erinnern, wie wir sie in (3.2) in Operatorform ausgeschrieben haben. Damit lässt sich die Impulsintegration in (3.23) explizit auswerten mit dem Resultat

$$\langle\mathbf{x}_{j+1}| e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} |\mathbf{x}_j\rangle = \left(\frac{M}{2\pi\hbar\epsilon}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} \left[-\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}\right)^2 + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)\right]\right\}. \quad (3.24)$$

Das ist bereits der Ausdruck, der die Wahrscheinlichkeits-Amplitude angibt, das Teilchen am Orte \mathbf{x}_{j+1} zu finden, falls es sich auf dem vorherigen Imaginärzeit-Gitterpunkt am Orte \mathbf{x}_j aufhielt.

Diese gerade ausgerechnete Kurzzeit-Entwicklungsamplitude setzen wir nun in den Ausdruck (3.17) ein. Aus Darstellungs-Gründen empfiehlt es sich noch, den Anfangsort \mathbf{x} explizit mit \mathbf{x}_0 und den Endort \mathbf{x}' mit \mathbf{x}_{L+1} zu identifizieren. Dafür schreiben wir (3.17) als Produkt von $L+2$ Integralen:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) &= \prod_{j=1}^L \left[\int \frac{d^3 x_j}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \int \frac{d^3 x_0 d^3 x_{L+1}}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}_{L+1} - \mathbf{x}') \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^L \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon}\right)^2 + V(\mathbf{x}_j) + \mathcal{O}(\epsilon)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Das ist die gesuchte gegitterte Form der Imaginärzeit-Entwicklungs-Amplitude (3.15). Der Kontinuums-Limes $\epsilon \rightarrow 0$ bzw. $L \rightarrow \infty$ lässt sich sofort durchführen, indem man die Ersetzung

$\mathbf{x}_j \mapsto \mathbf{x}(\tau)$ vornimmt und die Randpunkte als $\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{x}(\tau_a)$ und $\mathbf{x}_{L+1} \mapsto \mathbf{x}(\tau_b)$ bezeichnet. Der Differenzen-Quotient im Exponenten von (3.25) muss dann durch die zeitliche Ableitung

$$\frac{\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j}{\epsilon} \mapsto \frac{\partial \mathbf{x}(\tau)}{\partial \tau} \equiv \dot{\mathbf{x}}(\tau) \quad (3.26)$$

und die Summe über die Imaginärzeit-Gitterplätze durch das Integral

$$\epsilon \sum_{j=0}^L \mapsto \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \quad (3.27)$$

ersetzt werden. Das Produkt über die Raumintegrationen für jeden Gitterplatz in (3.25) wird im Kontinuumlimes außerdem noch durch das so genannte Pfadintegral

$$\prod_{j=1}^L \left[\int \frac{d^3 x_j}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \int \frac{d^3 x_0 d^3 x_{L+1}}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \delta(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}_{L+1} - \mathbf{x}') \mapsto \int_{\mathbf{x}(\tau_a)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\tau_b)=\mathbf{x}'} \mathcal{D}^3 x(\tau) \quad (3.28)$$

dargestellt. Fassen wir nun (3.26)–(3.28) zusammen und vernachlässigen Terme der höheren Ordnung $\epsilon\mathcal{O}(\epsilon)$ im Exponenten von (3.25), so erhalten wir die kontinuierliche Pfadintegral-Darstellung der Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \int_{\mathbf{x}(\tau_a)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\tau_b)=\mathbf{x}'} \mathcal{D}^3 x(\tau) e^{-\mathcal{A}[\mathbf{x}]/\hbar}, \quad (3.29)$$

wobei wir mit \mathcal{A} die Euklidische Wirkung im Konfigurationsraum

$$\mathcal{A}[\mathbf{x}] \equiv \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V(\mathbf{x}(\tau)) \right] \quad (3.30)$$

bezeichnet haben. Zu bemerken ist an dieser Stelle, dass die obige Argumentation nur für genügend sanfte Potentiale $V(x)$ möglich ist. Ein Coulomb-Potential $\sim 1/|\mathbf{x}|$ gehört beispielsweise nicht dazu und muss anders behandelt werden [51, Kapitel 12]. Für unsere weitere Untersuchungen werden derartige Probleme aber keine Rolle spielen.

Nun kommen wir zu den Eigenschaften der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude, die auch für spätere Berechnungen wichtig sind. Dazu zählt in erster Linie die so genannte Semigruppen-Eigenschaft, die der so genannten Chapman-Kolmogorov-Eigenschaft der Statistik entspricht. Diese erhalten wir, indem wir z.B. Zerlegung (3.17) mit nur einem Gitterpunkt ($L = 1$) verwenden, den wir allerdings an einem beliebigen Imaginärzeit-Punkt legen (die Äquidistanz der Imaginärzeit-Gitterung war in der obigen Rechnung nicht entscheidend, sondern nur buchhalterisch bequemer). Das ergibt also

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) &= \int d^3 x'' \langle \mathbf{x}' | e^{-(\tau_b - \tau_c)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | e^{-(\tau_c - \tau_a)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x} \rangle \\ &= \int d^3 x'' (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}'', \tau_c) (\mathbf{x}'', \tau_c | \mathbf{x}, \tau_a). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Die weitere Eigenschaft hat mit der Unabhängigkeit des Hamilton-Operators von der Imaginärzeit zu tun und damit, dass in der Formel (3.15) nur die Differenz der Imaginärzeiten vorkommt. Daraus resultiert die Translations-Invarianz der Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = (\mathbf{x}', \tau_b + \tau | \mathbf{x}, \tau_a + \tau) \quad (3.32)$$

mit einer beliebigen Imaginärzeit-Verschiebung τ .

Um das Problem der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude abzuschließen, geben wir noch an dieser Stelle seine Spektral-Darstellung an. Dafür verwenden wir die Energie-Eigenzustände $|\mathbf{k}\rangle$, welche die Ein-Teilchen-Schrödingergleichung

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) |\mathbf{k}\rangle = E_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \quad (3.33)$$

lösen. Diese Zustände erfüllen dann die Vollständigkeitsrelation $\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| = \mathbb{1}_1$ und können als zueinander orthonormal gewählt werden entsprechend der Beziehung $\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$. Damit ergibt sich nach (3.15)

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k} \rangle e^{-E_{\mathbf{k}}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle \equiv \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') e^{-E_{\mathbf{k}}(\tau_b - \tau_a)/\hbar} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) , \quad (3.34)$$

wobei die Projektion des Energiezustandes auf den Ortszustand entsprechend der Gleichung $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \equiv \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ die Wellenfunktion liefert. Letztere haben wir bereits am Anfang des Abschnitts 2.1.2 eingeführt.

Der oben behandelte Spezialfall eines einzigen Teilchens kann noch auf N -Teilchen-Zustände problemlos verallgemeinert werden. So ergibt sich für die N -Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.6) mit dem Hamilton-Operator (3.2) in völliger Analogie zum oben behandelten Ein-Teilchen-Fall die seine Pfadintegral-Darstellung

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a) = \prod_{n=1}^N \left[\int_{\mathbf{x}_n(\tau_a) = \mathbf{x}_n}^{\mathbf{x}_n(\tau_b) = \mathbf{x}'_n} \mathcal{D}^3 x_n(\tau) \right] e^{-\mathcal{A}_N[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N]/\hbar} . \quad (3.35)$$

Die darin vorkommenden N -Teilchen-Pfadkonfigurationen werden durch die Euklidische N -Teilchen-Wirkung gewichtet, die sich im wechselwirkungsfreien Fall rein additiv aus den Wirkungen (3.30) für einzelne Teilchen zusammensetzt:

$$\mathcal{A}_N[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N] \equiv \sum_{n=1}^N \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}_n^2(\tau) + V(\mathbf{x}_n(\tau)) \right] . \quad (3.36)$$

Dies ist eine Folge der Separation des wechselwirkungsfreien Hamilton-Operators (3.2). Unmittelbar daraus folgt die Faktorisierungs-Eigenschaft der N -Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude in N einzelne Amplituden (3.29)

$$(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \tau_a) = (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) (\mathbf{x}'_2; \tau_b | \mathbf{x}_2; \tau_a) \dots (\mathbf{x}'_N; \tau_b | \mathbf{x}_N; \tau_a) . \quad (3.37)$$

Ausgehend von diesem Resultat sind wir in der Lage, die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme nach der Gleichung (3.14) herzuleiten. Genau dieser Aufgabe widmen wir uns im nächsten Unterabschnitt.

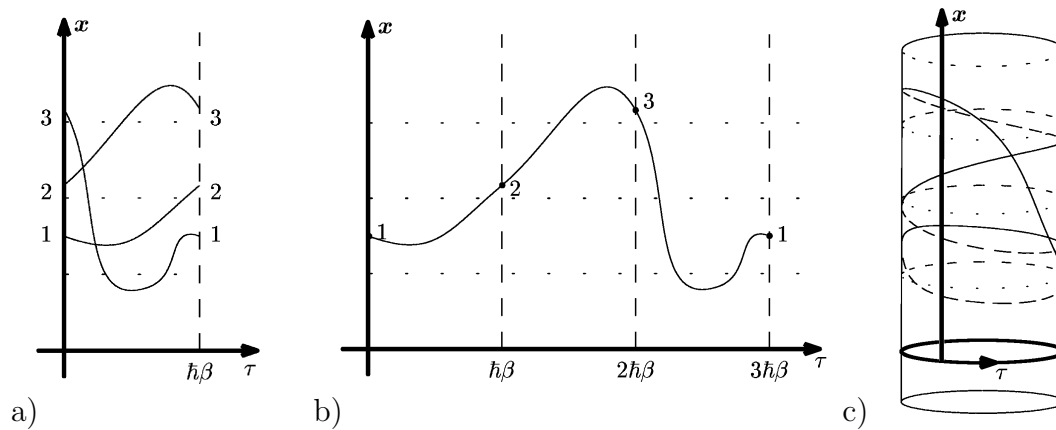


Abbildung 3.1: Verlauf der drei Teilchenpfade a) in der normalen Darstellung innerhalb einer Periode, b) in periodisch fortgesetzter Darstellung und c) aufgewickelt auf einem Imaginärzeit-Zylinder mit Kreisumfang $\hbar\beta$.

3.1.2 Kanonische Zustandssumme

In diesem Abschnitt berechnen wir die Zustandssumme in einem Ensemble aus N Bosonen. Obwohl für die Zustandssumme nur die geschlossenen periodischen Pfade berücksichtigt werden, verursacht die Ununterscheidbarkeit der betreffenden Teilchen kompliziertere Pfadkonfigurationen, welche sich dennoch zu einem geschlossenen Ausdruck für die N -Teilchen-Zustandssumme kombinieren lassen. Das zeigen wir in der anschließenden Diskussion, in der wir uns an die grobe Struktur der Darstellung im Feinmans Textbuch [43] orientieren (siehe auch [42,74]).

Als erstes berechnen wir die Zustandssumme eines Teilchens, die sich als Spezialfall der Gleichung (3.7) zu

$$Z_1(\beta) = \int d^3x (\mathbf{x}; \hbar\beta | \mathbf{x}; 0) \quad (3.38)$$

ergibt. Dieses Resultat hätten wir natürlich auch aus der Gleichung (3.14) entnehmen können, da es bei einem einzigen Teilchen egal ist, ob es ein Boson, Fermion oder gar ein klassisch unterscheidbares Teilchen ist, erübrigt sich auch die Unterscheidung zwischen diesen verschiedenen Möglichkeiten. Damit wird weiterhin der entsprechende Index B unterdrückt. Nun schreiten wir fort, indem wir uns an die Spektral-Darstellung der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.34) erinnern. Die Ortsintegration in (3.38) führt dann aufgrund der Orthonormalitäts-Beziehung (2.37) zum folgenden Resultat:

$$Z_1(\beta) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}} . \quad (3.39)$$

Eine Verallgemeinerung der Zustandssumme auf N klassische unterscheidbare Teilchen ist unmittelbar einsichtig und liefert nach (3.7) mit der Faktorisierungs-Eigenschaft (3.37) das klassische

Resultat

$$Z_N(\beta) = \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) \dots (\mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}_N; 0) = Z_1^N(\beta) . \quad (3.40)$$

Ganz anders ist es, wenn die Teilchen identisch sind. Für sie ergibt sich aus (3.14) mit (3.12) lediglich eine kompliziertere Integral-Darstellung, die wir nach Faktorisierung (3.37) zu

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_{P(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) (\mathbf{x}_{P(2)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) \dots (\mathbf{x}_{P(N)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_N; 0) \quad (3.41)$$

erhalten. Die Auswertung dieser Größe ist keineswegs trivial und bedarf noch weiterer Ausführungen. Obwohl uns für die Zustandssumme lediglich periodische N -Teilchen-Pfade interessieren, sind die einzelnen Perioden nur für die triviale identische Permutation so einfach wie in (3.40). Im allgemeinen sind die Zyklen verschieden lang und variieren je nach Permutation P . Dieser Umstand kann mit Abb. 3.1 verdeutlicht werden. Dort ist der Pfad eines Teilchens abgebildet, der zur Zeit $\tau = \hbar\beta$ nicht an seinem Startpunkt landet, sondern an dem Startpunkt eines zweiten Teilchens. Das zweite Teilchen landet am Startpunkt des dritten, und das dritte landet am Startpunkt des ersten. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit einzelner Teilchen ist die Drei-Teilchen-Konfiguration zur Imaginärzeit $\tau = \hbar\beta$ physikalisch gesehen dieselbe wie die zu $\tau = 0$ und muss für die Zustandssumme mitberücksichtigt werden. Interessanterweise entspricht eine solche Konfiguration einem einzelnen periodischen Pfad mit der dreifachen Periode, der in Abb. 3.1 b) angedeutet ist. In Abb. c) ist derselbe Pfad auf dem Feynmanschen Imaginärzeit-Zylinder als ein dreifacher Zyklus abgebildet. Im allgemeinen lässt sich der Beitrag eines geschlossenen Zyklus der Länge n zur N -Teilchen-Zustandssumme (3.41) in der Form

$$h_n(\beta) \equiv \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_n (\mathbf{x}_1; \hbar\beta | \mathbf{x}_n; 0) \dots (\mathbf{x}_3; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) \quad (3.42)$$

angeben. Das erste Teilchen startet dabei am Ort \mathbf{x}_1 und geht zu \mathbf{x}_2 , das zweite startet bei \mathbf{x}_2 und geht zu \mathbf{x}_3 und so weiter bis das letzte n -te Teilchen am Ort \mathbf{x}_n beginnt und am Ort \mathbf{x}_1 endet, womit sich der Zyklus nach n Perioden schließt. Sein Beitrag (3.42) kann noch mit Hilfe der Zeittranslations-Invarianz (3.32) zu

$$h_n(\beta) \equiv \int d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_n (\mathbf{x}_1; n\hbar\beta | \mathbf{x}_n; (n-1)\hbar\beta) \dots (\mathbf{x}_3; 2\hbar\beta | \mathbf{x}_2; \hbar\beta) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) \quad (3.43)$$

umgeschrieben werden. Die anschließende $(n-1)$ -fache Anwendung der Gruppen-Eigenschaft (3.31) reduziert diesen Ausdruck weiterhin zu

$$h_n(\beta) = \int d^3x_1 (\mathbf{x}_1; n\hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) = Z_1(n\beta) . \quad (3.44)$$

Die letzte Identität folgt unmittelbar aus der Gleichung (3.38) für die Zustandssumme eines Teilchens mit der reziproken Temperatur $n\beta$. Aus der Spektral-Darstellung (3.39) ergibt sich damit

$$Z_1(n\beta) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta(nE_{\mathbf{k}})} \quad (3.45)$$

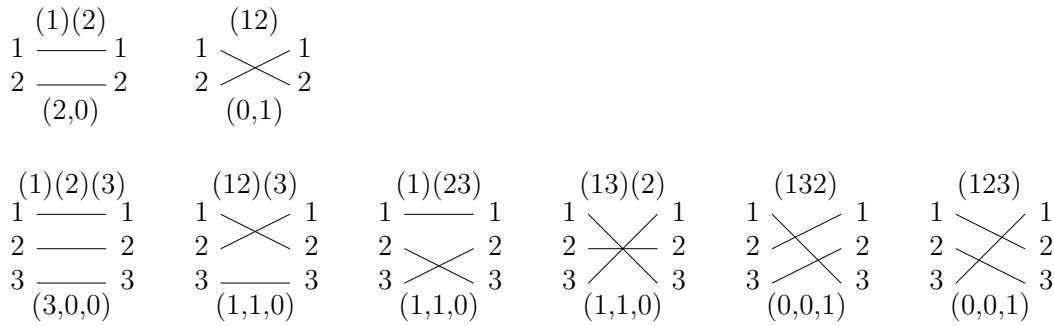


Abbildung 3.2: Darstellung aller Permutationen für zwei (obere Reihe) und drei (untere Reihe) Teilchen. Die Indizierung oberhalb jeder Permutation beschreibt diese in der Blockschreibweise. Die zweier- bzw. dreier-Tupeln darunter beschreiben die jeweiligen Permutationen in der Zykluslängen-Darstellung durch die Tupeln (C_1, C_2) bzw. (C_1, C_2, C_3) .

und wir sehen noch eine weitere Interpretations-Möglichkeit eines n -fachen Zyklus. Die Größe (3.45) entspricht nämlich der Zustandssumme eines einzigen Quasiteilchens, dessen Energie-Eigenwerte die n -fachen Energien der realen Teilchen sind. Dieses Quasiteilchen verhält sich dann wie ein korrelierter n -Teilchen-Verband. Eine Energiefluktuation kann entweder seine Energie um eine n -fache Portion eines einzelnen Teilchens verändern oder den Verband als solchen umstrukturieren (einzelne Teilchen entreißen oder hinzufügen). Die Energie-änderung nur eines der n darin befindlichen Teilchen ist aber nicht möglich.

An dieser Stelle kehren wir zurück zum ursprünglichen Problem der N -Teilchen-Zustandssumme (3.41). Nach dem oben Besagten sehen wir, dass ihre verschiedene Permutationen zu unterschiedlichen Zyklen-Zerlegungen führen, was wir in der Form

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P \prod_{n=1}^{(\sum nC_n=N)} [Z_1(n,\beta)]^{C_n} \quad (3.46)$$

zusammenfassen. Dabei bedeutet C_n die Anzahl der n -Zyklen, so dass nC_n aller Teilchen in solchen n -Zyklen eingebunden sind. Die Gesamtteilchenzahl N ist damit auf alle solche Zyklen zu verteilen. Das ergibt die Nebenbedingung $\sum_n nC_n = N$ für die möglichen Zerlegungen, was mit der runden Klammer über dem Produktzeichen in (3.46) angedeutet wurde. Eine weitere Berechnung scheint zuerst aussichtslos zu sein, insbesondere wenn man bedenkt, dass die Anzahl aller zu berücksichtigenden Permutationen in einem N -Teilchen-Ensemble $N!$ beträgt und somit extrem schnell mit der Teilchenzahl anwächst. Die im Folgenden geschilderte Betrachtung schafft gerade in dieser Situation Abhilfe.

Zuerst vergegenwärtigen wir uns der Komplexität der durch die Ununterscheidbarkeit entstandenen Pfad-Strukturen anhand der Permutations-Gruppen für Ensembles aus zwei und drei Teilchen. Diese sind in Abb. 3.2 dargestellt. In einem Zwei-Teilchen-Ensemble werden sie durch $2! = 2$ verschiedene Kombinationen repräsentiert, in einem Drei-Teilchen-Ensemble schon durch $3! = 6$ solcher. Alle diese Kombinationen entsprechen den im mathematischen Sinne verschiedenen Permutationen. Sie können durch die Block-Schreibweise dargestellt werden, indem die darin vor-

kommenden abgeschlossene Zyklen in voneinander getrennten Blöcken zusammengefasst werden. In jedem einzelnen Block werden die Teilchennummern der Reihenfolge nach aufgeführt. Diese Schreibweise kann noch anhand der Beispiele aus Abb. 3.2 verdeutlicht werden, in denen sie über der jeweiligen Permutation dargestellt ist. Bei einer solchen Beschreibung wurde allerdings jedem Teilchen eine Nummer zugeordnet, und so wurde z.B. die zweite Kombination in der zweiten Reihe aus Abb. 3.2 von der dritten und vierten unterschieden. Auch die vorletzte Kombination wurde von einer anderen Permutation dargestellt als die letzte. Doch bei ununterscheidbaren Teilchen darf es auf die Teilchen-Nummerierung nicht ankommen. Physikalisch voneinander zu unterscheiden sind lediglich Permutationen, bei denen die Zykluslängen verschieden sind. So sind beispielsweise die ersten Zyklus-Strukturen in jeder Reihe aus Abb. 3.2 tatsächlich von den anderen zu unterscheiden. Eine Beschreibung, die genau dieser physikalischen Gegebenheit Rechnung trägt, ist mit Hilfe eines N -Tupels (C_1, C_2, \dots, C_N) möglich. Dabei soll C_n wie schon in Gl. (3.46) die Anzahl der Zyklen der Länge n bedeuten. Solche N -Tupeln sind in Abb. 3.2 unter den jeweiligen Permutationen angegeben. An diesem Beispiel sieht man schon, dass wir bei einem Drei-Teilchen-Ensemble statt der 6 Permutationen nur 3 physikalisch verschiedene vorliegen haben. Diese Reduktion setzt sich für größere Ensembles in noch größerem Ausmaß fort.

Für die weitere Implementierung der gerade beschriebenen verbesserten Permutations-Zählung bemerken wir zuerst Folgendes. In der Gleichung (3.46) ist die Tupelstruktur (C_1, \dots, C_N) noch von der jeweiligen Permutation P abhängig. Doch das lässt sich auch umkehren, und jede Permutation als eine Kombination verschiedener C_n darstellen. Die Summation über alle Permutationen geht dann in die Summation über alle verschiedenen Tupeln (C_1, \dots, C_N) über. Allerdings entsprechen einem festen N -Tupel (C_1, \dots, C_N) mehrere mathematisch verschiedene Permutationen, was wir der Abb. 3.2 entnehmen können. Diesen Umstand müssen wir durch den Multiplizitätsfaktor $M(C_1, \dots, C_N)$ mitberücksichtigen und erhalten statt (3.46) zunächst

$$Z_N^{(0)B}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} M(C_1, \dots, C_N) \prod_{n=1}^N [Z_1(n, \beta)]^{C_n} . \quad (3.47)$$

Zur Berechnung des Multiplizitätsfaktors $M(C_1, \dots, C_N)$ bemerken wir, dass es bei einem festen Tupel (C_1, \dots, C_N) insgesamt $N!$ mögliche Kombinationen gibt. Dies sehen wir beispielsweise an dem Dreier-Tupel $(C_1 = 1, C_2 = 1, C_3 = 0)$ mit den möglichen Kombinationen $(1)(23)$, $(1)(32)$, $(2)(31)$, $(2)(13)$, $(3)(12)$, $(3)(21)$ oder auch im Falle $(C_1 = 0, C_2 = 0, C_3 = 1)$ mit den Kombinationen (123) , (132) , (231) , (213) , (312) , (321) . In beiden Fällen gibt es also insgesamt $3! = 6$ Möglichkeiten. Dabei können wir jedoch bemerken, dass sie selbst aus kombinatorischer Sicht nicht immer verschiedene Permutationen darstellen. So sind z.B. Kombinationen (213) und (132) absolut identisch, denn beide sind Darstellungen der Permutation $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$. Daher kommen sie in der Permutationsgruppe nur einmal vor. Um eine andere Sorte identischer Kombinationen zu nennen, betrachten wir die Kombinationen $(1)(3)(2)$ und $(1)(2)(3)$. Diese sind wiederum identisch, da sie beide Darstellungen der Permutation $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ sind. Allgemein lässt sich sogar sagen:

(I). Durch Vertauschung der Zyklen derselben Länge entstehen keine neue Permutationen, und das sind bei C_n Zyklen der Länge n gerade $C_n!$ Vertauschungen.

(II). Durch zyklische Vertauschungen der Elemente innerhalb eines Zyklus entstehen keine neue

Permutationen, und das sind bei der Zykluslänge n gerade n Stück.

Also gilt für den Multiplizitätsfaktor ganz allgemein [43,76,77]

$$M(C_1, \dots, C_N) = \frac{N!}{\prod_{n=1}^N C_n! n^{C_n}} . \quad (3.48)$$

Damit sind wir in der Lage, die Zustandssumme (3.47) in einer geschlossenen Form als

$$Z_N^B(\beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \prod_{n=1}^N \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta)}{n} \right]^{C_n} \quad (3.49)$$

zu schreiben. Diese Gleichung stellt eine leicht verallgemeinerte Version der von Feynman gefundenen Zustandssumme für Bosonen [43]. Ihr wichtigster Vorteil gegenüber der Beziehung (3.46) besteht in der Zahl der verschiedenen Summanden. Hier wächst sie nur noch algebraisch mit der Teilchenzahl N an und das ist wesentlich langsamer als die ursprünglichen $N!$ Terme in (3.46) [80]. Der einzige Wermutstropfen dabei ist die Tatsache, dass weitere Berechnungen nach (3.49) einer expliziten Kenntnis der Zyklus-Zerlegungen bedürfen, die nach der Nebenbedingung $\sum_n n C_n = N$ erlaubt sind. Das ist für genügend große Teilchenzahlen auch mit einem leistungsstarken Computer nur schwer zu realisieren. Dennoch wird es uns im nächsten Unterabschnitt gelingen, eine effizientere Berechnungs-Vorschrift mit Hilfe einer Rekursions-Beziehung für die Zustandssummen bosonischer Ensembles zu gewinnen.

3.1.3 Großkanonische Zustandssumme und kanonische Rekursion

Ausgehend vom Resultat (3.49) für die kanonische Zustandssumme bosonischer Ensembles werden wir in diesem Unterabschnitt in der Lage sein, wie bereits in [43] gezeigt, die großkanonische Zustandssumme zu berechnen. Diese dient uns des weiteren als die Erzeugende für alle kanonischen N -Teilchen-Zustandssummen [73] und ihre Projektion auf ein N -Teilchen-Zustand liefert schließlich die gesuchte Rekursions-Beziehung.

Zuerst beschäftigen wir uns mit der großkanonischen Zustandssumme, die wir bereits im Abschnitt 2.1.2 diskutiert haben. Diese kann als eine Mittelung über alle kanonischen Zustandssummen mit Hilfe der so genannten Fugazität $z \equiv e^{\beta\mu}$ aufgefasst werden, wobei μ das chemische Potential darstellt. Die konkrete Beziehung zwischen den beiden statistischen Größen lautet

$$Z_{GK}^B(\beta, z) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} Z_N^B(\beta) z^N . \quad (3.50)$$

Zur weiteren Untersuchung dieses Ausdrucks setzen wir hierfür die explizite Form der kanonischen Zustandssummen (3.49) ein. Die im z -Exponenten von (3.50) verwendete Teilchenzahl muss dafür

entsprechend der Gleichung $N = \sum_n n C_n$ umgeschrieben werden, so dass sich die Identität

$$\begin{aligned} Z_{GK}^B(\beta, z) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right]^{C_n} \\ &= \sum_{C_1=0}^{\infty} \sum_{C_2=0}^{\infty} \dots \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right]^{C_n} \end{aligned} \quad (3.51)$$

ergibt. Gleich im ersten Schritt haben wir statt des Produktes über $n=1, 2, \dots, N$ wie in (3.49) das Produkt über alle positiven ganzzahligen Werte $n \in \mathbb{N}$ geschrieben. Dies ist aber nur eine reine Formalität, denn aufgrund der Nebenbedingung $\sum_n n C_n = N$ gilt $C_n = 0$ für alle $n > N$, so dass die zusätzlichen Faktoren triviale Einsen sind. Weiterhin bemerken wir noch, dass in der letzten Form die Nebenbedingung $N = \sum_n n C_n$ nicht mehr explizit vorkommt. Aufgrund dieser Vereinfachung können wir die nun identischen Summen mit dem Produkt vertauschen und erhalten

$$Z_{GK}^B(\beta, z) = \prod_{n=1}^{\infty} \sum_{C_n=0}^{\infty} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right]^{C_n}. \quad (3.52)$$

Die C_n -Summe ergibt die Exponentialfunktion, so dass wir damit

$$Z_{GK}^B(\beta, z) = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Z_1(n\beta) z^n}{n} \right\} \quad (3.53)$$

erhalten. Weiterhin können wir daraus die mittlere großkanonische Teilchenzahl nach der Gleichung $\langle N \rangle^{B,F} \equiv z \partial \ln Z_{GK}^{B,F} / \partial z$ finden:

$$\langle N(\beta, z) \rangle^B = \sum_{n=1}^{\infty} z^n Z_1(n\beta). \quad (3.54)$$

Mit der Spektral-Darstellung (3.39) lässt sich diese Gleichung noch weiter umformen, so dass sich die mittlere Teilchenzahl zu

$$\langle N(\beta, z) \rangle^B = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1} \quad (3.55)$$

ergibt. Mit der Fugazität $z = e^{\beta \mu}$ entspricht das für Bosonen gerade der Bose-Einstein-Verteilung (1.3) bzw. (2.85).

In der obigen Darstellung haben wir mit der kanonischen Zustandssumme für ununterscheidbare Teilchen begonnen und sind durch die Mittelung über alle möglichen Teilchenzahlen bei der großkanonischen Zustandssumme angelangt. Diese Vorgehensweise lässt sich aber auch umkehren, denn die großkanonische Zustandssumme (3.50) hat noch gleichzeitig die Eigenschaft, die Erzeugende für alle kanonischen Zustandssummen zu sein [73]. Das sehen wir z.B. daran, dass in der Reihendarstellung (3.50) die kanonischen Zustandssummen Z_N^B als Taylor-Entwicklungs-Koeffizienten des großkanonischen Ausdrucks fungieren. Als solche sind sie durch die Gleichung

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0} \quad (3.56)$$

gegeben. Die großkanonische Zustandssumme darin entnehmen wir (3.53) und erhalten daraus zuerst die Zustandssumme des Vakuums, in dem sich kein Teilchen befindet ($N=0$):

$$Z_0^B(\beta) = Z_{GK}^B(\beta, z) \Big|_{z=0} = 1 . \quad (3.57)$$

Des weiteren sei nun $N \geq 1$. Für diesen Fall können wir mit einer unmittelbar aus (3.53) folgenden Feststellung beginnen:

$$\frac{\partial Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z} = Z_{GK}^B(\beta, z) \sum_{k=1}^{\infty} Z_1(k\beta) z^{k-1} . \quad (3.58)$$

Dies stellt eine selbstkonsistente Differentialgleichung für die großkanonische Zustandssumme dar, die rekursiv gelöst werden kann. Dazu berechnen wir ausgehend von der obigen Form die N -te Ableitung der großkanonischen Zustandssumme:

$$\frac{\partial^N Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^N} \Big|_{z=0} = \sum_{n=1}^N \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} \frac{\partial^{N-n} Z_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \sum_{k=1}^{\infty} Z_1(k\beta) \frac{\partial^{n-1} z^{k-1}}{\partial z^{n-1}} \Big|_{z=0} . \quad (3.59)$$

Unter Berücksichtigung der Identität

$$\frac{\partial^{n-1} z^{k-1}}{\partial z^{n-1}} \Big|_{z=0} = (n-1)! \delta_{k,n} \quad (3.60)$$

erhalten wir ferner

$$\frac{\partial^N Z_{GK}^{(0)B}(\beta, z)}{\partial z^N} \Big|_{z=0} = (N-1)! \sum_{n=1}^N \frac{1}{(N-n)!} \frac{\partial^{N-n} Z_{GK}^{(0)B}(\beta, z)}{\partial z^{N-n}} \Big|_{z=0} Z_1(n\beta) . \quad (3.61)$$

Erinnern wir uns jetzt noch an die Relation (3.56), so erhalten wir die gesuchte Rekursionsgleichung für die N -Teilchen-Zustandssumme

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Z_1(n\beta) Z_{N-n}^B(\beta) . \quad (3.62)$$

Diese Formel ist übrigens bereits von Landsberg in seinem Lehrbuch zur Thermodynamik [78] benutzt worden, wurde dann aber vergessen und zuerst von Sato für Fermionen [79] und dann von Borrmann und Franke für Bosonen [80] wiederentdeckt worden. Die hier dargestellte Herleitung basiert auf den Arbeiten [73,74]. Ausgehend vom Rekursionsanfang in (3.57) lassen sich damit die Zustandssummen mit immer größeren Teilchenzahlen berechnen. Aus diesen können dann die thermodynamischen Eigenschaften von Bose-Gasen berechnet werden. Die konkrete Implementierung der Formel (3.62) wird im Abschnitt 3.2 anhand spezieller Systeme erläutert.

3.1.4 Kondensationseffekte in kanonischen Ensembles

Wie wir bereits im einleitenden Kapitel 1 gesehen haben, kann die Bose-Einstein-Kondensation mit der Besetzung des Grundzustandes erklärt werden. Um diese Größe zu bestimmen, müssen

wir die Wahrscheinlichkeit angeben, mit der ein Teilchen im Grundzustand zu finden ist. Im großkanonischen Ensemble wurde diese unmittelbar durch den aus der Bose-Einstein-Verteilung (2.85) bestimmten Grundzustand-Anteil gegeben. Im kanonischen Ensemble spielt die Bose-Einstein-Verteilung jedoch keine große Rolle. Die Herleitung der Besetzung eines beliebigen energetischen Zustandes und so auch des Grundzustandes ist hier nicht direkt einsichtig. Genau diese Besetzung leiten wir in diesem Unterabschnitt ab und halten uns dabei an die Darstellung in der kürzlich veröffentlichten Publikation [42].

Als Ausgangspunkt unserer Untersuchungen dient uns die kanonische Zustandssumme, die wir nun als eine Gewichtungsfunktion für den Grundzustand benutzen wollen. Für ein kanonisches Ensemble aus N Teilchen eignet sich dazu am besten die Form (3.49). Um den Beitrag des Grundzustandes daraus zu extrahieren, schreiben wir den darin vorkommenden Ausdruck für den geschlossenen n -Zyklus ausgehend von (3.39) in der Form

$$Z_1(n, \beta) \equiv \gamma_n(\beta) + \xi_n(\beta) \quad (3.63)$$

aus. Dabei soll γ_n den Beitrag des Grundzustandes

$$\gamma_n(\beta) \equiv e^{-n\beta E_G} \quad (3.64)$$

und ξ_n den Beitrag der restlichen angeregten Zustände

$$\xi_n(\beta) = \sum'_{\mathbf{k}} e^{-n\beta E_{\mathbf{k}}} \quad (3.65)$$

darstellen, wobei der Strich über dem Summenzeichen eine Summation über die Beiträge aller Zustände außer dem Grundzustand bedeuten soll. Unter Berücksichtigung der binomialen Zerlegungsformel

$$[Z_1(n, \beta)]^{C_n} = \sum_{m_n=0}^{C_n} \frac{C_n!}{m_n! (C_n - m_n)!} [\gamma_n(\beta)]^{m_n} [\xi_n(\beta)]^{C_n - m_n} \quad (3.66)$$

lässt sich die N -Teilchen-Zustandssumme (3.49) umformen zu

$$Z_N^B(\beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} [\gamma_1(\beta)]^{\sum_{n=1}^N n m_n} \prod_{n=1}^N \frac{[\xi_n(\beta)]^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} \quad (3.67)$$

Dabei haben wir die Eigenschaft des Grundzustand-Beitrags (3.64) ausgenutzt, entsprechend der Beziehung $\gamma_n(\beta) = \gamma_1^n(\beta)$ zu faktorisieren.

Nun widmen wir uns dem Gewicht der Teilchen im Grundzustand. Um die Vorgehensweise zu veranschaulichen, betrachten wir zuerst als Beispiel eine Ensemble aus drei Teilchen. Die Zustandssumme können wir für diesen Fall nach einigem Aufwand aus (3.67) ablesen als

$$Z_3^B = \gamma_1^0 \left(\frac{1}{6} \xi_1^3 = \frac{1}{2} \xi_1 \xi_2 + \frac{1}{3} \xi_3 \right) + \gamma_1^1 \left(\frac{1}{2} \xi_1^2 + \frac{1}{2} \xi_2 \right) + \gamma_1^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \xi_1 + \gamma_1^3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.68)$$

Im ersten Term befinden sich alle Teilchen in allen drei Kombinationen in angeregten Zuständen, im zweiten Term ist ein Teilchen im Grundzustand und zwei andere in angeregten Zuständen, im dritten Term befinden sich zwei und im vierten alle drei Teilchen im Grundzustand. Entsprechend dieser Beobachtung können wir das statistische Gewicht W_3^B der Grundzustand-Teilchen in einem 3-Teilchen-Ensemble als

$$\begin{aligned} W_3^B = & 0 \times \gamma_1^0 \left(\frac{1}{6} \xi_1^3 + \frac{1}{2} \xi_1 \xi_2 + \frac{1}{3} \xi_3 \right) + 1 \times \gamma_1^1 \left(\frac{1}{2} \xi_1^2 + \frac{1}{2} \xi_2 \right) \\ & + 2 \times \gamma_1^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \xi_1 + 3 \times \gamma_1^3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.69)$$

angeben. Dabei wird jeder einzelne Beitrag mit der Zahl der darin enthaltenen Grundzustand-Teilchen multipliziert. Diese Zahl entspricht immer der jeweiligen Potenz von γ_1 . In der Gleichung (3.67) ist diese Potenz für eine feste Wahl von (m_1, m_2, \dots, m_N) gleich $\sum_{n=1}^N nm_n$. Das gilt uns nun auch als der Gewichtungsfaktor des Beitrages mit dieser (m_1, m_2, \dots, m_N) -Wahl, so dass sich das statistische Gewicht der Grundzustand-Teilchen allgemein als

$$W_N^B = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} \left(\sum_{n=1}^N nm_n \right) \gamma_1^{\sum_{n=1}^N nm_n} \prod_{n=1}^N \frac{\xi_n^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} \quad (3.70)$$

schreiben lässt. Um die Bedeutung dieser Größe zu verdeutlichen, bemerken wir, dass sich die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand eines N -Teilchen-Ensembles damit nach

$$\langle N_G \rangle_N^B = \frac{W_N^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} \quad (3.71)$$

ergibt.

Zur weiteren Berechnung dieser Größe bemerken wir zuerst, dass sich (3.70) mit der trivialen Umformungsregel

$$\left(\sum_{n=1}^N nm_n \right) \gamma_1^{\sum_{n=1}^N nm_n} = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \gamma_1^{\sum_{n=1}^N nm_n} \quad (3.72)$$

als

$$W_N^B = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} Z_N^B \quad (3.73)$$

umschreiben lässt. Definieren wir jetzt die Erzeugende für Grundzustands-Gewichte nach einer zu (3.50) analogen Formel

$$W_{GK}^B(\beta, z) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} W_N^B(\beta) z^N, \quad (3.74)$$

so erhalten wir dafür mit Hilfe der Erzeugenden für die Zustandssummen (3.50)

$$W_{GK}^B = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} Z_{GK}^B. \quad (3.75)$$

Die Erzeugende der Zustandssummen entnehmen wir der Gleichung (3.53) und schreiben sie mit Hilfe der Zerlegung (3.63) um:

$$Z_{GK}^B = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} (\gamma_1^n + \xi_n) \frac{z^n}{n} \right\}. \quad (3.76)$$

Nach (3.75) ergibt sich daraus die Identität

$$W_{GK}^B = Z_{GK}^B \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_1^n z^n, \quad (3.77)$$

aus der wir nun auch eine effiziente Bestimmungsgleichung für kanonische Grundzustands-Gewichte gewinnen können.

Zuerst bemerken wir, dass sich die statistischen Gewichte W_N^B aus deren Erzeugenden (3.74) als die Taylor-Entwicklungs-Koeffiziente

$$W_N^B(\beta) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N W_{GK}^B(\beta, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0} \quad (3.78)$$

ergeben. Nach (3.77) erhalten wir aber mit der Produktregel der Ableitung

$$\left. \frac{\partial^N W_{GK}^B}{\partial z^N} \right|_{z=0} = \sum_{l=0}^N \frac{N!}{l! (N-l)!} \frac{\partial^{N-l} Z_{GK}^B}{\partial z^{N-l}} \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_1^n \left. \frac{\partial^l z^n}{\partial z^l} \right|_{z=0}. \quad (3.79)$$

Nun bemerken wir, dass der $l = 0$ -Summand auf der rechten Seite verschwindet und für die Ableitung der Fugazität ansonsten die Identität (3.60) gilt. Erinnern wir uns außerdem noch an die Gleichung (3.56) für die Zustandssumme, dann erhalten wir die endgültige Formel für die kanonischen Grundzustands-Gewichte:

$$W_N^B(\beta) = \sum_{n=1}^N \gamma_1^n(\beta) Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.80)$$

Diese Gleichung ist nicht rekursiv und erfordert die Kenntnis der kanonischen Zustandssummen. Die letzteren können aber nach (3.62) rekursiv gewonnen werden. Die anschließende Auswertung von (3.80) ist geradezu trivial.

Die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand (3.71) berechnet sich daraus zu

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \gamma_1^n(\beta) \frac{Z_{N-n}^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)}. \quad (3.81)$$

Im Abschnitt 3.2 wird diese Größe für konkrete Potentiale ausgewertet und gilt somit als eine wichtige Testgröße für verwendete Näherungen.

3.1.5 Propagator im kanonischen N -Teilchen-Ensemble

In diesem Abschnitt diskutieren wir den Propagator in einem kanonischen Ensemble aus N Bosonen. Diese Größe beinhaltet unter anderem die Information über die lokale Teilchen-Dichte in einem Bose-Gas sowie über die Langdistanz-Eigenschaften darin. Im Folgenden beginnen wir mit der Ein-Teilchen-Dichtematrix, die wir anschließend für weitere Berechnungen der N -Teilchen-Propagatoren verwenden.

Die Ein-Teilchen-Dichtematrix kann in einem bosonischen N -Teilchen-Ensemble in Analogie zur Zustandssumme (3.14) als die unvollständige Spur der Imaginärzeit-Amplitude über $N - 1$ von insgesamt N Teilchenorten entsprechend der Gleichung

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \equiv \int d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; \hbar\beta | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N; 0)^B \quad (3.82)$$

definiert werden. Mit der expliziten Form für die bosonische Imaginärzeit-Amplitude (3.12) und der Faktorisierungseigenschaft (3.37) erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) &\equiv \frac{1}{N!} \sum_P \int d^3x_2 \dots d^3x_N (\mathbf{x}_{P(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) \\ &\quad \times (\mathbf{x}_{P(2)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) \dots (\mathbf{x}_{P(N)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_N; 0) . \end{aligned} \quad (3.83)$$

Jetzt definieren wir in Analogie zum Beitrag eines geschlossenen Zyklus (3.42) denjenigen eines offenen Zyklus der Länge k

$$g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \equiv \int d^3x_2 \dots d^3x_k (\mathbf{x}_1; \hbar\beta | \mathbf{x}_k; 0) \dots (\mathbf{x}_3; \hbar\beta | \mathbf{x}_2; 0) (\mathbf{x}_2; \hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) . \quad (3.84)$$

Unter Verwendung der Zeittranslations-Invarianz (3.32) und der Gruppeneigenschaft (3.31) reduziert sich dieser Ausdruck zu

$$g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = (\mathbf{x}_1; k\hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) . \quad (3.85)$$

Die Ein-Teilchen-Dichtematrix (3.83) zerfällt in Analogie zur Zustandssumme (3.41) für bosonischen Ensembles in Zyklusbeiträge verschiedener Länge. Allerdings gibt es in der Ein-Teilchen-Dichtematrix neben den geschlossenen Zyklen $h_n(\beta) = Z_1(n\beta)$ einen offenen Zyklus $g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta)$, während in der Zustandssumme alle Zyklen geschlossen sind. Mit dieser Feststellung können wir die unkomplette Analogie zu der Darstellung der Zustandssumme (3.47) ausnutzen und schreiben

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{k=1}^N \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum nC_n = N-k)} \tilde{M}(k, C_1, \dots, C_N) g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \prod_{n=1}^{N-k} [Z_1(n\beta)]^{C_n} . \quad (3.86)$$

Wohlgemerkt haben wir hierbei gegenüber der Formel (3.47) lediglich einen Zyklus $Z_1(k\beta)$ mit einer nichtverschwindenden Länge k absepariert und durch den Ausdruck $g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta)$ ersetzt. Außerdem muss hierbei ein etwas anderer Multiplizitätsfaktor verwendet werden als der ursprüngliche Faktor (3.48) für die Zustandssumme. So ist z. B. zu bemerken, dass der Ort \mathbf{x}_1 bzw. \mathbf{x}'_1 eine gegenüber den restlichen $N - 1$ Orten ausgezeichnete Rolle spielt. Sie sind nämlich mit Sicherheit

in dem offenen Zyklus der Länge k zu finden, und dafür gibt es k verschiedenen Möglichkeiten, wie nach der Regel (II) vor der Gleichung (3.48) zu sehen. Die restlichen $N-1$ Teilchenorte haben insgesamt $(N-1)!$ Möglichkeiten, innerhalb des offenen Zyklus oder der restlichen geschlossenen Zyklen platziert zu werden. Somit beträgt die Gesamtzahl der verschiedenen Schreibweisen aller möglichen Permutationen $k(N-1)!$. Doch nicht alle dieser Schreibweisen ergeben mathematisch verschiedene Permutationen, es sind nämlich $1! k^1 \prod_{n=1}^{N-k} C_n! n^{C_n}$ davon bei einem gegebenen Tupel (k, C_1, \dots, C_N) gleich. Das können wir in Analogie zu dem entsprechenden Faktor für die Zustandssumme nach den Regeln (I) und (II) vor der Beziehung (3.48) feststellen. Es ergibt sich insgesamt also für den Multiplizitätsfaktor

$$\tilde{M}(k, C_1, \dots, C_N) = \frac{k(N-1)!}{1! k^1 \prod_{n=1}^{N-k} C_n! n^{C_n}} = \frac{(N-1)!}{\prod_{n=1}^{N-k} C_n! n^{C_n}} . \quad (3.87)$$

Einsetzen dieser Identität in die Gleichung (3.86) ergibt schließlich die Ein-Teilchen-Dichtematrix

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N-k)} \prod_{n=1}^{N-k} \frac{1}{C_n!} \left[\frac{Z_1(n, \beta)}{n} \right]^{C_n} . \quad (3.88)$$

Durch Vergleich mit dem Resultat (3.49) für die Zustandssumme der Bosonen ergibt sich zusammen mit der Beziehung (3.85) die endgültige Formel für die Dichtematrix

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{x}_1; k\hbar\beta | \mathbf{x}'_1; 0) Z_{N-k}^B(\beta) . \quad (3.89)$$

Das ist das zentrale Ergebnis dieses Abschnitts und kann beispielsweise auch dazu verwendet werden, die N -Teilchen-Zustandssumme herzuleiten [81]. Dazu bemerken wir nur, dass die Spur der Dichtematrix nach (3.82) die bosonische N -Teilchen-Zustandssumme (3.14) entsprechend der Gleichung

$$Z_N^B(\beta) = \int d^3x \rho_N^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Z_1(k, \beta) Z_{N-k}^B(\beta) \quad (3.90)$$

wiedergibt. Für die rechte Seite verwendeten wir dabei noch die Beziehung (3.44). Interessanterweise ist das genau die Gleichung (3.62) aus dem Abschnitt 3.1.3 für den bosonischen Fall. Des Weiteren kann die Beziehung (3.89) dazu verwendet werden, den Propagator in einem bosonischen N -Teilchen-Ensemble herzuleiten.

Zuerst bemerken wir an dieser Stelle, dass der symmetrisierte N -Teilchen-Zustand (3.8) eine gewisse Ähnlichkeit zum Vielteilchenzustand (2.5) aus dem Abschnitt 2.1 zeigt. Er lässt sich nämlich mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren $\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_i)$ der Teilchen an den jeweiligen Orten \mathbf{x}_i als

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_N) |vak\rangle \quad (3.91)$$

schreiben, wobei der Ausdruck $|vak\rangle$ dem Vakuumzustand entspricht. Die Erzeugungsoperatoren müssen selbst der Kommutatorbeziehung

$$[\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_i), \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_j)]_- = 0 \quad (3.92)$$

genügen, um die Symmetrie (3.8) der Zustände zu garantieren. Weiterhin lassen sich Vernichtungsoperatoren einführen, die den Vakuumzustand entsprechend der Beziehung $\hat{a}(\mathbf{x}_i)|vak\rangle = 0$ vernichten und die Kommutatorrelationen

$$[\hat{a}(\mathbf{x}_i), \hat{a}(\mathbf{x}_j)]_- = 0 \quad , \quad [\hat{a}(\mathbf{x}_i), \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_j)]_- = \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3.93)$$

erfüllen. An dieser Stelle können wir noch die Wirkung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf den N -Teilchen-Zustand (3.8) angeben. Die erstere lautet

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B = \sqrt{N+1} |\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \quad (3.94)$$

und ist aufgrund der Darstellung (3.91) unmittelbar einsichtig. Der Erzeugungsoperator erhöht außerdem noch die Teilchenzahl in einem Zustand und macht aus einer N -Form eine $N+1$ -Form. Die Wirkung des Vernichtungsoperators kann mit Hilfe der zweiten Relation aus (3.93) hergeleitet werden mit dem Ergebnis

$$\hat{a}(\mathbf{x}) |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) |\mathbf{x}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_i, \dots, \mathbf{x}_N\rangle^B \quad , \quad (3.95)$$

wobei $\hat{\mathbf{x}}_i$ das Fehlen des i -ten Teilchens bezeichnet. Daraus sehen wir, dass der Vernichtungsoperator in der Tat ein Teilchen vernichtet, und zwar an allen möglichen Orten, wodurch eine $N-1$ -Form entsteht.

Des Weiteren brauchen wir noch die Imaginärzeit-abhängigen Heisenbergschen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in einem N -Teilchen-Zustand. Diese definieren wir als

$$\hat{a}_N(\mathbf{x}, \tau) \equiv e^{\tau \hat{H}_{N-1}/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}) e^{-\tau \hat{H}_N/\hbar} \quad , \quad (3.96)$$

$$\hat{a}_N^\dagger(\mathbf{x}, \tau) \equiv e^{\tau \hat{H}_{N+1}/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) e^{-\tau \hat{H}_N/\hbar} \quad , \quad (3.97)$$

so dass eine gewisse Analogie zu den zeitabhängigen Operatoren (2.50) und (2.51) im großkanonischen Formalismus besteht. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass die Exponentialfunktionen vor und nach $\hat{a}_N(\mathbf{x})$ und $\hat{a}_N^\dagger(\mathbf{x})$ diesmal keine zueinander adjungierten Operatoren darstellen, weil die entsprechenden Hamilton-Operatoren in jeweils verschiedenen Hilbert-Räumen wirken.

Der Ein-Teilchen-Propagator in einem Ensemble aus N Bosonen kann in einer zu (2.49) ähnlichen Form definiert werden. Aufgrund der Nichtunitarität der Entwicklungsoperatoren empfiehlt sich jedoch hierfür, die Zeitordnung (2.52) explizit auszuschreiben:

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \lim_{\epsilon \searrow 0} \text{Tr}_N \left\{ e^{-\beta \hat{H}_N} \left[\Theta(\tau_b - \tau_a - \epsilon) \hat{a}_{N+1}(\mathbf{x}'_1, \tau_b) \hat{a}_N^\dagger(\mathbf{x}_1, \tau_a) \right. \right. \\ \left. \left. + \Theta(\tau_a - \tau_b + \epsilon) \hat{a}_{N-1}^\dagger(\mathbf{x}_1, \tau_a) \hat{a}_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b) \right] \right\} \quad . \quad (3.98)$$

So wie im Abschnitt 2.1.3, musste die Heavisidesche Stufenfunktion auch diesmal für die gleichen Imaginärzeiten $\tau_a = \tau_b$ mit Hilfe des infinitesimalen Parameters ϵ vervollständigt werden. Das wurde

für die obige Gleichung in Analogie zur Vorschrift (2.63) gemacht. Nun lässt sich der Propagator (3.98) noch gemäß

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \lim_{\epsilon \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_b - \tau_a - \epsilon) G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) + \Theta(\tau_b - \tau_a + \epsilon) G_N^A(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) \right\} \quad (3.99)$$

zerlegen, wobei im ersten Summanden der retardierte Propagator und im zweiten der avancierte Propagator vorkommt.

Der retardierte Anteil des Propagators lässt sich mit N -Teilchen-Zuständen (3.8) explizit als

$$\begin{aligned} G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) &= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x_2 \dots d^3 x_{N+1} {}^B \langle \mathbf{x}_{N+1}, \dots, \mathbf{x}_2 | e^{-(\hbar\beta - \tau_b)\hat{H}_N/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}_{N+1}/\hbar} \\ &\quad \times \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) e^{-\tau_a \hat{H}_N/\hbar} | \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N+1} \rangle^B \quad (3.100) \\ &= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} \int d^3 x''_2 \dots d^3 x''_{N+1} {}^B \langle \mathbf{x}''_{N+1}, \dots, \mathbf{x}''_2 | e^{-(\hbar\beta + \tau_a - \tau_b)\hat{H}_N/\hbar} \\ &\quad \times | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1} \rangle^B \cdot {}^B \langle \mathbf{x}'_{N+1}, \dots, \mathbf{x}'_2 | \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}_{N+1}/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1} \rangle^B \end{aligned}$$

ausschreiben, wobei wir im letzten Schritt die Vollständigkeitsrelation der bosonischen Zustände (3.9) angewendet haben. Der letzte Matrixelement in (3.100) kann jetzt noch mit Hilfe (3.94) und deren adjungierten Relation ausgerechnet werden zu

$$\begin{aligned} &{}^B \langle \mathbf{x}'_{N+1}, \dots, \mathbf{x}'_2 | \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}_{N+1}/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1} \rangle^B \\ &= (N+1) (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1}; \tau_a)^B \quad (3.101) \\ &= \frac{(N+1) N!}{(N+1)!} \sum_{i=1}^{N+1} (\mathbf{x}'_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}'_i, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_{N+1}; \tau_a)^B (\mathbf{x}'_i; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) . \end{aligned}$$

Im ersten Schritt haben wir die Imaginärzeit-Amplitude (3.10) für $N+1$ Bosonen verwendet. Im zweiten kam noch die Permutations-Darstellung (3.12) dazu, um daraus die \mathbf{x}_1 enthaltende Einzelteilchen-Amplitude nach (3.37) abzuseparieren. Die Wiedereinsetzung dieses Matrixelements in (3.100) und Verwendung der Vollständigkeitsrelation (3.9) vereinfacht den retardierten Propagator zu

$$\begin{aligned} G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) &= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} (\mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \hbar\beta | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; 0)^B \quad (3.102) \\ &\quad + \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{i=2}^{N+1} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} (\mathbf{x}'_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}'_i, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; \hbar\beta | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_{N+1}; 0)^B (\mathbf{x}'_i; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) . \end{aligned}$$

Das Integral im ersten Summanden stellt nach der Identität (3.14) die N -Teilchen-Zustandssumme dar. Der zweite Summand lässt sich ebenfalls noch stark vereinfachen, indem man eine einfache Umbenennung der Variablen vornimmt, z.B.: $\mathbf{x}'_i \mapsto \mathbf{x}'_{N+1}$, $\mathbf{x}'_{N+1} \mapsto \mathbf{x}'_N$, $\mathbf{x}'_N \mapsto \mathbf{x}'_{N-1}$ usw. bis

schließlich $\mathbf{x}'_{i+1} \mapsto \mathbf{x}'_i$, und für $j < i$ soll gelten $\mathbf{x}'_j \mapsto \mathbf{x}'_j$ (keine Änderung). Wenn man noch die Tatsache ausnutzt, dass die Reihenfolge der Orte in jeweiligen bosonischen Zuständen nach der Eigenschaft (3.13) frei wählbar ist, dann erhalten wir aus (3.102)

$$G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) \quad (3.103)$$

$$+ \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{i=2}^{N+1} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_{N+1} (\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; \hbar\beta | \mathbf{x}'_{N+1}, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N; 0)^B (\mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) .$$

Interessanterweise hängt das Integral jetzt überhaupt nicht mehr von dem Index i ab, so dass die i -Summe lediglich einen Faktor N liefert. Zur weiteren Umformung dieser Gleichung kommt uns die Ein-Teilchen-Dichtematrix (3.82) zugute, mit deren Hilfe sich

$$G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = (\mathbf{x}'_1; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) + \frac{N}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x'_{N+1} \rho_N^B(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_{N+1}; \beta) (\mathbf{x}'_{N+1}; \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) \quad (3.104)$$

ergibt. Im nächsten Schritt erinnern wir uns noch an die Beziehung (3.89) und führen die letzte Integration mit Hilfe der Gruppeneigenschaft (3.31) aus. Damit ergibt sich schließlich

$$G_N^R(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=0}^N (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta + \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) Z_{N-k}^B(\beta) , \quad (3.105)$$

und das ist die endgültige Formel für den retardierten Propagator.

Jetzt berechnen wir noch den avancierten Propagator, der den zweiten Summanden in (3.98) darstellt. Mit den N -Teilchen-Zuständen (3.8) und den zeitabhängigen Operatoren (3.96) und (3.97) ergibt sich dessen explizite Form:

$$G_N^A(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x_2 \dots d^3 x_{N+1} {}^B \langle \mathbf{x}_{N+1}, \dots, \mathbf{x}_2 | e^{-(\hbar\beta - \tau_a) \hat{H}_N / \hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) e^{-(\tau_a - \tau_b) \hat{H}_{N-1} / \hbar}$$

$$\times \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-\tau_b \hat{H}_N / \hbar} | \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N+1} \rangle^B \quad (3.106)$$

$$= \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^3 x'_2 \dots d^3 x'_N \int d^3 x''_2 \dots d^3 x''_N {}^B \langle \mathbf{x}''_N, \dots, \mathbf{x}''_2 | e^{-(\tau_a - \tau_b) \hat{H}_{N-1} / \hbar}$$

$$\times | \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N \rangle^{BB} \langle \mathbf{x}'_N, \dots, \mathbf{x}'_2 | \hat{a}(\mathbf{x}'_1) e^{-(\hbar\beta + \tau_b - \tau_a) \hat{H}_N / \hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_1) | \mathbf{x}''_2, \dots, \mathbf{x}''_N \rangle^B ,$$

wobei wir noch für die letzte Gleichung die Vollständigkeitsrelation (3.9) angewendet haben. Vergleicht man den letzten Integral mit dem entsprechenden Ausdruck für den retardierten Propagator aus (3.100), so bemerkt man eine große Ähnlichkeit. Der einzige Unterschied besteht darin, dass die Zahl $N+1$ in allen Ausdrücken zu N wurde (die Zustandssumme Z_N^B blieb dabei dennoch ungeändert) und eine Verschiebung der Imaginärzeit von τ_b zu $\hbar\beta + \tau_b$ vollzogen wurde. Diese formelle Ähnlichkeit zieht sich selbstverständlich durch alle Rechnungen durch, so dass sich am Ende das zu (3.105) ähnliche Resultat

$$G_N^A(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=1}^N (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta + \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) Z_{N-k}^B(\beta) \quad (3.107)$$

ergibt. Neben den oben erwähnten Verschiebungen der Variablen wurde für diese Gleichung noch der Summationsindex k in (3.105) durch $k+1$ ersetzt.

Der gesamte zeitgeordnete Propagator ergibt sich nach (3.99) mit dem retardierten Anteil (3.105) und dem avancierten Propagator (3.107) zu

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau_b; \mathbf{x}_1, \tau_a) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \lim_{\epsilon \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_b - \tau_a - \epsilon) \sum_{k=0}^N + \Theta(\tau_a - \tau_b + \epsilon) \sum_{k=1}^N \right\} \\ \times (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta + \tau_b | \mathbf{x}_1; \tau_a) Z_{N-k}^B(\beta) . \quad (3.108)$$

Der Spezialfall des imaginärzeitlich lokalen Propagators lautet

$$G_N(\mathbf{x}'_1, \tau; \mathbf{x}_1, \tau) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=1}^N (\mathbf{x}'_1; k\hbar\beta | \mathbf{x}_1; 0) Z_{N-k}^B(\beta) \quad (3.109)$$

und gleicht damit bis auf den Vorfaktor $N/Z_N^B(\beta)$ der Ein-Teilchen-Dichtematrix (3.89). Setzt man weiterhin die Anfangs- und Endorte gleich und integriert darüber, so ergibt sich mit (3.44) aufgrund der Rekursionsbeziehung (3.62) bzw. (3.90) die Teilchenzahl:

$$\int d^3x G_N(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{k=1}^N Z_1(k\beta) Z_{N-k}^B(\beta) = N . \quad (3.110)$$

Daraus ist weiterhin ersichtlich, dass der zeitlich und örtlich lokale Propagator der Teilchendichte

$$n_N(\mathbf{x}) = G_N(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau) \quad (3.111)$$

in einem N -Teilchen-Ensemble entspricht.

3.2 Kanonische Untersuchungen für spezielle Potentiale

Die kanonische Zustandssumme und die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Grundzustand-Kondensat zu finden, wurden im letzten Abschnitt für wechselwirkungsfreie Bose-Gase allgemein hergeleitet. In diesem Abschnitt werden diese kanonischen Ergebnisse durch die Wahl der Ein-Teilchen-Potentiale spezifiziert. Im ersten Unterabschnitt diskutieren wir den Spezialfall des homogenen Bose-Gases, das heißt den Fall ohne Hintergrundpotential. Die naive Vorgehensweise wird sich dabei jedoch als gänzlich ungeeignet und unphysikalisch herausstellen. Es liegt jedoch nicht an prinzipiellen Problemen des kanonischen Ensembles bei Beschreibungen der endlichen Systeme, sondern nur an den Näherungen, die man dabei macht. Denn, wie bereits in der Publikation [42] geschildert, kann die Situation durch den gesondert berücksichtigten Grundzustand korrigiert werden. Weiterhin kann das homogene Problem als eine Approximation des Kastenpotentials betrachtet werden, welches im anschließenden Unterabschnitt quantenmechanisch exakt behandelt wird. Außerdem wird noch der für Experimente relevante Fall des harmonischen Potentials behandelt.

3.2.1 Spezialfall des homogenen Bose-Gases

In diesem Unterabschnitt beschreiben wir zuerst das von Feynmann in seinem Textbuch [43] untersuchte Modell des homogenen Bose-Gases. Hierbei stoßen wir jedoch auf Hinweise, dass das so behandelte Problem prinzipiell unphysikalisch und missverständlich ist, was sich in Komplikationen bei Berechnungen der Wärmekapazität und der Grundzustand-Besetzung äußert. Anschließend diskutieren wir die konstruktiv verbesserte Version des homogenen Problems, mit der sich auch die gerade erwähnten Größen sinnvoll auswerten lassen.

Der hier behandelte Fall zeichnet sich durch das fehlende Hintergrundpotential aus, und zwar in einem endlichen aber dennoch derart großen Volumen V , dass wir die Randeffekte vernachlässigen können. Dieses Problem wurde von uns in der großkanonischen Ensemble-Theorie bereits im Abschnitt 2.2 behandelt. Die Wellenfunktionen sind für diesen Fall durch (2.88) und die Energieeigenwerte durch (2.90) gegeben. Das Energiespektrum ist dabei kontinuierlich, so dass die Summe über alle Zustände ebenfalls nach (2.90) als ein Impulsintegral darstellbar ist. Damit ergibt sich die Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplitude (3.34) zu

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = \left[\frac{M}{2\pi\hbar(\tau_b - \tau_a)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2}{\tau_b - \tau_a} \right\}. \quad (3.112)$$

Weiterhin ergibt sich daraus nach der Spurbildung in (3.44) in einem endlichen Volumen V der Beitrag eines geschlossenen n -Zyklus zur kanonischen Zustandssumme

$$Z_1(n\beta) = \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{n^{3/2}}, \quad (3.113)$$

wobei λ die thermische de Broglie-Wellenlänge aus (2.93) darstellt. Mit diesem Beitrag der geschlossenen n -Zyklen erhalten wir aus der allgemeinen Formel (3.62) die für den homogenen Fall spezifizierte Rekursionsbeziehung

$$Z_N^B(\beta) = \frac{V}{N\lambda^3} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^{3/2}} Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.114)$$

Für viele Probleme ist es sinnvoll, die dimensionslose Einheit der reduzierten Temperatur $t \equiv T/T_c^{(0)}$ zu verwenden. Dabei stellt $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.104) aus der großkanonischen Rechnung dar, so dass

$$t = \left(\frac{V}{N\lambda^3} \right)^{2/3} \zeta^{2/3}(3/2) \quad (3.115)$$

gilt mit der Riemannschen Zeta-Funktion $\zeta(\nu)$ aus (2.100). Damit lässt sich die Rekursion (3.114) umschreiben zu

$$Z_N^B(t(N)) = \frac{[t(N)]^{3/2}}{\zeta(3/2)} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^{3/2}} Z_{N-n}^B(t(N)). \quad (3.116)$$

Zur Berechnung der N -Teilchen-Zustandssumme müssen wir demnach alle Zustandssummen für kleinere Teilchenzahlen als N kennen. Das kann nun zu gewissen Verwirrungen bei der Auswertung

der obigen Gleichung führen. Die in (3.115) stehende Größe V/N kann nämlich nicht durchgehend als die reziproke Teilchenzahldichte interpretiert werden. In der Tat ist N/V die Teilchendichte nur für den N -Teilchen-Zustand. Wollen wir diese Dichte als eine feste Größe annehmen, so müssen wir während des gesamten Rekursionsprozesses für die Konstanz des Volumens V sorgen, obwohl sich die Teilchenzahlen permanent ändern. Dies führt dann dazu, dass die Variable t in den Zustandssummen $Z_{N-n}^B(t)$ bei jeder Rekursionsstufe von $t(N-n)$ zu $t(N)$ reskaliert werden muss. Das ist natürlich unpraktikabel und zwingt uns, eine andere dimensionslose Variable zu verwenden. Dafür eignet sich z.B. die nicht explizit teilchenzahlabhängige Größe

$$\tau \equiv \frac{V^{2/3}}{\lambda^2} = \left(\frac{N}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} t, \quad (3.117)$$

die wir im Prinzip bereits in der Gleichung (2.178) definiert haben. Unter Verwendung dieser Variablen bekommt die Rekursion (3.114) die folgende Form:

$$Z_N^B(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^{3/2}} Z_{N-n}^B(\tau). \quad (3.118)$$

Diese Rekursion kann ohne Probleme ausgewertet werden, wie im Folgenden noch skizziert wird. Als Rekursionsanfang dient uns die Identität (3.57) mit $Z_0(\tau) = 1$. Ausgehend von dieser geben wir hier die Zustandssummen für ein und zwei Teilchen an:

$$Z_1^B(\tau) = \tau^{3/2}, \quad Z_2^B(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{2^{5/2}} + \frac{\tau^3}{2}, \quad (3.119)$$

Diese Ausdrücke kann man anschließend zur Rekursion der Zustandssumme für drei und mehr Teilchen verwenden. Weiterhin interessieren wir uns für die thermodynamischen Eigenschaften in endlichen bosonischen Ensembles. Ein wichtiger Vertreter dieser ist die Wärmekapazität (2.96), die uns schon vom Abschnitt 2.2.1 bekannt ist. Im kanonischen Ensemble ergibt sie sich nach der einfachen Identität

$$C_N^B = k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left\{ T \ln Z_N^B(T) \right\}. \quad (3.120)$$

Speziell für ein bzw. zwei Teilchen ergeben sich mit (3.119) die folgenden Wärmekapazitäten:

$$C_1^B(\tau) = \frac{3}{2} k_B, \quad C_2^B(\tau) = 3k_B \frac{1 + 9\sqrt{2}\tau^{3/2} + 16\tau^3}{2 + 8\sqrt{2}\tau^{3/2} + 16\tau^3}, \quad (3.121)$$

wenn wir die dimensionslose Variable (3.117) verwenden.

Die Resultate (3.121) sind in Abb. 3.3 a) graphisch dargestellt. Interessanterweise besitzt der Ein-Teilchen-Zustand eine konstante Wärmekapazität, was man auch schon aus (3.121) erkennt. Für größere Teilchenzahlen nähern sich jedoch die Kurven dem Verhalten im thermodynamischen Limes aus Abb. 2.1, die wir aus den großkanonischen Rechnungen im Abschnitt 2.2.2 kennen. Aus der analytischen Untersuchung von (3.121) erhält man im Hochtemperaturlimes $\tau \gg 1$ neben $C_1^B \rightarrow 3k_B/2$ für ein Teilchen noch $C_2^B \rightarrow 3k_B$ für zwei Teilchen, was nun das allgemeine

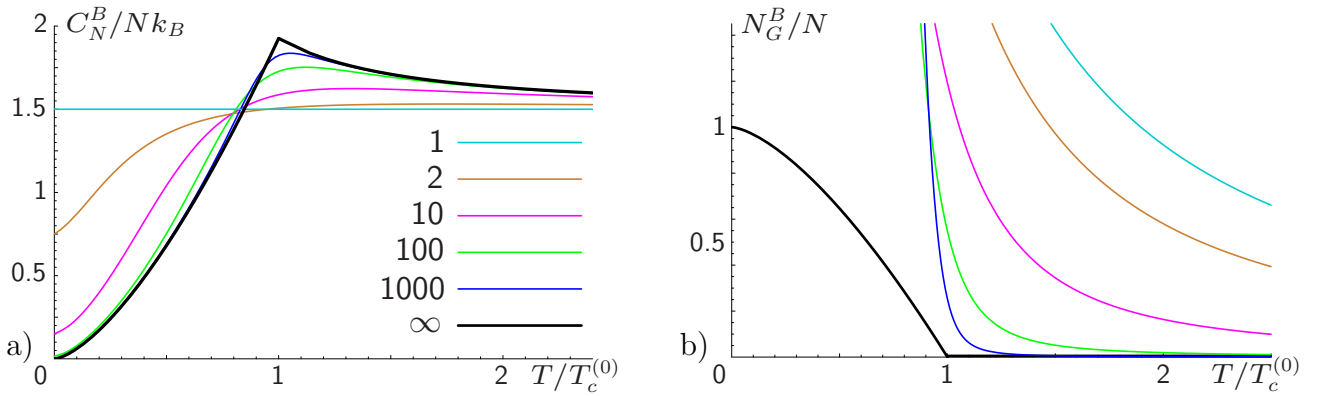


Abbildung 3.3: a) Wärmekapazität pro Teilchen für kanonische Ensembles aus $N = 1, 2, 10, 100, 1000$ Bosonen im homogenen Gas-Modell nach (3.114) und (3.120). b) Wie in a), jedoch für die Grundzustand-Besetzung (3.81). Die jeweiligen schwarzen Kurven stehen für großkanonische Resultate im thermodynamischen Limes aus Abb. 2.1 und 1.2.

Dulong-Petit-Gesetz $C_N^B \rightarrow 3Nk_B/2$ widerspiegelt. Für tiefe Temperaturen mit $\tau \ll 1$ finden wir dagegen aus (3.121) und bei weiterführenden Untersuchungen auch ganz allgemein das von Teilchenzahl N unabhängige Resultat $C_N^B \rightarrow 3k_B/2$. Somit fällt die Wärmekapazität pro Teilchen bei verschwindenden Temperaturen mit steigendem N ab, allerdings ohne dabei zu verschwinden. Dieser Umstand widerspricht dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik.

Ein noch gravierenderes Problem des homogenen Bose-Gases wird deutlich, wenn man versucht, den Anteil der Teilchen im Grundzustand zu quantifizieren. Mit der Grundzustands-Energie $E_G = 0$ ergibt sich für den Grundzustands-Beitrag zum n -Zyklus $Z_1(n\beta)$ nach (3.64)

$$\gamma_n(\tau) = 1 . \quad (3.122)$$

Damit können wir beispielsweise die mittleren Teilchenzahlen im Grundzustand für das Ein- und Zwei-Teilchen-Ensemble im homogenen Fall bestimmen. Diese entnehmen wir der Bestimmungsgleichung (3.81) mit den Zustandssummen (3.119) und erhalten

$$\langle N_G \rangle_1^B = \frac{1}{\tau^{3/2}} , \quad \langle N_G \rangle_2^B = \frac{4\sqrt{2}}{\tau^{3/2}} \frac{1 + \tau^{3/2}}{1 + 2\sqrt{2}\tau^{3/2}} . \quad (3.123)$$

Wie man daraus unschwer erkennt, verschwinden diese Mittelwerte bei höheren Temperaturen, aber divergieren bei tieferen. Diese Divergenz ist unphysikalisch, zumal $\langle N_G \rangle_N^B / N$ die Wahrscheinlichkeit angibt, ein Teilchen im Grundzustand zu finden, und somit sinnvollerweise nie größer als eins sein kann.

Um die Wärmekapazität und die Grundzustand-Besetzung für Ensembles mit größeren Teilchenzahlen N zu berechnen, empfiehlt es sich, die N -Teilchen-Zustandssummen aus der Rekursionsbeziehung (3.118) explizit numerisch zu bestimmen. Diese numerische Auswertung ist technisch in der Tat etwas umständlich und ist aus diesem Grund im Anhang C genauer dargestellt. Die Resultate solcher Rechnungen sind jedenfalls in Abb. 3.3 graphisch dargestellt. Wie man daraus erkennt, werden die oben erwähnten Probleme auch für steigende Teilchenzahlen nicht behoben.

Für die Wärmekapazität scheinen die Werte für niedrige Temperaturen mit steigender Teilchenzahl immer stärker unterdrückt zu sein, um im thermodynamischen Limes komplett zu verschwinden. Dennoch entsteht dieser Eindruck nur aufgrund der Normierung der Wärmekapazität auf ein Teilchen. Wie bereits oben erwähnt, ergibt sich am Temperaturnullpunkt für alle Teilchenzahlen ein von Null verschiedener Wert $C_N^B(T=0) = 3k_B/2$. Die Grundzustand-Besetzung aus Abb. 3.3 b) scheint dagegen mit dem durch die schwarze Kurve dargestellten Resultat im thermodynamischen Limes nichts gemein zu haben. Vielmehr scheint die für ein und zwei Teilchen gefundene Divergenz bei tiefen Temperaturen für größere Teilchenzahlen noch stärker ausgeprägt zu sein. Ob diese Unphysikalität der Ergebnisse spezifisch für das kanonische Ensemble ist oder an dem Modell des homogenen Bose-Gases liegt, bedarf noch einer tieferen Untersuchung, die wir im Folgenden schildern werden.

Hierbei erinnern wir uns zuerst an die Probleme mit dem homogenen Bose-Gas innerhalb der großkanonischen Ensemble-Theorie aus Abschnitt 2.2. Dort haben wir nämlich festgestellt, dass die Teilchenzahl unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur nicht festgehalten werden konnte. Im Abschnitt 2.2.2 haben wir jedoch weiterhin gezeigt, dass das nur der Fall war, solange der Grundzustand nicht extra berücksichtigt wurde. Was das im kanonischen Ensemble bedeutet, kann man eigentlich bereits am Ausdruck für den Anteil der angeregten Zustände zum n -Zyklus (3.65) erkennen. Dieser ergibt sich nämlich in einem homogenen System zu

$$\xi_n(\tau) = \frac{\tau^{3/2}}{n^{3/2}} - 1 \quad (3.124)$$

und ist für genügend niedrige Temperaturen negativ. Diese Aussage entzieht sich jeder vernünftigen Interpretation, insbesondere wenn man bedenkt, dass nach Definition (3.65) eine positiv definite Größe vorliegt. In der Tat gibt dies uns einen Hinweis darauf, dass die Näherung (2.90) der kontinuierlichen Integration anstelle der Summation über alle Energiewerte in diesem Fall etwas überstrapaziert wurde. Das haben wir auch schon am Anfang des Abschnitts 2.2.2 diskutiert mit der Feststellung, dass die kontinuierliche Impulsintegration den wichtigen Beitrag des Grundzustandes übersieht. Die Lösung dieses Problems bestand darin, den Grundzustand separat zu behandeln, was in der verbesserten Ersetzungsvorschrift (2.106) resultierte.

Um zu sehen, wie die gerade geschilderte Verbesserung die physikalischen Größen beeinflusst, wenden wir zuerst die Näherung (2.106) an, um die Imaginärzeit-Amplitude (3.34) zu bestimmen. Hier ergibt sich im Unterschied zu (3.112)

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a) = (\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a)_G + \left[\frac{M}{2\pi\hbar(\tau_b - \tau_a)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{M}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2}{\tau_b - \tau_a} \right\} \quad (3.125)$$

mit der Grundzustandsamplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b | \mathbf{x}, \tau_a)_G = \psi_0(\mathbf{x}') e^0 \psi_0^*(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \quad , \quad (3.126)$$

die wir mit dem verschwindenden Energieeigenwert aus (2.90) und der konstanten Wellenfunktion $\psi_0(\mathbf{x}) = 1/\sqrt{V}$ aus (2.88) erhalten. Der Beitrag eines n -fachen Zyklus berechnet sich nach (3.44)

aus der Amplitude (3.125) zu

$$Z_1(n\beta) = 1 + \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{n^{3/2}} \quad (3.127)$$

und besteht nun aus zwei Termen

$$\gamma_n(\beta) = 1 \quad , \quad \xi_n(\beta) = \frac{V}{\lambda^3} \frac{1}{n^{3/2}} \quad , \quad (3.128)$$

die entsprechend der Zerlegung (3.63) den Grundzustands-Beitrag und den Anteil der angeregten Teilchen darstellen. Der erste der beiden ist gegenüber (3.122) unverändert geblieben. Der zweite ist jedoch im Gegensatz zum Resultat (3.124) in der Tat für alle Temperaturen positiv.

Vergleicht man die Ein-Teilchen-Zustandssumme aus (3.127) mit der aus (3.113), so sieht man, dass der einzige Unterschied zwischen den beiden nur in einer eins besteht, die vom extra behandelten Grundzustand herrührt. Dies macht sich im Hochtemperatur-Bereich nicht bemerkbar, ist aber im Tieftemperatur-Bereich von entscheidender Bedeutung. So ergibt sich für die Wärmekapazität eines einzigen Teilchens nach (3.120) mit Hilfe der dimensionslosen Temperatur (3.117)

$$C_1^B(\tau) = \frac{3k_B}{2} \frac{5\tau^{3/2} + 2\tau^3}{2 + 4\tau^{3/2} + 2\tau^3} \quad (3.129)$$

im Gegensatz zum früheren Ergebnis (3.121). Im Hochtemperaturbereich ergibt sich daraus näherungsweise $C_1^B(\tau) \approx 3k_B/2$, womit nach wie vor das Dulong-Petit-Gesetz gilt. Für tiefe Temperaturen verschwindet jedoch der Ausdruck (3.129) und erfüllt somit den dritten Hauptsatz der Thermodynamik. In Abb. 3.4 a) ist das unterschiedliche Verhalten der Wärmekapazitäten für ein Teilchen aus (3.121) und (3.129) graphisch verdeutlicht. Die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand eines Ein-Teilchen-Systems lässt sich nach (3.81) berechnen mit dem Resultat

$$\langle N_G \rangle_1^B = \frac{1}{1 + \tau^{3/2}} \quad . \quad (3.130)$$

Diese Größe verschwindet für hohe Temperaturen, konvergiert aber gegen den Wert eins von unten im Tieftemperaturlimit und gibt somit das korrekte Temperatur-Verhalten wieder. Der Vergleich zum früheren Ergebnis aus (3.123) ist in Abb. 3.4 b) graphisch illustriert.

Nach diesen ersten Erfolgen der korrigierten Version des homogenen Bose-Gases können wir voranschreiten und die Wärmekapazität und die Grundzustand-Besetzung in größeren Ensembles ausrechnen. Die dazu benötigten Zustandssummen können nach der Rekursion

$$Z_N^B(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left[1 + \frac{\tau^{3/2}}{n^{3/2}} \right] Z_{N-n}^B(\tau) \quad (3.131)$$

bestimmt werden, die wir aus (3.62) mit der Spezifizierung (3.127) erhalten. Die jeweiligen mittleren Teilchenzahlen im Grundzustand ergeben sich nach (3.81) mit (3.128) zu

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} \quad . \quad (3.132)$$

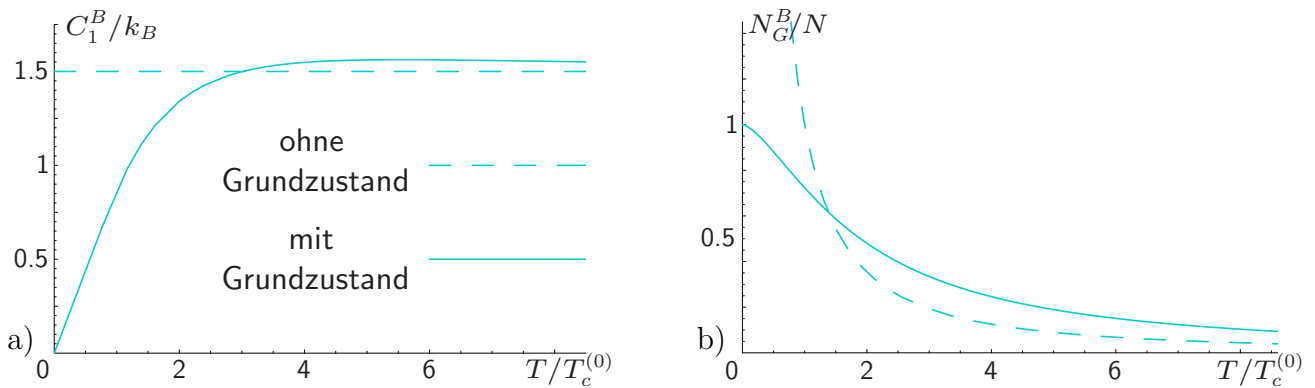


Abbildung 3.4: a) Wärmekapazität für ein einziges Teilchen im homogenen Fall ohne und mit dem extra Grundzustand. b) Dasselbe für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Grundzustand zu finden.

Die Details zur numerischen Auswertung der Zustandssumme nach (3.131) sind im Anhang C dargestellt. Die Ergebnisse für die Wärmekapazität sind aus den jeweiligen Zustandssummen nach der Gleichung (3.120) als die zweifache Ableitung nach der Temperatur herzuleiten. Für die Grundzustand-Besetzung sind sie dagegen unmittelbar aus der Gleichung (3.132) zu entnehmen. In Abb. 3.5 sind einige dieser Resultate graphisch zusammengefasst.

Aus den Graphiken erkennt man ganz deutlich, dass die Wärmekapazitäten im Tieftemperaturbereich für alle Teilchenzahlen verschwinden und somit nun auch dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik genügen, ohne für hohe Temperaturen das Dulong-Petit-Gesetz zu verletzen. Für steigende Teilchenzahlen kann man außerdem noch die Konvergenz gegen das Resultat im thermodynamischen Limes beobachten. Noch deutlicher fällt jedoch die positive Tendenz bei der Grundzustand-Besetzung auf. Alle Kurven sind von oben durch eins beschränkt, wie es von einer Wahrscheinlichkeit zu erwarten ist. Zu höheren Temperaturen hin verschwinden die Wahrscheinlichkeiten und erreichen ihren Maximalwert beim Temperaturnullpunkt. Auch hier ist die Tendenz der Kurven zu erkennen, bei größeren Teilchenzahlen dem thermodynamischen Limes immer ähnlicher zu werden. Dass alle Resultate für endliche Ensembles die Werte im thermodynamischen Limes übersteigen, deutet auf einen positiven Finite-Size-Effekt. Genaure Untersuchungen zu diesem Verhalten werden jedoch im nächsten Unterabschnitt durchgeführt, wo wir uns mit der quantenmechanisch exakten Rechnung im Kastenpotential beschäftigen.

An dieser Stelle sei noch betont, dass die Untersuchungen dieses Unterabschnitts in der Tat die Möglichkeit zeigen, das homogene Bose-Gas innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie zu beschreiben. Dass das keine triviale Feststellung ist, zeigen einige Verwirrungen in der Literatur. Da die naiven Rechnungen zum homogenen Bose-Gas keine sinnvollen Resultate zur Grundzustand-Besetzung lieferten, wie wir am Anfang dieses Abschnittes zeigten, sahen sich die Autoren der Arbeit [75] gezwungen, den Kondensatanteil anders zu definieren, als wir es hier taten. Ihre Definition basierte auf der Feststellung von Ceperley (z.B. in Ref. [82]), dass sich die Zyklen mit Windungszahlen $n > 1$ nur bei tieferen Temperaturen ausbilden. Speziell um den kritischen Temperaturwert herum treten vermehrt solch größere Windungszahlen auf, und man kann von einer

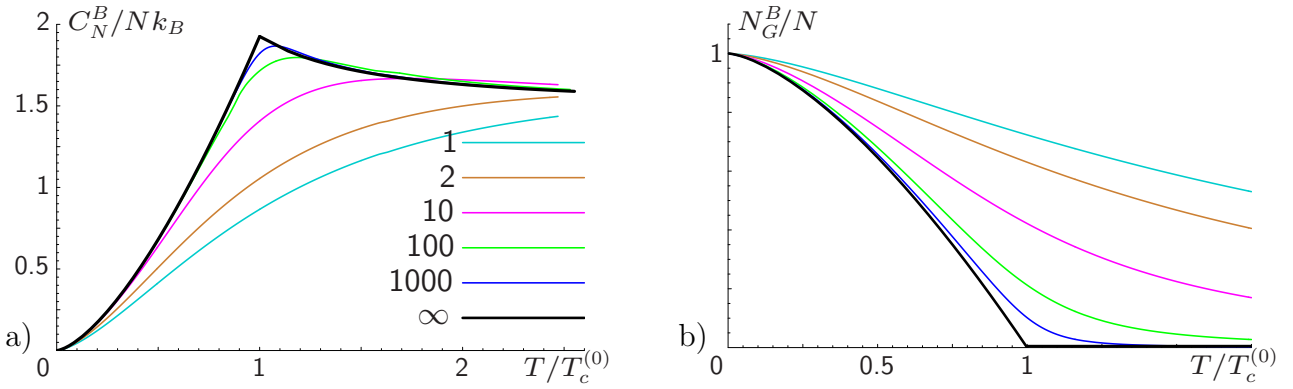


Abbildung 3.5: a) Wärmekapazität und b) die Grundzustand-Besetzung für das System wie in Abb. 3.3, jedoch nach der expliziten Berücksichtigung des Grundzustandes in der Rekursion (3.131).

Proliferation der Zyklen sprechen. In [75] wurde nun dieses Konzept dahingehend ausgenutzt, die Proliferation mit der Bose-Einstein-Kondensation gleich zu setzen. Das scheint auch keine schlechte Idee zu sein, insbesondere angesichts der Tatsache, dass bei der Näherung des homogenen Gases ohne extra Grundzustand am Temperaturnullpunkt nur ein einziger N -Zyklus auftritt, in dem alle Teilchen eingebunden sind. Das erkennt man übrigens bereits aus der Struktur der Rekursion (3.118), wo der Summand mit $n = N$ einen Term der Ordnung $\tau^{3/2}$ liefert, während alle anderen mindestens von der Ordnung τ^3 und somit unterdrückt sind. Nach der allgemeinen Beziehung (3.62) weiß man aber noch, dass der $n = N$ -Term gerade dem N -Zyklus entspricht. Die Untersuchungen des homogenen Bose-Gases mit dem extra Grundzustand liefern jedoch ein etwas anderes Bild. Dort nutzt man die Rekursionsrelation (3.131), in der es zu jedem Summationsindex n einen Term der Ordnung τ^0 gibt. Speziell am absoluten Temperaturnullpunkt ergeben daher genauere Rechnungen, dass alle Windungszahlen mit gleicher Wahrscheinlichkeit $1/N$ auftreten können. Selbstverständlich können sich die Teilchen im energetisch niedrigsten Grundzustand auch in allen möglichen Zyklen aufhalten, im längsten genauso gut wie in den kürzesten Trivialzyklen. Man kann zwar mit Recht behaupten, dass die Teilchen in den längeren Zyklen miteinander energetisch korreliert sind und daher die Zykluslängen eine nicht unwesentliche Rolle bei der Quantifizierung der suprafluiden Dichte spielen, wie z.B. in den Arbeiten [82,83] gezeigt wurde. Mit der Grundzustand-Besetzung hat die Windungszahlstatistik aber nicht direkt etwas zu tun.

Im letzten Teil dieses Abschnitts beschäftigen wir uns noch mit dem Propagator in einem N -Teilchen-Ensemble und insbesondere mit seinem imaginärzeitlich lokalen Spezialfall. Dieser ergibt sich mit der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.125) nach der Gleichung (3.109) zu

$$G_N(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) = G_{N,G}(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) + \frac{1}{V Z_N^B(\tau)} \sum_{n=1}^N \frac{\tau^{3/2}}{n^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{M(\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2}{2n\beta\hbar^2} \right\} Z_{N-n}^B(\tau). \quad (3.133)$$

Dabei repräsentiert der erste Summand den explizit ortsunabhängigen Grundzustand-Anteil zum Propagator

$$G_{N,G}(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) \equiv \frac{1}{V Z_N^B(\tau)} \sum_{n=1}^N Z_{N-n}^B(\tau). \quad (3.134)$$

Betrachten wir noch den örtlich lokalen Spezialfall des Propagators (3.133), so erhalten wir nach der Beziehung (3.111) die Teilchendichte in einem homogenen System, die sich mit Hilfe der N -Teilchen-Zustandssumme (3.131) unmittelbar als

$$n_N(\mathbf{x}) = \frac{N}{V} \quad (3.135)$$

schreiben lässt. Übrigens lässt sich der Grundzustand-Propagator (3.134) analog dazu unmittelbar mit (3.132) als

$$G_{N,G}(\mathbf{x}', \tau; \mathbf{x}, \tau) = \frac{\langle N_G \rangle_N^B}{V} \quad (3.136)$$

umschreiben. Interessanterweise hängt der Ausdruck auf der rechten Seite der Gleichung nicht vom Ort ab. Somit entspricht es einerseits der Teilchendichte im Grundzustand. Andererseits würde dieser Term auch im Limes $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \rightarrow \infty$ bestehen bleiben, während der zweite Term in (3.133) verschwinden würde. Darin äußert sich die Langdistanzordnung ODLRO, die wir bereits im Abschnitt 2.5 mit (2.213) im großkanonischen Ensemble festgestellt haben. Offensichtlich besteht diesbezüglich kein Unterschied zwischen den beiden Ensemble-Theorien.

3.2.2 Bose-Gas im Kastenpotential

Im letzten Unterabschnitt behandelten wir den Spezialfall eines homogenen Bose-Gases. Dafür musste künstlich das Volumen V eingeführt werden, um der Forderung nach einer endlichen Teilchenzahldichte zu genügen. Dieses Volumen wurde zwar als endlich angenommen, aber in einer Weise, dass das System explizit keine weitere Informationen darüber enthielt. In diesem Unterabschnitt diskutieren wir nun das Problem eines idealen Bose-Gases, das in einem kubischen Kasten der Kantenlänge L mit dem Potential (2.171) eingesperrt ist. Das Volumen $V = L^3$ hat hierbei eine reale Bedeutung, denn obwohl im Innern des Kastens das Potential verschwindet, wirken sich die Potentialwände mittels Dirichletscher Randbedingungen auf die möglichen Zustände (2.172) aus. Wie stark die Auswirkungen der Randeffekte gerade auf kleinere Ensembles sind, werden wir im Folgenden noch zeigen. Ein analoges Problem haben wir schon im Abschnitt 2.4 aus der Sicht der großkanonischen Ensemble-Theorie studiert. Obwohl die hier präsentierte kanonische Vorgehensweise prinzipiell anders ist als die großkanonische, werden wir hier noch sehen, dass sich die Resultate nur für kleinere Ensembles sichtbar unterscheiden.

Als Ausgangspunkt der Untersuchungen dieses Unterabschnitts dienen uns die diskreten Energieeigenwerte im Kastenpotential (2.173) mit (2.174) und die Wellenfunktionen (2.172). Mit diesen erhalten wir für die Imaginärzeit-Amplitude (3.34)

$$(\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a) = \frac{1}{L^3} \prod_{j=1}^3 \left[\sum_{m_j=1}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\pi^2(\tau_b-\tau_a)m_j^2}{2ML^2}} \left\{ \cos \frac{\pi m_j(x'_j - x_j)}{L} - (-1)^{m_j} \cos \frac{\pi m_j(x'_j + x_j)}{L} \right\} \right] \quad (3.137)$$

und für den Grundzustand-Anteil davon

$$(\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a)_G = \frac{1}{L^3} e^{-3 \frac{\hbar \pi^2 (\tau_b - \tau_a)}{2ML^2}} \prod_{j=1}^3 \left[\cos \frac{\pi(x'_j - x_j)}{L} + \cos \frac{\pi(x'_j + x_j)}{L} \right]. \quad (3.138)$$

Entsprechend der Beziehung (3.44) ergibt sich daraus für den Beitrag eines geschlossenen Zyklus der Länge n

$$Z_1(n\beta) = \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} m^2} \right\}^3, \quad (3.139)$$

den wir alternativ dazu auch aus der Spektral-Darstellung (3.45) erhalten können. Für seinen Grundzustand-Anteil (3.64) erhalten wir mit dem nichtverschwindenden Wert der Grundzustandsenergie (2.175)

$$\gamma_n(\beta) = e^{-3n\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2}}. \quad (3.140)$$

Unter Verwendung des dimensionslosen Temperaturparameters (2.178) bzw. (3.117) erhalten wir damit weiterhin die spezifizierte Rekursionsrelation (3.62) zu

$$Z_N^B(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi m^2 / (4\tau)} \right\}^3 Z_{N-n}^B(\tau). \quad (3.141)$$

Die Grundzustand-Besetzung erhalten wir aus (3.81), so dass sich mit (3.140) daraus

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N e^{-3n\pi / (4\tau)} \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} \quad (3.142)$$

ergibt.

Bei Berechnungen der Zustandssumme nach der Rekursion (3.141) ist zu beachten, dass die m -Reihe nur für kleine Parameter τ/n schnell konvergiert und durch einige wenigen Summanden wiedergegeben wird. Für größere Werte dieser Parameter kann die Reihe jedoch nur unzureichend durch eine Summe approximiert werden. Einen analogen Sachverhalt haben wir bereits im Abschnitt 2.4.2 diskutiert. Das Problem wurde dort durch Verwendung der dualen Form (2.184) gelöst, wonach die ursprüngliche Reihe durch

$$\sum_{m=1}^{\infty} e^{-n\pi m^2 / (4\tau)} = \sqrt{\frac{\tau}{n}} - \frac{1}{2} + 2 \sqrt{\frac{\tau}{n}} \sum_{q=1}^{\infty} e^{-4\tau\pi q^2 / n} \quad (3.143)$$

zu ersetzen ist. Die hierbei auftretende Reihe konvergiert nun gerade für große τ/n -Werte schnell und setzt somit die ursprüngliche Reihe in diesem Bereich fort. Für detailliertere Untersuchungen zu dieser Frage sei auf den Abschnitt 2.4.2 verwiesen. Nun sind wir in der Lage, die Rekursionsrelation (3.141) auszuwerten, und zwar nach einem numerischen Verfahren, das im Anhang C erörtert ist. Die dadurch gewonnene N -Teilchen-Zustandssumme kann anschließend dazu verwendet werden, die Wärmekapazität nach der Identität (3.120) zu berechnen. Die entsprechenden Resultate sind in Abb. 3.6 a) und b) graphisch dargestellt.

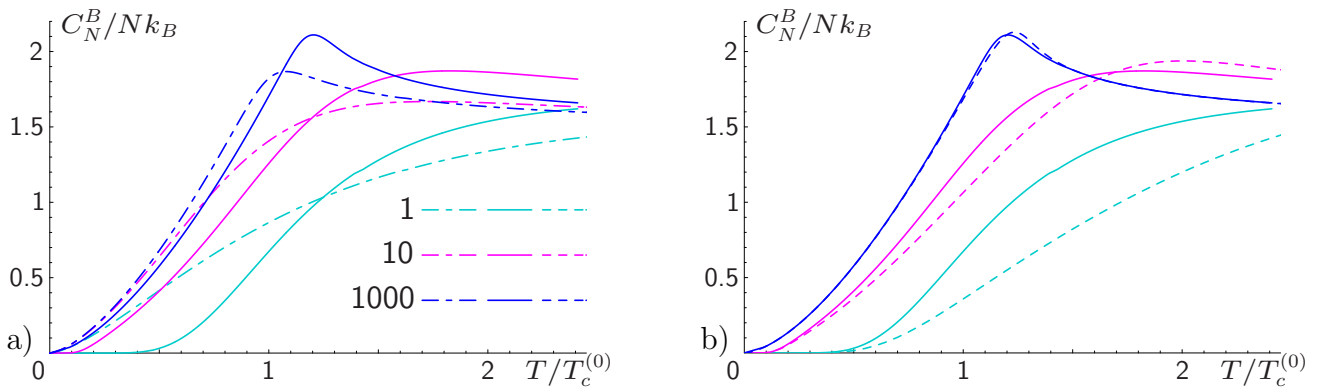


Abbildung 3.6: a) Vergleich der Wärmekapazität pro Teilchen zwischen den exakt quantenmechanischen Resultaten im Kastenpotential für kanonische Ensembles aus $N = 1, 10$ und 1000 Bosonen (durchgezogene Kurven) und den semiklassischen Ergebnissen aus Abb. 3.5 a) (gestrichpunktete Kurven). b) Vergleich zwischen den exakten Resultaten für kanonische Ensembles (durchgezogen) und den großkanonischen Ergebnissen aus Abb. 2.9 b) (gestrichelt).

Aus Abb. 3.6 a) erkennen wir den deutlichen Unterschied zwischen den exakten quantenmechanischen Ergebnissen dieses Abschnitts und den semiklassischen Resultaten aus Abb. 3.5 im letzten Abschnitt. Obwohl sich die entsprechenden Kurven mit steigenden Teilchenzahlen tendenziell annähern, gibt es selbst für $N = 1000$ noch gravierende Unterschiede, welche insbesondere in Temperaturregionen um die Maximallagen der Wärmekapazität sichtbar sind. Weiterhin weist deren Verhalten bei niedrigen Temperaturen für kleinere Ensembles starke Differenzen auf. Auffällig ist dabei die starke exponentielle Unterdrückung der Wärmekapazität nach exakter Rechnung in einem weiten Tieftemperaturbereich. Dieser schrumpft zwar mit steigender Teilchenzahl zusammen, ist aber für $N = 10$ Teilchen noch erkennbar und reicht für ein einziges Teilchen bis zum halben Wert der kritischen Temperatur. Dieser Sachverhalt fehlt der semiklassischen Näherung komplett, was auf den quantenmechanischen Ursprung dieses Effektes schließen lässt. In der Tat ist dafür die nichtverschwindende Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand verantwortlich, welche von der semiklassischen Näherung mit dem kontinuierlichen Energiespektrum übersehen wird.

Weiterhin haben wir in Abb. 3.6 b) die Resultate der exakten quantenmechanischen Rechnung dieses Abschnitts mit den entsprechenden Ergebnissen in der großkanonischen Ensemble-Theorie aus Abb. 2.9 b) verglichen. Hier sieht man deutlich, wie der Unterschied zwischen den kanonischen und den großkanonischen Wärmekapazitäten mit steigenden Teilchenzahlen verschwindet. In beiden Fällen sieht man auch den Bereich, wo diese Größe exponentiell unterdrückt ist. Allerdings entwickeln sich die Wärmekapazitäten bei einer Temperaturerhöhung über diesen Exponentialbereich hinaus etwas verschieden. So verläuft die großkanonische Kurve für das Ein-Teilchen-System im Tieftemperatur-Bereich noch deutlich flacher als deren kanonisches Gegenstück. Für $N = 1000$ Teilchen ist dagegen der Unterschied speziell im Tieftemperaturbereich kaum erkennbar. Wie bereits in Abschnitt 1.3 des einleitenden Kapitels beschrieben, sind solche Unterschiede zwischen den kanonischen und großkanonischen Resultaten für kleinere Teilchenzahlen nicht sehr verwunderlich, weil der großkanonischen Vorgehensweise ein Mittelungsprozess über Ensembles verschied-

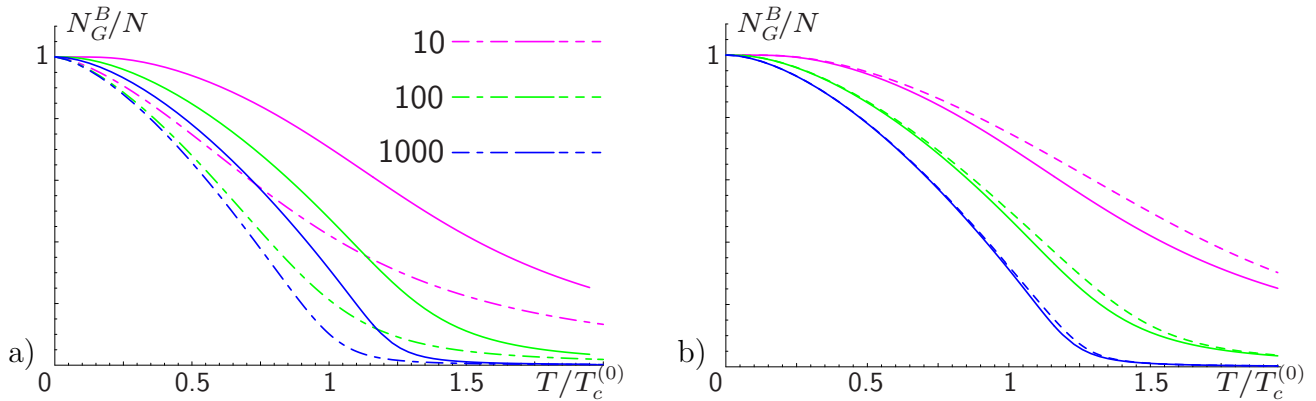


Abbildung 3.7: Wie in Abb. 3.6, jedoch für den Anteil der Teilchen im Grundzustand.

dener Größen inhärent ist, welcher in der kanonischen Ensemble-Theorie der Konstruktion nach wegfällt.

An dieser Stelle diskutieren wir noch die Grundzustand-Besetzung, die uns unmittelbar durch die Gleichung (3.142) gegeben ist. Auf die technischen Details der Rechnung sei auch diesmal auf den Anhang C verwiesen. Die entsprechenden Resultate sind in Abb. 3.7 a) und b) durch die durchgezogenen Kurven für die Teilchenzahlen $N = 10, 100$ und 1000 graphisch dargestellt. In Abb. 3.7 a) sind sie zusammen mit den Resultaten aus der Rechnung zum homogenen System mit dem extra berücksichtigten Grundzustand aus Abb. 3.5 b) aufgetragen. Obwohl letzteres Resultat die führende semiklassische Näherung zum Bose-Gas im Kastenpotential repräsentiert, stellen wir auch bei der Grundzustand-Besetzung nur eine verhältnismässig langsame Annäherung der jeweiligen Resultate mit der steigenden Teilchenzahl fest. Die Abweichung vom thermodynamischen Limes, die den Finite-Size-Effekt darstellt, fällt im exakt behandelten Kastenpotential selbst für $N = 1000$ Teilchen noch viel deutlicher aus als für das homogene Problem (gestrichelte Kurven). Wie man jedoch aus Abb. 3.7 b) sieht, sind derartige Finite-Size-Abweichungen in den kanonischen Resultaten dieses Abschnitts etwas schwächer ausgeprägt als nach den entsprechenden großkanonischen Rechnungen (gestrichelte Kurven).

Der Finite-Size-Effekt lässt sich am deutlichsten an den Lagen der quasikritischen Temperaturen studieren. In Analogie zu großkanonischen Rechnungen im Abschnitt 2.3.3 können wir diese Temperaturen mit den Punkten identifizieren, an denen die Kurvenverläufe für die Grundzustand-Besetzungen ihre maximalen Krümmungen aufweisen. Die so abgelesenen Punkte für Ensembles aus $N = 100, 300, \dots, 100.000$ und 300.000 Teilchen sind in der Abb. 3.8 durch die runden Punkte dargestellt. Die analogen Temperaturwerte aus der großkanonischen Rechnung im Abschnitt 2.4.2 sind wie schon in Abb. 2.7 durch die Dreiecke dargestellt. Wie man daraus erkennt, unterscheiden sich kanonische Resultate von den analogen großkanonischen insbesondere für kleinere Systeme nicht unerheblich. So beträgt die Abweichung für $N = 100$ Teilchen etwa 10%, aber selbst für eine moderate Teilchenzahl von $N = 100.000$ liegt der Unterschied noch im 1%-Bereich.

Die in Abb. 3.8 aufgetragene gestrichelte Kurve stellt das Resultat der numerischen Auswertung der in Abschnitt 2.4.1 gewonnenen Gleichung (2.201) für die großkanonischen quasikritischen Punkte dar. An dieser Stelle möchte man eine ähnliche analytische Kurve auch für die kanonischen

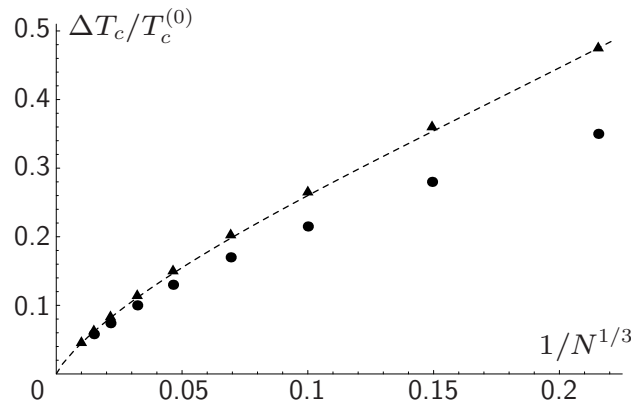


Abbildung 3.8: Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem Wert im thermodynamischen Limes $\Delta T_c / T_c^{(0)} = t_c - 1$ für kanonische Ensembles aus $N = 100, 300, \dots, 100.000$ und 300.000 Bosonen im Kastenpotential (runde Punkte von rechts nach links). Zum Vergleich sind die entsprechenden großkanonischen Resultate aus Abb. 2.7 (Dreiecke) dargestellt. Die gestrichelte Linie ist das Resultat der numerischen Auswertung der Gleichung (2.201) im großkanonischen Ensemble.

Ergebnissen finden. Insbesondere interessiert uns hierbei die Frage, ob die Abweichung bereits mit der führenden Ordnung $N^{-1/3}$ oder erst mit $N^{-2/3}$ skaliert. Unmittelbar aus Abb. 3.8 scheint die erste Alternative wohl eher zutreffend zu sein, aufgrund des logarithmischen Anstiegs für sehr große Teilchenzahlen ist das Ablesen jedoch etwas erschwert. Mit den uns bekannten Methoden lässt sich eine analytische Kurve für kanonische Resultate leider nicht finden, so dass wir einer quantitativen Aussage über die Abweichungen zwischen kanonischen und großkanonischen Werten noch schuldig bleiben. Die Gründe dafür werden noch im Folgenden genauer erörtert.

Die Bestimmung der quasikritischen Temperatur direkt aus den kanonischen N -Teilchen-Zustandssummen ist in jedem Fall eine nichtanalytische Prozedur. Das heißt, dass für jede Teilchenzahl N die Rechnung von Neuem gemacht werden muss, so wie es geschah, als wir die Werte der quasikritischen Temperatur aus den maximalen Krümmungen der Grundzustand-Besetzung abgelesen haben. Stattdessen suchen wir nun nach einer einzigen Gleichung, die die Lagen der quasikritischen Temperaturen für alle Teilchenzahlen N angibt. Wie dies möglich ist, haben wir bereits in der semiklassischen Näherung im Rahmen der großkanonischen Ensemble-Theorie im Abschnitt 2.4.1 gesehen. Dass der Erfolg dieser Vorgehensweise nicht allein an der semiklassischen Näherung liegt, ist anhand der kanonischen Rechnungen im letzten Abschnitt 3.2.1 klar. Der Gegenstand der dortigen Untersuchungen war das homogene Bose-Gas, welches als die semiklassische Näherung zum Problem des Bose-Gases im Kastenpotential gesehen werden kann. Diese semiklassische Näherung lieferte zwar die Rekursionsbeziehung (3.131), die etwas einfacher als diejenige im vorliegenden Abschnitt (3.141) ist, von einer analytischen Form kann man dennoch auch dabei nicht sprechen. Dieser Umstand ist vielmehr allen kanonischen Rechnungen gemein und kann nur umgangen werden, wenn wir von der exakt kanonischen Vorgehensweise abrücken. Eine solche semi-kanonische Form der Zustandssumme kann z.B. aus dem großkanonischen Resultat durch die so genannte

Sattelpunkt-Approximation gewonnen werden. Diese Prozedur wird im Abschnitt 3.3 noch genauer diskutiert. An dieser Stelle greifen wir jedoch mit der Feststellung vor, dass diese analytische Vorgehensweise insbesondere in dem uns interessierenden Bereich um die kritische Temperatur nicht zum Erfolg führt. Aus diesem Grund sind wir bei Untersuchungen der quasikritischen Temperatur im kanonischen Ensemble auf die numerischen Ergebnisse aus Abb. 3.8 angewiesen [42].

Nun diskutieren wir noch die Dichte für Bose-Gase in dem Kastenpotential. Auch diesmal gilt unsere Aufmerksamkeit dem Vergleich zwischen dem kanonischen und dem großkanonischen Ensemble, wobei wir den letzteren bereits im Abschnitt 2.5 besprochen haben. Für die kanonischen Untersuchungen gehen wir von der Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.137) aus, dessen örtlich lokale Spezialfall mit den Imaginärzeiten $\tau_a = 0$ und $\tau_b = k\hbar\beta$

$$(\mathbf{x}, k\hbar\beta; \mathbf{x}, 0) = \frac{1}{L^3} \prod_{j=1}^3 \left[\sum_{m_j=1}^{\infty} e^{-k\pi m_j^2/4\tau} \left\{ 1 - \cos \frac{\pi(2x_j + L)m_j}{L} \right\} \right] \quad (3.144)$$

lautet, wobei wir hier noch die reduzierte Temperatur τ aus (3.117) verwendeten (nicht zu verwechseln mit den Imaginärzeiten $\tau_{a,b}$). Die darin vorkommende Reihe konvergiert sehr schnell im Tieftemperaturbereich, ist aber völlig unbrauchbar für höhere Temperaturen. Das ist wiederum ein Umstand, der uns bereits im Abschnitt 2.4.2 begegnete und den wir mittels der Poissonschen Dualitätstransformation (A.7) umgehen können. Nach einigem Rechenaufwand ergibt sich damit der Ausdruck

$$(\mathbf{x}, k\hbar\beta; \mathbf{x}, 0) = \frac{1}{L^3} \left(\frac{\tau}{k} \right)^{3/2} \prod_{j=1}^3 \left[\sum_{q_j=-\infty}^{\infty} \left\{ e^{-\frac{4\pi\tau}{k} q_j^2} - e^{-\frac{4\pi\tau}{k} \left(q_j + \frac{2x_j + L}{2L} \right)^2} \right\} \right]. \quad (3.145)$$

Dieser konvergiert gerade im Hochtemperaturbereich (kleine β) schnell, d.h. nur wenige Summationen mit kleinen Werten von $|q_j|$ sind erforderlich.

Weiterhin verwenden wir nun die Imaginärzeit-Amplitude (3.144) bzw. (3.145), um die Dichte in einem N -Teilchen-Ensemble nach der Beziehung (3.111) auszurechnen. Die Ergebnisse auf der Hauptdiagonale des Kastens $\mathbf{x} = (x, x, x)$ sind für den Temperaturwert, der der kritischen Temperatur im thermodynamischen Limes $T = T_c^{(0)}$ gleicht, in Abb. 3.9 durch die durchgezogenen Kurven dargestellt. Die gestrichelten Linien repräsentieren die entsprechenden großkanonischen Resultate aus Abschnitt 2.5. Vergleicht man die Kurven miteinander, so stellt man für größere Ensembles ab $N = 1000$ Teilchen keine nennenswerten Unterschiede fest. Für kleinere Ensembles unterscheiden sich die Resultate am stärksten am Ursprung, wo die kanonischen Kurven etwas geringere Dichten aufweisen und dafür das Kastenvolumen geringfügig homogener ausfüllen.

Zusammenfassend stellten wir in diesem Abschnitt fest, dass die Dichteverteilung im Kastenpotential genauso wie die thermodynamischen Eigenschaften in den großkanonischen und kanonischen Ensembles identisch sind in dem Sinne, dass sie sich im Limes unendlich großer Teilchenzahlen und Volumina nicht unterscheiden.

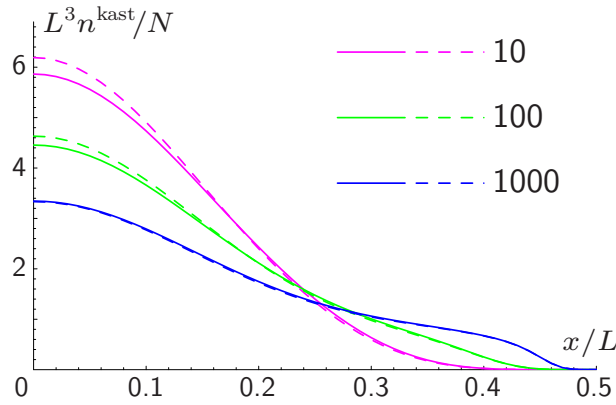


Abbildung 3.9: Dichteverteilung im Kastenpotential der Länge L in Abhängigkeit vom Ort auf der Hauptdiagonalen $\mathbf{x} = (x, x, x)$. Alle Kurven wurden bei einer Temperatur $T = T_c^{(0)}$ ausgewertet, wobei $T_c^{(0)}$ die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.104) darstellt. Die durchgezogenen Kurven gelten für kanonische Ensembles aus $N = 10, 100$ und 1000 Teilchen, die gestrichelten für die entsprechenden großkanonischen Gesamtheiten.

3.2.3 Bose-Gase in harmonischen Fallen

In diesem Abschnitt behandeln wir das zum Abschnitt 2.3.3 analoge Problem des idealen Bose-Gases innerhalb der harmonischen Falle (1.7). Diesmal geht es jedoch um seine Beschreibung innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie. Hierbei verzichten wir auf die Diskussion der semi-klassischen Näherungen, da die wichtigsten Aspekte der Rechnung völlig analog zum homogenen Bose-Gas-Modell im Abschnitt 3.2.1 sind. Stattdessen kommen wir direkt zur quantenmechanisch exakten Behandlung des harmonischen Problems und bestimmen die Wärmekapazität und die Grundzustand-Besetzung. Aus Darstellungsgründen beschränken wir uns hier weiterhin auf die Behandlung der isotropen Falle und weisen darauf hin, dass die verallgemeinerte Rechnung im anisotropen Fall in völliger Analogie dazu und ohne Probleme verlaufen würde.

Das Problem eines idealen Bose-Gases wird in der harmonischen Falle allgemein durch die Wellenfunktionen (2.117) mit den dazugehörigen Energieeigenwerten (2.120) gelöst. Mit Hilfe der Mehler-Formel [63] ergibt sich damit für die Ein-Teilchen-Imaginärzeit-Amplitude (3.34)

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a) &= \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \left[2 \sinh \omega(\tau_b - \tau_a) \right]^{-3/2} \\
 &\quad \times \exp \left\{ - \frac{M\omega}{2\hbar} \frac{(\mathbf{x}'^2 + \mathbf{x}^2) \cosh \omega(\tau_b - \tau_a) - 2 \mathbf{x}' \mathbf{x}}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} \right\}, \quad (3.146)
 \end{aligned}$$

die eine gewisse Ähnlichkeit zum großkanonischen Ausdruck (2.215) hat. Ferner lautet der Grundzustands-Anteil zur Imaginärzeit-Amplitude

$$(\mathbf{x}', \tau_b; \mathbf{x}, \tau_a)_G = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{-3\omega(\tau_b - \tau_a)/2} \exp \left\{ - \frac{M\omega}{2\hbar} (\mathbf{x}'^2 + \mathbf{x}^2) \right\}. \quad (3.147)$$

Der Beitrag eines geschlossenen n -Zyklus (3.44) zur kanonischen Zustandssumme ergibt sich damit aus (3.44) zu

$$Z_1(n\beta) = \frac{e^{-3n\beta\hbar\omega/2}}{(1 - e^{-n\beta\hbar\omega})^3} \quad (3.148)$$

und dessen Grundzustand-Anteil zu

$$\gamma_n(\beta) = \gamma_1^n(\beta) = e^{-3n\beta\hbar\omega/2} . \quad (3.149)$$

Die beiden letzten Ausdrücke können natürlich alternativ dazu aus den Spektral-Darstellungen (3.45) bzw. (3.64) gefunden werden. Weiterhin verwenden wir in unseren Rechnungen die dimensionslose Temperatureinheit

$$\tau \equiv \frac{1}{\beta\hbar\omega} = \left[\frac{N}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \frac{T}{T_c^{(0)}} , \quad (3.150)$$

wobei wir für die letzte Gleichung noch die kritische Temperatur im thermodynamischen Limes (2.134) verwendeten. Damit erhalten wir die Rekursionsgleichung für die N -Teilchen-Zustandssumme (3.62) zu

$$Z_N^B(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{e^{-3n/2\tau}}{(1 - e^{-3n/\tau})^3} Z_{N-n}^B(\tau) . \quad (3.151)$$

Die mittlere Zahl der Teilchen im Grundzustand, welche der Grundzustand-Besetzung entspricht, ergibt sich nach der Gleichung (3.81) zu

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N e^{-3n/2\tau} \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} . \quad (3.152)$$

Aus der N -Teilchen-Zustandssumme erhalten wir nach der allgemeingültigen Beziehung (3.120) die Wärmekapazität des idealen Bose-Gases in der harmonischen Falle. Einige dieser Resultate sind in Abb. 3.10 a) zusammen mit den entsprechenden großkanonischen Ergebnissen dargestellt. Daraus sehen wir, dass die jeweiligen Kurvenverläufe qualitativ ähnlich aussehen, aber quantitative Unterschiede aufweisen, die insbesondere für kleinere Ensembles deutlich sichtbar sind. So sind die kanonischen Resultate tendenziell eher zu niedrigeren Temperaturen hin verschoben, so dass auch das Maximum der Wärmekapazität in einem kanonischen N -Teilchen-Ensemble bei einer niedrigeren Temperatur vorliegt als im großkanonischen Ensemble mit der mittleren Teilchenzahl N . Ein analoger Sachverhalt lässt sich anhand der aus (3.152) gewonnenen Daten für die Grundzustand-Besetzung feststellen. Die entsprechenden Resultate sind in Abb. 3.10 b) zu sehen.

Aus den Verläufen der kanonischen Kurven für die Grundzustand-Besetzung lassen sich weiterhin die quasikritischen Punkte ablesen, an denen die größten Krümmungen vorliegen. Diese sind durch große Punkte in Abb. 3.11 a) dargestellt. Für die großkanonischen Resultate wurde diese Prozedur bereits im Abschnitt 2.3.3 angewandt und lieferte Werte, die in Abb. 2.5 durch die Dreiecke

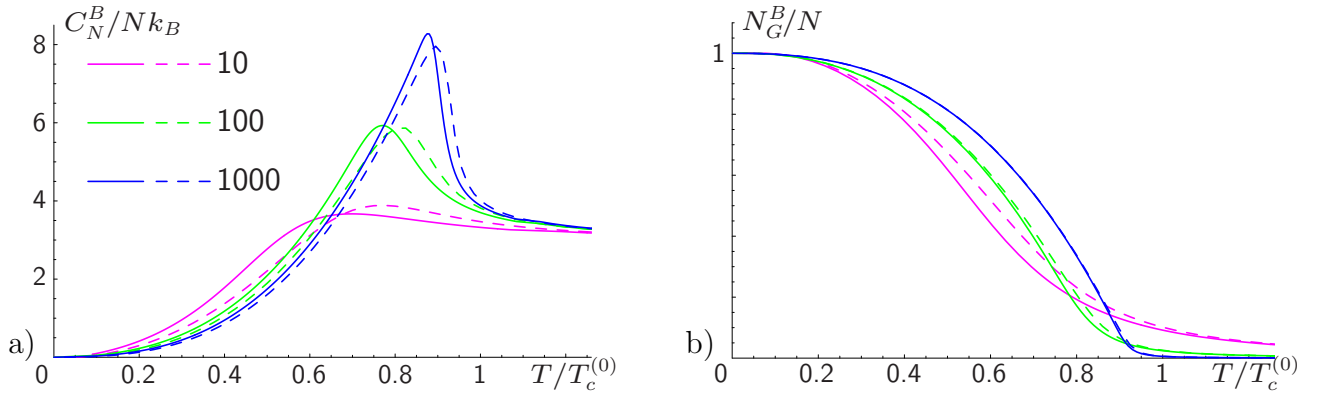


Abbildung 3.10: a) Wärmekapazität pro Teilchen im harmonischen isotropen Fallenpotential für kanonische Ensembles mit $N = 10, 100$ und 1000 Bosonen (durchgezogene Kurve) verglichen mit den großkanonischen Resultaten aus 2.6 (gestrichelte Kurven). b) Wie in a) für die Grundzustand-Besetzung mit den großkanonischen Resultaten aus Abb. 2.4.

dargestellt sind. In Abb. 3.11 a) werden sie nochmals gegenüber den kanonischen Werten gestellt, um den Unterschied im Finite-Size-Verhalten der beiden Ensemble-Theorien zu verdeutlichen. Die quasikritische Temperatur ist niedriger im kanonischen Ensemble, wie es übrigens auch schon im Fall des Kastenpotentials aus Abb. 3.8 war. Der Effekt in der harmonischen Falle ist aber weniger stark ausgeprägt als im Kastenpotential, so ist er für $N = 100$ Teilchen noch etwa Faktor 3 geringer und etwa Faktor 8 für $N = 10.000$ Teilchen.

Die gestrichelte Kurve Abb. 3.11 a) repräsentiert die analytische Näherung aus der großkanonischen Theorie (2.161). Eine analoge kanonische analytische Kurve lässt sich leider in unseren Untersuchungen nicht finden. Die Gründe dafür sind schon am Ende des letzten Abschnitts angeführt wurden. Eine rein kanonische Rechnung lässt sich nämlich prinzipiell nicht in analytischer Form schreiben und eine semi-kanonische Approximation ausgehend vom großkanonischen Resultat ist nicht möglich, wie es im Abschnitt 3.3 erörtert ist.

Nun diskutieren wir hier noch die Dichteverteilung eines idealen Bose-Gases in der harmonischen Falle. Ausgehend von der Imaginärzeit-Amplitude (3.146) erhalten wir mit dem reduzierten Temperaturparameter (3.150) den lokalen Spezialfall zu

$$(\mathbf{x}, k\hbar\beta; \mathbf{x}, 0) = \frac{1}{L_\omega^3 \pi^{3/2}} \left[2 \sinh \frac{k}{\tau} \right]^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{\mathbf{x}^2}{L_\omega^2} \tanh \frac{k}{2\tau} \right\}, \quad (3.153)$$

so dass sich die Dichte in einem N -Teilchen-Ensemble nach (3.109) und (3.111) aus der Gleichung

$$n_N(\mathbf{x}) = \frac{1}{L_\omega^3 \pi^{3/2}} \sum_{k=1}^N \left[2 \sinh \frac{k}{\tau} \right]^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{\mathbf{x}^2}{L_\omega^2} \tanh \frac{k}{2\tau} \right\} \frac{Z_{N-n}^B(\tau)}{Z_N^B(\tau)} \quad (3.154)$$

berechnen lässt. Unmittelbar daraus lassen sich Resultate für eine feste Temperatur und Teilchenzahl gewinnen, die in Abb. 3.11 b) dargestellt sind. Gegenüber diesen kanonischen Resultaten wurden dort noch die entsprechenden großkanonischen Ergebnisse abgebildet (gestrichelte Kurven), die wir aus der Diskussion im Abschnitt 2.5 entnehmen können. Wie man hieraus erkennen

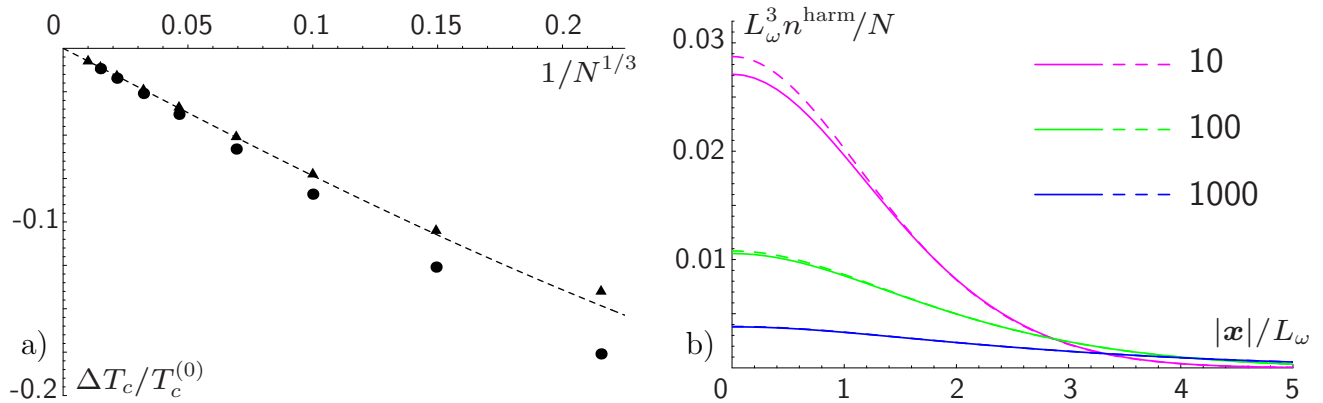


Abbildung 3.11: a) Verschiebung der quasikritischen Temperatur $\Delta T_c/T_c^{(0)} = t_c - 1$ in Abhängigkeit der Teilchenzahl N . Die gestrichelte Linie zeigt den Verlauf nach der großkanonischen semi-klassischen Näherung aus (2.161) und die Dreiecke nach der exakten Berechnung innerhalb der großkanonischen Ensemble-Theorie wie in Abb. 2.5 b). Demgegenüber stehen analoge Resultate der Rechnung im kanonischen Ensemble für $N = 10, 300, \dots, 100.000$ und 300.000 Bosonen (runde Punkte von rechts nach links). b) Dichteverteilung in harmonischen Fallen bei $T = T_c^{(0)}$ für Ensembles aus $N = 10, 100$ und 1000 Teilchen. Die durchgezogenen Kurven sind Resultate in kanonischen und die gestrichelten diejenigen in großkanonischen Ensembles.

kann, sind die Unterschiede nur für kleine Ensembles mit etwa $N = 10$ Teilchen deutlich sichtbar, und zwar in der Nähe des Ursprungs, wo die kanonische Dichte etwas geringer ausfällt als das großkanonische Gegenstück. Natürlich muss dafür die kanonische Dichte in den Randgebieten etwas größer sein, was aber aufgrund der Kleinheit der eigentlichen Werte nicht optisch aufgelöst werden kann.

In diesem Abschnitt haben wir gezeigt, dass auch in einer harmonischen Falle sowohl die thermodynamischen Eigenschaften als auch die Dichteverteilung eines idealen Bose-Gases äquivalent zueinander im kanonischen und großkanonischen Ensemble sind. Im anschließenden Unterabschnitt werden wir versuchen, den Unterschied zwischen den beiden Ensemble-Theorien zu quantifizieren.

3.3 Sattelpunkts-Näherung kanonischer Zustandssummen

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, die kanonische N -Teilchen-Zustandssumme näherungsweise aus der großkanonischen Zustandssumme zu bestimmen. Bei dem Näherungsverfahren handelt es sich um die so genannte Approximation der stationären Phase von Darwin und Fowler [84], die auch einfach als Sattelpunkt-Approximation bezeichnet wird. Diese ist z.B. aus den Textbüchern [85, Kapitel 10] bzw. [86, Kapitel 11] wohl bekannt, wo es für Untersuchungen der statistischen Eigenschaften des großkanonischen Ensembles verwendet wurde. Auch für Berechnungen der thermodynamischen Eigenschaften im mikrokanonischen Ensemble aus den kanonischen Resultaten leistet diese Methode gute Dienste, wie z.B. in [87] gezeigt wurde. Dennoch ist aus [86, Kapitel 11] bekannt, dass sich die kanonische Zustandssumme nur in der führenden Ordnung mit dem großkanonischen Resultat nähern lässt. Unterhalb und nahe der kritischen Temperatur lassen sich

nicht einmal die ersten Korrekturen zu diesem Resultat der niedrigsten Ordnung finden. Genau diesen Umstand werden wir im Folgenden erörtern.

Als Ausgangspunkt der Diskussion dient uns die Integral-Darstellung der kanonischen Zustandssumme Z_N^B mit Hilfe des großkanonischen Resultats Z_{GK}^B :

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{z^{N+1}} Z_{GK}^B(\beta, z) . \quad (3.155)$$

Die Integrationskontur \mathcal{C} hierin soll die $(N+1)$ -fache Polstelle $z = 0$ einschließen. Diese Darstellung ist nach der Beziehung (3.50) unmittelbar mit dem Residuumsatz verifizierbar und stellt eine Alternative zur Projektions-Vorschrift (3.56) dar. Nach der Umformung $z = e^{\beta\mu}$ können wir noch eine weitere Darstellungsform

$$Z_N^B(\beta) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\mu e^{-\beta\mu N} Z_{GK}^B(\beta, \mu) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\mu \exp \left\{ -\beta N [\mu + f_{GK}^B(\beta, \mu)] \right\} \quad (3.156)$$

erhalten, wobei $f_{GK}^B \equiv -\ln Z_{GK}^B/(\beta N) = \mathcal{F}_{GK}^B/N$ das auf ein einzelnes Teilchen bezogene großkanonische Potential ist. Der Realteil von dem in (3.156) verwendeten Parameter μ stellt das übliche chemische Potential dar, und die Integration über dessen Imaginärteil repräsentiert die Diracsche Delta-Funktion, die für die Einschränkung der Teilchenzahl auf den Wert N sorgt. Die beiden Darstellungen (3.155) und (3.156) sind noch exakt, lassen sich aber auch in der Stationärphasen-Näherung behandeln.

Der Grundgedanke der besagten Näherung basiert auf der Tatsache, dass für große N -Werte der Ausdruck in der eckigen Klammer in (3.156) nicht sehr weit von seinem Minimum abweichen darf, denn sonst wäre der Integrand stark unterdrückt. Die Minimalstelle für den Integralparameter μ (Sattelpunkt) wird weiterhin mit $\bar{\mu}$ bezeichnet und ergibt sich aus der Bedingung

$$0 = 1 + \left. \frac{\partial f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=\bar{\mu}} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} . \quad (3.157)$$

Die letzte Gleichung lesen wir unmittelbar aus der Spektral-Darstellung für das großkanonische Potential (2.82) ab. Daraus erkennen wir die Gleichung (2.84) für die mittlere Teilchenzahl im großkanonischen Ensemble wieder, womit $\bar{\mu}$ eindeutig als das reelwertige chemische Potential identifiziert ist. Die Gleichung (3.156) lässt sich dann nach der Sattelpunkt-Approximation als

$$Z_N^B(\beta) = \frac{\beta}{2\pi i} \exp \left\{ -\beta N [\bar{\mu} + f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu})] \right\} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\mu \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \left. \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu^2} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu - \bar{\mu})^2 \right\} \\ \times \exp \left\{ -\frac{\beta N}{6} \left. \frac{\partial^3 f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu^3} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu - \bar{\mu})^3 - \frac{\beta N}{24} \left. \frac{\partial^4 f_{GK}^B(\beta, \mu)}{\partial \mu^4} \right|_{\mu=\bar{\mu}} (\mu - \bar{\mu})^4 + \dots \right\} \quad (3.158)$$

schreiben. Der erste Exponentialterm entspricht gerade der großkanonischen Zustandssumme dividiert durch die N -te Potenz der Fugazität $e^{\beta\bar{\mu}}$. Die restlichen Integralterme sorgen für die gesuchte Abweichung der kanonischen Zustandssumme von diesem Resultat. Des Weiteren behandeln wir

das Integral in der Gausschen Näherung, wonach alle Terme ab der dritten Ordnung in den Fluktuationen $\mu - \bar{\mu}$ störungstheoretisch zu behandeln sind. Mit der Parametrisierung $\mu = c + i\lambda$, wobei nun $c = \bar{\mu}$ ist, erhalten wir ferner

$$Z_N^B(\beta) = e^{-\beta\bar{\mu}N} Z_{GK}^B(\beta, \bar{\mu}) \frac{\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \lambda^2 \right\} \\ \times \left\{ 1 - \frac{\beta N}{24} \frac{\partial^4 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^4} \Big|_{\lambda=0} \lambda^4 + \mathcal{O}(\lambda^6) \right\}, \quad (3.159)$$

wobei hier noch der Term der Ordnung λ^3 aus Symmetriegründen weggelassen wurde. Nun berechnen wir die ersten zwei darin vorkommenden λ -Integrale explizit. Für den ersten ergibt sich unter Berücksichtigung des großkanonischen Potentials (2.82)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \lambda^2 \right\} = \frac{\sqrt{2\pi}}{\beta} \left\{ \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{\mu}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \right\}^{-1/2}. \quad (3.160)$$

Analog dazu erhalten wir für den zweiten Term

$$\frac{\beta N}{24} \frac{\partial^4 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^4} \Big|_{\lambda=0} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \lambda^4 \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 f_{GK}^B(\beta, \bar{\mu} + i\lambda)}{\partial \lambda^2} \Big|_{\lambda=0} \lambda^2 \right\} \\ = \frac{\sqrt{2\pi}}{8\beta} \left\{ \frac{1}{\beta^3} \frac{\partial^3}{\partial \bar{\mu}^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \right\} \left\{ \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{\mu}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \right\}^{-5/2}. \quad (3.161)$$

Nun wollen wir die Größen-Verhältnisse in den beiden Entwicklungstermen für genügend große Teilchenzahlen N angeben. Dabei wollen wir nicht auf die Details der Rechnung eingehen und bemerken nur, dass sie in Analogie zu den semiklassischen Untersuchungen in den Abschnitten 2.3.2 für die harmonische Falle und 2.4.1 für den Kastenpotential durchgeführt werden kann. Die daraus resultierenden Größen-Verhältnisse in verschiedenen Temperaturbereichen lauten

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \bar{\mu}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N^{4/3} & , T \approx T_c \\ N^2 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{im Kasten und} \quad \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N & , T \approx T_c \\ N^2 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{für Falle,} \quad (3.162)$$

$$\frac{1}{\beta^3} \frac{\partial^3}{\partial \bar{\mu}^3} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \bar{\mu})} - 1} \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N^{8/3} & , T \approx T_c \\ N^4 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{im Kasten und} \quad \sim \begin{cases} N & , T > T_c \\ N^2 & , T \approx T_c \\ N^4 & , T < T_c \end{cases} \quad \text{für Falle.}$$

Aus diesen Abschätzungen erkennen wir, dass die störungstheoretische Reihenentwicklung in (3.159) nur dann sinnvoll ist, wenn die Temperatur T höher als der kritische Wert T_c ist. Denn nur dann dominiert der λ^0 -Term (3.160) gegenüber dem λ^4 -Term (3.161) und allen weiteren Summanden. Bei Temperaturen um den kritischen Punkt ist dagegen der λ^0 -Term von derselben Größenordnung $\mathcal{O}(N^{-2/3})$ für den Kastenpotential und $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ für die harmonische Falle wie der nachfolgende λ^4 -Term. Weiterhin kann man noch zeigen, dass auch der λ^6 -Term von derselben

Größenordnung ist. Analog ist die Situation unterhalb der kritischen Temperatur, wo alle Terme zu der Ordnung $\mathcal{O}(N^{-1})$ beitragen, unabhängig davon, ob es sich um Falle oder Kastenpotential handelt. Daher ist die Sattelpunkt-Approximation im Temperaturbereich um den kritischen Punkt und unterhalb in ihrer störungstheoretischen Form (3.159) nicht gerechtfertigt. Wie wir bereits oben erwähnten, ist dieser Umstand in der Literatur wohl bekannt und wurde z.B. in dem Textbuch [86, Kapitel 11] diskutiert (siehe auch [64,88]). Die Ursache für diesen Sachverhalt bei der Entwicklung der großkanonischen Zustandssumme ist mit dem Problem der anomalen makroskopischen Teilchenzahl-Fluktuationen innerhalb der großkanonischen Ensemble-Theorie verwandt, welches wir schon im Abschnitt 2.6 diskutierten.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die in (3.159) auftretende Reihe bereits in der führenden nichttrivialen Ordnung der Sattelpunktsentwicklung resummiert werden muss. Dieses Problem ist allerdings ungleich viel schwieriger als z.B. die Resummation im Abschnitt 2.4.1, die wir zur Berechnung der Verschiebung der kritischen Temperatur im Kastenpotential angewandt haben. Diese letzte Resummation betraf nämlich nur die führende Ordnung in der Sattelpunkt-Approximation. Nun müssten wir auch die Korrekturen dazu in allen Ordnungen durch eine ähnliche Resummation bestimmen. Dieses Vorhaben ist somit schon aus prinzipiellen Gründen nicht zu bewältigen. Eine wichtige Lehre können wir dennoch aus den Überlegungen dieses Abschnitts ziehen. Diese lautet nämlich, dass die kanonische Zustandssumme insbesondere im Bose-Einstein-kondensierten Bereich nicht als eine triviale Abwandlung des großkanonischen Resultats angesehen werden kann. Weitere Indizien, die ebenfalls dafür sprechen, werden im anschließenden Abschnitt angeführt.

3.4 Fluktuationen und Teilchenzahl-Statistik

Zum Abschluss des letzten Kapitels haben wir im Abschnitt 2.6 auf die Probleme der großkanonischen Ensemble-Theorie mit den mittleren quadratischen Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand hingewiesen. Untersuchungen der Größe dieser Fluktuation haben zum unsinnigen Resultat geführt, dass sie proportional mit der Teilchenzahl anwachsen und somit makroskopisch groß sind, sobald man sich unterhalb der kritischen Temperatur befindet. Dieser Umstand ist insbesondere bei verschwindenden Temperaturen unhaltbar, da doch gerade dort keine thermischen Fluktuationen zu erwarten sind. Ebenfalls im Abschnitt 2.6 haben wir auf die Arbeiten [64,69] verwiesen, in denen ein Weg vorgezeichnet war, das Problem der unphysikalischen Fluktuationen zu umgehen. In diesen Vorschlag musste die Gesamtteilchenzahl festgehalten werden, so dass kein freier Austausch mit dem Teilchenreservoir stattfinden konnte. Die einzige Quelle für die Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand wäre demnach der Austausch der Grundzustand-Teilchen mit denjenigen in angeregten Zuständen. Solche Fluktuationen stellten sich aber als normal (mikroskopisch) heraus und waren für tiefere Temperaturen unterdrückt. Die Forderung nach einem System mit fixierter Teilchenzahl ist in einem kanonischen Ensemble per Konstruktion erfüllt, so dass wir hier keine anomal großen Fluktuationen erwarten. Das Ziel dieses Abschnitts ist es nun, diese Erwartungen zu bestätigen. Damit soll die Diskrepanz zwischen den kanonischen und großkanonischen Ensemble-Theorien anhand der Fluktuationsstärke explizit

aufgezeigt werden. Bei Untersuchungen der vollen Teilchenzahl-Statistik im Grundzustand stellen wir ebenfalls einen grundsätzlichen Unterschied zwischen den beiden Ensemble-Theorien fest.

Zur Berechnung quadratischer Teilchenzahl-Fluktuationen im Grundzustand benötigen wir zunächst die Mittelwerte für die Teilchenzahl und deren Quadrat in der kanonischen Ensemble-Theorie. Den Mittelwert der ersten Größe kennen wir bereits aus der Gleichung (3.81), die wir im Abschnitt 3.1.4 hergeleitet haben. Eine analoge Rechnung lässt sich auch für den Quadrat-Mittelwert durchführen, den wir nach

$$\langle N_G^2 \rangle_N^B \equiv \frac{F_N^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} \quad (3.163)$$

definieren. Die Größe F_N^B steht dabei für das statistische Gewicht des Teilchenzahl-Quadrats im Grundzustand, der in der Zyklus-Darstellung in Analogie zu (3.70) als

$$F_N^B = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} \left(\sum_{n=1}^N n m_n \right)^2 \gamma_1^{\sum_{n=1}^N n m_n} \prod_{n=1}^N \frac{\xi_n^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} \quad (3.164)$$

geschrieben werden kann. Für die weiteren Berechnungen dieser Größe erweist sich die folgende direkt verifizierbare Umformungsregel

$$\left(\sum_{n=1}^N n m_n \right)^2 \gamma_1^{\sum_{n=1}^N n m_n} = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \left[\gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \gamma_1^{\sum_{n=1}^N n m_n} \right] \quad (3.165)$$

als hilfreich. Damit ergibt sich für die Gewichtungsfunktion (3.164) die zu (3.73) ähnliche Beziehung

$$F_N^B = \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \left[\gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} Z_N^B \right]. \quad (3.166)$$

Alle weiteren Berechnungen können in Analogie zur Vorgehensweise im Abschnitt 3.1.4 gestaltet werden und führen zum Endergebnis für das Gewicht der quadratischen Teilchenzahl im Grundzustand

$$F_N^B(\beta) = \sum_{n=1}^N (2n-1) \gamma_1^n(\beta) Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.167)$$

Damit lässt sich nach (3.163) der Quadrat-Mittelwert der Grundzustand-Teilchenzahl bestimmen. Zusammen mit dem Mittelwert aus (3.81) ergibt sich daraus die mittlere quadratische Fluktuation im Grundzustand $\langle (\Delta N_G)^2 \rangle_N^B \equiv \langle N_G^2 \rangle_N^B - [\langle N_G \rangle_N^B]^2$ zu

$$\langle (\Delta N_G)^2 \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N (2n-1) \gamma_1^n(\beta) \frac{Z_{N-n}^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} - \left[\sum_{n=1}^N \gamma_1^n(\beta) \frac{Z_{N-n}^B(\beta)}{Z_N^B(\beta)} \right]^2. \quad (3.168)$$

Dieser Ausdruck wird nun für den Spezialfall des harmonischen Potentials ausgewertet und ergibt die in Abb. 3.12 dargestellten durchgezogenen Kurven. In Abb. 3.12 a) werden sie zusammen mit den entsprechenden großkanonischen Resultaten verglichen (gestrichelte Kurven), die wir

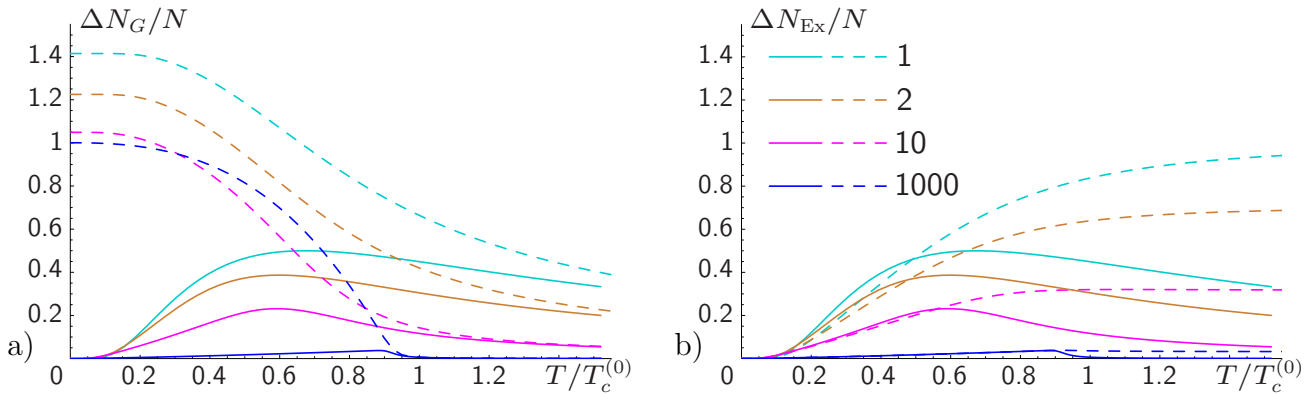


Abbildung 3.12: a) Mittlere Fluktuation der Teilchenzahl im Grundzustand bezogen auf ein einziges Teilchen im harmonischen Fallenpotential. Durchgezogene Kurven sind Resultate in kanonischen Ensembles aus $N = 1, 2, 10$ und 1000 Teilchen nach (3.168). Ergebnisse der entsprechenden großkanonischen Ensembles aus Abb. 2.13 a) sind durch gestrichelte Kurven dargestellt. b) Wie in a), jedoch für Fluktuationen aller angeregten Teilchen.

aus Abb. 2.13 a) entnehmen können. Der Unterschied ist insbesondere im Tieftemperaturbereich auffällig. Die Resultate im kanonischen Ensemble konvergieren auch mit steigenden Teilchenzahlen nicht gegen diejenige der großkanonischen Ensemble-Theorie. Während die großkanonischen Teilchenzahl-Fluktuationen, bezogen auf ein einzelnes Teilchen, unterhalb der kritischen Temperatur immer einen endlichen Wert aufweisen, werden sie im kanonischen Ensemble mit wachsender Teilchenzahl immer stärker unterdrückt. Aber genau dieser Sachverhalt wurde von uns erwartet oder sogar geradezu erwünscht, wie am Ende des Abschnitts 2.6 und am Anfang dieses Abschnitts erörtert wurde. Während das Verhalten im großkanonischen Ensemble derart anomal ausgefallen ist, schien die kanonische Ensemble-Theorie schon im Vorfeld dazu berufen zu sein, das geeignetere Bild zu liefern. Durch Abb. 3.12 a) werden diese Erwartungen lediglich bestätigt.

Und wie sieht die Situation mit den Fluktuationen ΔN_{Ex} der Teilchenzahl in angeregten Zuständen N_{Ex} aus? In der großkanonischen Ensemble-Theorie hatte sich bereits herausgestellt, dass solche Fluktuationen am Temperaturnullpunkt verschwinden und für alle anderen Temperaturen mit ansteigenden Teilchenzahlen N unterdrückt sind. So ergaben sich aus der Bose-Einstein-Verteilung z.B. im Hochtemperaturbereich konstante Werte, die mit der Teilchenzahl wie $\Delta N_{Ex} \approx N^{-1/2}$ skalierten. Um Verhältnisse im gesamten Temperaturbereich zu verdeutlichen, sind einige der großkanonischen Resultate in Abb. 3.12 b) durch die gestrichelten Kurven dargestellt. Für kanonische Ensembles ergeben sich die Fluktuationen der angeregten Teilchen hingegen aufgrund der Beziehung $N = N_G + N_{Ex}$ unmittelbar nach der exakten Gleichung $\langle \Delta N_{Ex} \rangle_N^B = \langle \Delta N_G \rangle_N^B$. Demnach kennen wir die Beiträge solcher Fluktuationen bereits aus (3.168) und können somit die Kurvenverläufe aus Abb. 3.12 a) direkt übernehmen. Ein Vergleich zwischen den beiden Ensemble-Theorien in Abb. 3.12 b) zeigt nun folgendes. Die Resultate in beiden Ensembles verschwinden im thermodynamischen Limes gleichermaßen, wodurch man nicht von einer gravierenden Diskrepanz sprechen kann. Dennoch fallen die Unterschiede überraschend deutlich aus. Während die Ergebnisse nach der großkanonischen Bose-Einstein-Verteilung für hohe Temperaturen wie bereits erwähnt gegen die konstanten Werte tendieren, verschwinden sie nach exakten kanonischen Rechnungen in

diesem Temperaturbereich schon für feste Teilchenzahlen. Weiterhin gibt es für kanonische Resultate einen Temperaturbereich, in dem solche Fluktuationen maximal werden. In entsprechenden großkanonischen Bildern sind derartige Strukturen hingegen nicht auszumachen.

An dieser Stelle fassen wir nochmals die bereits gefundenen statistischen Eigenschaften des Grundzustandes zusammen und beschränken uns dabei auf den Spezialfall des harmonischen Potentials. Im Abschnitt 3.2.3 haben wir festgestellt, dass die mittlere Teilchenzahl im Grundzustand in den beiden Ensembles, dem kanonischen und dem großkanonischen, identisch sind. Das heißt im thermodynamischen Limes ergaben beide Ensemble-Theorien dasselbe Bild für den besagten Mittelwert. Die zweite Kummulante der Teilchenzahl-Verteilung im Grundzustand wird durch die mittlere Fluktuation repräsentiert, welche den Gegenstand der obigen Diskussion in diesem Abschnitt war. Wie wir deutlich sehen konnten, ergaben sich diese Fluktuationen in den beiden Ensembles als völlig verschieden. Selbst im thermodynamischen Limes bleibt die Diskrepanz bestehen, sobald die Temperatur ihren kritischen Wert unterschreitet und die Kondensat-Fraktion makroskopisch wird. Und wie sieht es mit höheren Kummulanten der Teilchenzahl-Verteilung aus, bleibt die zweite Kummulante eine Ausnahme oder zeigen alle höheren Kummulanten eine ähnliche Diskrepanz? Die Untersuchungen von Ziff et al. ergeben weitere Diskrepanzen im Bose-Einstein-kondensierten Bereich [64]. An dieser Stelle wollen wir diese Überlegungen nicht weiter ausführen und widmen uns stattdessen noch kurz dem Problem der vollen Teilchenzahl-Statistik im Grundzustand, um zu sehen, worin sich die Unterschiede zwischen den kanonischen und großkanonischen Ensembles äußern.

Für dieses Vorhaben berechnet man die Wahrscheinlichkeiten $p(K|N; \beta)$, bei einer festen Temperatur (festes β) K von insgesamt N Teilchen im Grundzustand zu finden. Diese Größe wurde in den Arbeiten von Weiss und Wilkens [89–91] im großkanonischen, kanonischen und mikrokanonischen Ensembles berechnet. Wir konzentrieren uns hier auf die kanonischen und großkanonischen Berechnungen und skizzieren kurz die wichtigsten Ideen. Als Ausgangspunkt dient uns die N -Teilchen-Zustandssumme nach der Zyklus-Darstellung in (3.67). Unsere Aufgabe besteht nun darin, diejenigen Zyklus-Kombinationen herauszuprojezieren, in denen sich genau K Teilchen im Grundzustand befinden. Da diese Zahl gerade der Potenz des Grundzustands-Beitrags γ_1 entspricht, nämlich $\sum_{n=1}^N nm_n$, ergibt sich für den Anteil der Zustandssumme, bei dem K Teilchen im Grundzustand zu finden sind, oder kurz das K -Teilchen-Gewicht, der Ausdruck

$$P(K|N; \beta) = \sum_{C_1, \dots, C_N}^{(\sum n C_n = N)} \sum_{m_1=0}^{C_1} \dots \sum_{m_N=0}^{C_N} \delta_{K, \sum nm_n} [\gamma_1(\beta)]^{\sum nm_n} \prod_{n=1}^N \frac{\xi_n^{C_n - m_n}}{n^{C_n} m_n! (C_n - m_n)!} . \quad (3.169)$$

Das entsprechende großkanonische Gewicht der Konfigurationen mit K Teilchen im Grundzustand ergibt sich mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ nach

$$P_{GK}(K; \beta, z) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} P(K|N; \beta) z^N \quad (3.170)$$

und ist gleichzeitig die Erzeugende für die kanonischen Gewichte (3.169). Für die weiteren Berech-

nungen verwenden wir noch die zu (3.60) analoge Umformungsregel

$$\delta_{K, \sum nm_n} \gamma_1^{\sum nm_n} = \gamma_1^K \left[\frac{1}{K!} \frac{\partial^K}{\partial \gamma_1^K} \gamma_1^{\sum nm_n} \right]_{\gamma_1=0} \quad (3.171)$$

und erhalten für das Gewicht (3.170) mit Hilfe der Erzeugenden $Z_{GK}(\beta, z)$ aus (3.50)

$$P_{GK}(K; \beta, z) = \gamma_1^K(\beta) \left[\frac{1}{K!} \frac{\partial^K}{\partial \gamma_1^K} Z_{GK}^B(\beta, z) \right]_{\gamma_1=0} . \quad (3.172)$$

Für die großkanonische Zustandssumme verwenden wir weiterhin die Form (3.76) für den bosonischen Fall und führen die Summation über den Grundzustand-Anteil explizit aus, so dass

$$Z_{GK}^B(\beta, z) = \frac{1}{1 - \gamma_1(\beta) z} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n(\beta) \frac{z^n}{n} \right\} \quad (3.173)$$

gilt. Mit dieser Form ergibt sich nach (3.172)

$$P_{GK}(K; \beta, z) = \gamma_1^K(\beta) z^K \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n(\beta) \frac{z^n}{n} \right\} = \gamma_1^K(\beta) z^K [1 - \gamma_1(\beta) z] Z_{GK}^B(\beta, z) . \quad (3.174)$$

Für die großkanonische Wahrscheinlichkeit $p_{GK}(K; \beta, z) = P_{GK}(K; \beta, z) / Z_{GK}^B(\beta, z)$, K Teilchen im Grundzustand zu finden, verwenden wir nun die Beziehung $\gamma_1(\beta) z = e^{\beta \hat{\mu}}$, wobei $\hat{\mu} = \mu - E_G$ das um die Grundzustands-Energie reduzierte chemische Potential darstellt. Damit erhalten wir weiterhin

$$p_{GK}(K; \beta, z) = e^{K\beta \hat{\mu}} [1 - e^{\beta \hat{\mu}}] . \quad (3.175)$$

Diese Wahrscheinlichkeit lässt sich nun z.B. für das harmonische Potential innerhalb eines großkanonischen Ensembles mit der mittleren Teilchenzahl N auswerten, wobei für diesen Fall das chemische Potential $\hat{\mu}$ aus der Teilchenzahlgleichung (2.168) zu bestimmen ist. Einige Resultate dieser Rechnung sind in Abb. 3.13 durch gestrichelte Kurven dargestellt.

Nun benutzen wir noch die Gleichung (3.174), um damit aus (3.170) die N -Teilchen-Komponenten herauszuprojezieren. Die Berechnungen dazu gehen in völliger Analogie zu denjenigen im Abschnitt 3.1.3 und werden daher weggelassen. Zu bemerken ist hierfür nur, dass sich die Gewichte nach einer weiteren Rekursionsbeziehung ergeben, welche lautet [90]

$$P(K|N; \beta) = \begin{cases} 0 & , K > N \\ \gamma_1^N(\beta) & , K = N \\ \gamma_1^K(\beta) Z_{N-K}^B(\beta) - \gamma_1^{K+1}(\beta) Z_{N-K-1}^B(\beta) & , K < N . \end{cases} \quad (3.176)$$

Die gesuchte Wahrscheinlichkeit, K von insgesamt N Teilchen im Grundzustand zu finden, ergibt sich nun daraus nach der Gleichung

$$p(K|N; \beta) = \frac{P(K|N; \beta)}{Z_N^B(\beta)} . \quad (3.177)$$

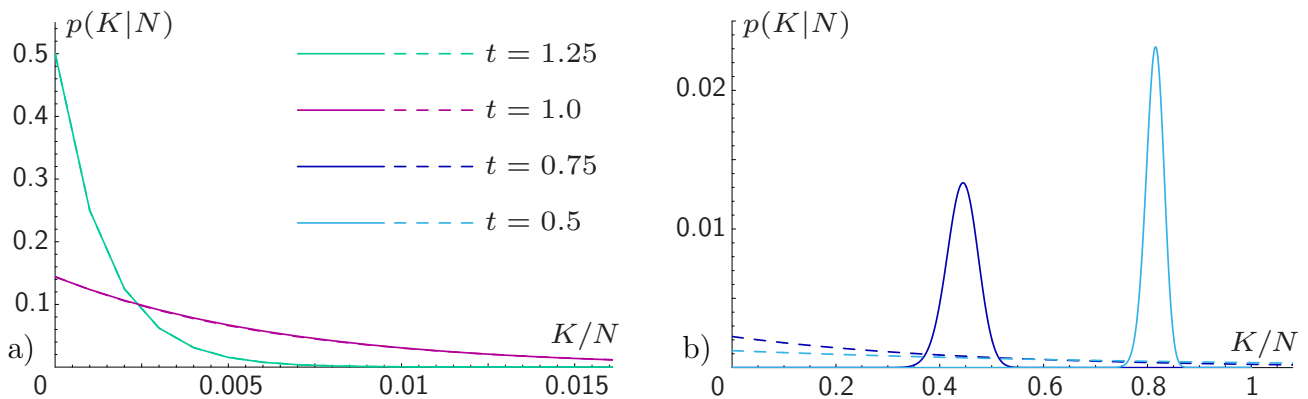


Abbildung 3.13: Wahrscheinlichkeiten, K von N Teilchen im Grundzustand der harmonischen Falle zu finden für kanonischen (durchgezogene Kurven) sowie großkanonischen (gestrichelte Kurven) Ensembles aus $N = 1000$ Teilchen. a) Für Temperaturen $t = T/T_C^{(0)} = 1.25$ und $t = 1.0$ oberhalb der kritischen Temperatur. b) Für Temperaturen $t = 0.75$ und $t = 0.5$ unterhalb der kritischen Temperatur.

Diese Größe lässt sich z.B. für das harmonische Potential mit dem Beitrag des Grundzustandes $\gamma_1(\beta)$ aus (3.149) und den kanonischen Zustandssummen aus der Rekursion (3.151) auswerten. Einige Resultate sind in Abb. 3.13) graphisch mit Hilfe der durchgezogener Kurven dargestellt.

Aus Abb. 3.13 a) sieht man schon für $N = 1000$ Teilchen eine komplette Übereinstimmung der kanonischen und großkanonischen Teilchenzahl-Statistiken im Grundzustand oberhalb der kritischen Temperatur. Dabei erinnern wir uns daran, dass sowohl $t = T/T_C^{(0)} = 1.25$ als auch $t = 1.0$ für $N = 1000$ Teilchen noch über dem quasikritischen Temperaturwert von etwa $t_c \approx 0.92$ liegen. Hier sehen wir noch, dass in diesem Bereich die Kurvenverläufe bei tieferen Temperaturen immer flacher werden, d.h. immer mehr Teilchen wird es möglich, den Grundzustand zu besetzen. Daraus resultiert aber auch, dass die Fluktuationen um die mittlere Grundzustand-Besetzung immer stärker werden. Der wohl wichtigste Unterschied der beiden Statistiken besteht in diesem Temperaturbereich darin, dass in großkanonischen Ensembles im Gegensatz zu kanonischen Gesamtheiten auch Grundzustand-Besetzungen mit Teilchenzahlen K größer als die mittlere Gesamtteilchenzahl N möglich sind. Das sieht man schon aus dem Vergleich der Wahrscheinlichkeit (3.175) ohne explizite Einschränkung der Zahl K und dem kanonischen Resultat (3.176), wonach die Wahrscheinlichkeiten für $K > N$ explizit verschwinden. Das ist noch kein Problem des großkanonischen Ensembles an sich, sondern hat lediglich zur Folge, dass die Fluktuationen in diesem Ensemble etwas größer ausfallen als im kanonischen. Doch diese Unterschiede schlagen selbst bei einer so kleinen Teilchenzahl wie $N = 1000$ noch kaum zu Buche und tun das bei größeren Teilchenzahlen umso weniger.

Unterhalb der kritischen Temperatur ändert sich die Situation jedoch dramatisch, wie aus Abb. 3.13 b) ersichtlich. Hier setzt sich in der großkanonischen Ensemble-Theorie der Trend fort, dass mit sinkenden Temperaturen die Kurvenverläufe für Besetzungszahl-Statistiken immer flacher und konstanter werden. Doch im kanonischen Ensemble sieht man etwas anderes. Hier bilden sich scharf abgegrenzte Strukturen ähnlich den Gauss-Verteilungen. Diese verschieben sich mit

fallenden Temperaturen in Richtung größerer Besetzungszahlen K und werden immer enger und höher. Die Verschiebung zu größeren K -Werten ist der Ausdruck höherer mittleren Grundzustand-Besetzung, die schärfer abgegrenzten Strukturen bedeuten gleichzeitig geringere Fluktuationen (siehe dazu Abb. 3.12). Am absoluten Temperaturnullpunkt ist dann weiterhin zu erwarten, dass die Besetzungszahl-Statistik einen einzigen Peak bei $K = N$ aufweist. Eine solche Vorstellung ist mit der großkanonischen Ensemble-Theorie und der Verteilung (3.175) darin offensichtlich nicht vereinbar. Dieser Umstand stellt eine Verallgemeinerung der Beobachtung dar, dass die Fluktuationen im großkanonischen Ensemble unterhalb einer bestimmten Temperatur ebenfalls stark von den kanonischen Werten abweichen, wie in Abb. 3.12 a) auch deutlich zu sehen ist.

Mit dieser Feststellung wollen wir noch den Anwendungsbereich der kanonischen und großkanonischen Ensemble-Theorie diskutieren. Die letztere der beiden zeigt Fluktuationen der Teilchenzahl im Grundzustand, die gerade im interessanten Bose-Einstein-kondensierten Bereich unphysikalisch anomal sind. Das hat zwar keinen Einfluss auf die mittleren Besetzungszahlen, womit die großkanonische Bose-Einstein-Verteilung unter Umständen auch ihre Berechtigung hat, zumal sich die Rechnungen damit recht einfach gestalten lassen. Aber die volle Besetzungszahl-Statistik wird in der großkanonischen Ensemble-Theorie komplett falsch wiedergegeben. Das sieht in der kanonischen Ensemble-Theorie schon ganz anders aus. Hier stimmen die Mittelwerte der Grundzustand-Besetzung mit den großkanonischen gut überein, aber auch die Fluktuationen sind darin auf das physikalisch sinnvolle Maß beschränkt. Dadurch scheint auch die scharf strukturierte Besetzungszahl-Statistik im kondensierten Bereich glaubwürdig zu sein. Doch wie weit gilt diese Feststellung für ein komplett abgeschlossenes System, welches in Experimenten mit in Fallen eingeschlossenen Bose-Gasen weitestgehend vorliegt?

Ein ideal gegenüber dem Energie- und Teilchen-Austausch abgeschlossenes System wird unmittelbar in der mikrokanonischen Ensemble-Theorie behandelt. In der Arbeit [90] wurde die Besetzungszahl-Statistik in einem mikrokanonischen Ensemble aus $N = 200$ Teilchen studiert und mit dem entsprechenden Ergebnis der kanonischen Ensemble-Theorie verglichen. Dabei hatte sich gezeigt, dass die mikrokanonischen Ergebnisse noch etwas schärfere Strukturen aufweisen als die kanonischen, jedoch ohne sich qualitativ stark zu unterscheiden. Der Vergleich der Teilchenzahl-Fluktuationen im Grundzustand zeigt ebenfalls ein analoges Verhalten in beiden Ensembles, wie in den Arbeiten [87,89,92] auch bestätigt wurde. Die quantitativen Unterschiede werden mit steigender Teilchenzahl unterdrückt und verschwinden im thermodynamischen Limes, so wie die Fluktuationen auch schon an sich verschwinden. Allerdings wurde in den Arbeiten [93,94] im dreidimensionalen harmonischen Oszillator festgestellt, dass das Verschwinden des Unterschieds zwischen den beiden Ensemble-Theorien und das Verschwinden der Teilchenzahl-Fluktuation gleich schnell sind. Das bedeutet, dass letztere sich um einen nahezu konstanten Faktor unterscheiden, wie groß die Teilchenzahl auch immer ist. An dieser Stelle sei dennoch angemerkt, dass dieser Umstand noch keinen Grund darstellt, von einer Nichtäquivalenz der kanonischen und mikrokanonischen Ensembles zu sprechen. Lediglich das Erreichen des thermodynamischen Limes geschieht unterschiedlich schnell.

Erinnern wir uns an dieser Stelle noch an das grundsätzliche Problem in der großkanonischen Ensemble-Theorie bezüglich der Fluktuationen der Gesamtteilchenzahl. Der Grund dafür war ein

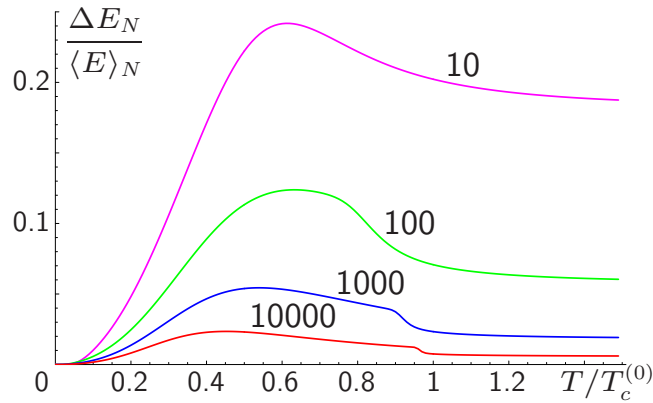


Abbildung 3.14: Mittlere Energiefluktuationen bezogen auf den Energiemittelwert in einer harmonischen isotropen Falle für kanonische Ensembles aus $N = 10, 100, 1000$ und 10000 Teilchen.

offener Teilchenaustausch des Systems mit seiner Umgebung. Ein kanonisches System ist hingegen gegenüber solchen Austauschprozessen abgeschlossen und weist daher keine Anomalien in der Teilchenzahl-Fluktuation auf. Wie wir aus dem oben Besprochenen sehen konnten, ist das auch ein mit den mikrokanonischen Ergebnissen verträglicher Befund. Und wie sieht es mit den Energiefluktuationen in den kanonischen Ensembles aus? Da letzteres sich in einem offenen Energieaustausch mit seiner Umgebung befindet, besteht da nicht die Möglichkeit anomaler Fluktuationen der Gesamtenergie? Die Antwort auf diese Frage ist zum Glück negativ, und zwar aus folgenden Gründen. Die mittlere quadratische Energiefluktuation $(\Delta E)_N^2 \equiv \langle E^2 \rangle_N - \langle E \rangle_N^2$ lässt sich in einem kanonischen Ensemble aus N Bosonen mit Hilfe der Wärmekapazität C_N^B nach der Beziehung

$$(\Delta E)_N^2 = k_B T^2 C_N^B \quad (3.178)$$

darstellen. Für die weiteren Untersuchungen müssen wir den Bezug dieser Größe zur mittleren Energie finden, die wir nach der Gleichung

$$\langle E \rangle_N = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_N^B \quad (3.179)$$

mit der kanonischen Zustandssumme Z_N^B erhalten. Des Weiteren bleibt nur noch festzustellen, ob die spezifische relative Fluktuationsstärke $\Delta E_N / \langle E \rangle_N$ anomal makroskopisch oder doch mit der Teilchenzahl N unterdrückt ist. Letzteres ist aus allgemein verständlichen Gründen der Fall, denn wie wir wissen, sind sowohl Wärmekapazität C_N^B als auch die mittlere Energie $\langle E \rangle_N$ extensive Größen, d.h. proportional zur Teilchenzahl N . Aus dieser Überlegung folgt die Abschätzung $\Delta E_N / \langle E \rangle_N \sim N^{-1/2}$ und somit das Verschwinden im thermodynamischen Limes.

Die detaillierteren Angaben der relativen Stärke der Energiefluktuationen hängen vom Fallenpotential ab. So ergeben sich z.B. im isotropen harmonischen Potential mit der kanonischen Zustandssumme aus (3.151) Kurvenverläufe, die in Abb. 3.14 dargestellt sind. Wie man daraus sieht, verschwinden in der Tat die relativen Energiefluktuationen innerhalb der kanonischen Ensemble-Theorie im thermodynamischen Limes, so wie die schon zuvor beschriebenen Teilchenzahl-Fluktuationen. Das sorgt nun dafür, dass beide Ensembles, das kanonische und das mikrokanonische,

zueinander äquivalent sind. Aus diesem Grund können wir getrost auf die Untersuchungen abgeschlossener Systeme innerhalb der mikrokanonischen Ensemble-Theorie verzichten. Damit stellen wir abschließend fest, dass die Beschreibungen der idealen Bose-Gase innerhalb der kanonischen Ensembles auch für völlig abgeschlossene Systemen ausreichend sind und keine inneren Widersprüche aufweisen.

Kapitel 4

Schwach wechselwirkende Bose-Gase

In diesem Kapitel werden wir den Einfluss einer schwachen Wechselwirkung auf die Bose-Gase untersuchen. Unser Hauptaugenmerk richtet sich dabei auf die dabei verursachte Änderung der kritischen Temperatur, bei der die Bose-Einstein-Kondensation einsetzt. Um die dazu notwendigen theoretischen Konzepte in einem überschaubaren Rahmen einzuführen, beschränken wir uns in diesem Kapitel auf Beschreibungen der Bose-Gase in einem großkanonischen Ensemble. Weiterhin konzentrieren wir uns auf die Situation, in der Gasteilchen in einem genügend flachen harmonischen Fallen-Potential eingesperrt sind und sich somit innerhalb der semiklassischen Näherung beschreiben lassen.

Zunächst erinnern wir nochmals daran, dass die Bose-Einstein-Kondensation ein rein quantenstatistischer Effekt ist. Das heißt unter anderem, dass eine Wechselwirkung dafür nicht existentiell nötig ist. Es stellte vielmehr eine große Herausforderung an die Experimentatoren dar, die Fähigkeit bosonischer Systeme zur Bose-Einstein-Kondensation auszunutzen, noch bevor Wechselwirkungs-Effekte die Statistik zu stark verzerren oder gar dominieren. Genau deshalb wurde ein stark verdünntes Gas benutzt, bei dem die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Gasteilchen weitestgehend vernachlässigbar ist. Dennoch lassen sich Wechselwirkungen auch bei starken Verdünnungen nicht ganz vermeiden, zuweilen aber auch ganz gezielt als Kontrollparameter einsetzen. Oft kann man die dabei zu untersuchenden Systeme als näherungsweise ideal betrachten, und die Wechselwirkungs-Effekte als schwache Störungen behandeln. Deshalb beschränken wir uns hier auf Untersuchungen der führenden Störungsordnung.

Das Ziel der Diskussion im Abschnitt 4.1 wird es sein, die Störungstheorie ausgehend von der in Kapitel 2 eingeführten Feldtheorie zu entwickeln. Solche statistischen Begriffe wie die Zustandssumme bzw. das großkanonische Potential werden hierbei auf wechselwirkende Systeme ausgeweitet. Außerdem kommt hier der Begriff der Selbstenergie hinzu, welcher im Rahmen der Renormierungstheorie eine wichtige Rolle spielt. Die störungstheoretische Vorgehensweise führt uns zu den so genannten Feynman-Diagrammen, welche anhand einiger weniger Feynman-Regeln aufgebaut werden. Damit lassen sich im ersten Abschnitt dieses Kapitels Diagramme des großkanonischen Potentials und der Greens-Funktion, sowie der Selbstenergie erzeugen. Diese Darstellungen basieren auf einem graphisch-rekursiven Verfahren und sind stark an diejenigen in den Publikationen [44,45] angelehnt.

Im Abschnitt 4.2 diskutieren wir die gängigen Wechselwirkungsmodelle. Dazu zählt in erster Linie das Modell der so genannten s-Wellen-Streuung, welche die niederenergetische Pseudopotential-Näherung zur Kontakt-Wechselwirkung darstellt. Außerdem wird das Modell durch eine Dipol-Dipol-Wechselwirkung erweitert, die für Systeme von Teilchen mit relativ starken magnetischen oder elektrischen Dipolmomenten relevant ist.

Im Abschnitt 4.3 wenden wir nun die vorher eingeführten feldtheoretischen Verfahren auf ein kontakt- und dipolar-wechselwirkendes bosonisches System an. Das Hauptaugenmerk gilt dabei der wechselwirkungsbedingten Verschiebung der kritischen Temperatur, welche wir in der semi-klassischen Näherung ausrechnen. Die Untersuchungen dieses Abschnitts wurden in den kürzlich erschienenen Publikationen [46,47] niedergelegt und werden hier in einem etwas größeren Zusammenhang eingebunden.

4.1 Vielteilchentheorie mit schwacher Wechselwirkung

Die Darstellung schwach wechselwirkender Bose-Systeme im großkanonischen Ensemble beginnen wir in diesem Abschnitt mit einer feldtheoretischen Einführung. Dabei bauen wir auf die Untersuchungen wechselwirkungsfreier Systeme im Abschnitt 2.1 auf. Insbesondere beziehen wir uns dabei mehrfach auf das darin eingeführte Konzept der Funktionalintegration.

Unsere Untersuchungen beginnen wir im Unterabschnitt 4.1.1 mit den statistisch relevanten Begriffen der Zustandssumme und des großkanonischen Potentials sowie der Greens-Funktion, die auch als Propagator bezeichnet wird. Diese kennen wir bereits aus den Rechnungen für ideale Bose-Gase. Hier werden sie auf den Fall wechselwirkender Gase im Rahmen der Störungstheorie verallgemeinert. Zur selbstkonsistenten Verbesserung der rein störungstheoretischen Resultate verwendet man das Konzept der Renormierung, mit deren Hilfe lediglich einige wenige physikalische Systemparameter abgeändert werden müssen. Die zur Renormierung benötigte feldtheoretische Größe wird unter anderem durch die so genannte Selbstenergie geliefert, welche im Abschnitt 4.1.2 eingeführt wird.

Alle störungstheoretischen Beiträge zur Selbstenergie, zum Propagator oder zum großkanonischen Potential lassen sich in Form von Feynman-Diagrammen ausdrücken. Diese können mit Hilfe der im Unterabschnitt 4.1.3 eingeführten Feynman-Regeln aufgebaut werden. Im anschließenden Unterabschnitt 4.1.4 werden die Diagramme der besagten Größen inklusive ihrer relativen Gewichte nach einem graphisch rekursiven Verfahren erzeugt.

4.1.1 Feldtheoretische Begriffe

Das Ziel dieses Unterabschnittes ist es, die im Abschnitt 2.1 eingeführten feldtheoretische Begriffe für den Fall der Bose-Gase mit wechselwirkenden Teilchen zu verallgemeinern. Dabei beginnen wir

mit dem gegenüber (2.2) erweiterten Hamiltonian

$$\hat{H} \equiv \int d^3x \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \hat{a}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{y}) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{a}(\mathbf{y}) \hat{a}(\mathbf{x}) , \quad (4.1)$$

wobei $V^{(\text{int})}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ für die Wechselwirkung zwischen zwei verschiedenen Teilchen an den Orten \mathbf{x} und \mathbf{y} steht. An dieser Stelle sei noch erwähnt, dass das Hamiltonian (4.1) bereits jetzt eine Näherung darstellt, in der Drei-, Vier- und alle höheren Viel-Teilchen-Wechselwirkungen weggelassen sind. Diese Näherung ist in den meisten gängigen Experimenten zur Bose-Einstein-Kondensation fern der Resonanzstreuungen berechtigt, da die dabei beteiligten Gase als stark verdünnt anzusehen sind. In diesen Fällen sind die simultanen Viel-Teilchen-Streuungen eher selten. Genau genommen führen solche Effekte häufig zu unerwünschten Rekombinationsprozessen in Kondensaten und sind schon daher so gering wie möglich zu halten. Zur eingehenden Diskussion dieser Frage sei auf das Lehrbuch von Huang [85] verwiesen. Hier soll nur kurz erwähnt werden, dass die darin geschilderten Abschätzungen keinen Einfluss der schwachen Viel-Teilchen-Wechselwirkungen auf die Terme der ersten störungstheoretischen Ordnung ergeben. Da wir uns in den weiteren Darstellungen tatsächlich nur mit dieser niedrigsten Störungsordnung beschäftigen werden, reichen die Zwei-Körper-Prozesse somit aus.

Nun schreiten wir zur Funktionalintegral-Formulierung der Zustandssumme (2.1). Diese ergibt sich in völliger Analogie zu der im Abschnitt 2.1 durchgeführten Rechnung als

$$Z_{GK} = \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) e^{-\left(\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi]\right)/\hbar} . \quad (4.2)$$

Das hierbei verwendete Funktionalintegral stellt dabei nach wie vor den Kontinuuumlimites der unendlichdimensionalen Integration (2.31) über die periodischen Feldkonfigurationen dar. Die letzteren werden mit Hilfe der euklidischen Wirkung gewichtet, die allerdings in Anwesenheit der Wechselwirkung eine zusammengesetzte Größe darstellt bestehend aus dem wechselwirkungsfreien Anteil

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \psi(\mathbf{x}, \tau) , \quad (4.3)$$

den wir bereits aus (2.33) kennen, und dem neuen Zwei-Teilchen-Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] = \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x d^3y |\psi(\mathbf{y}, \tau)|^2 V^{(\text{int})}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, \tau)|^2 . \quad (4.4)$$

Für spätere Untersuchungen empfiehlt es sich, den freien Anteil (4.3) in einer etwas veränderten Form als

$$\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] = \hbar \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' \int d^3x d^3y \psi^*(\mathbf{y}, \tau') G^{(0)-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau) \quad (4.5)$$

zu schreiben, wobei die bilokale Größe $G^{(0)-1}$ den so genannten Integralkern

$$G^{(0)-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) \equiv \frac{1}{\hbar} \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \delta(\tau' - \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \quad (4.6)$$

darstellt. Der wechselwirkende Term lässt sich ebenfalls als

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] &= \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 \int d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 d^3x_4 V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2 | \mathbf{x}_3, \tau_3; \mathbf{x}_4, \tau_4) \\ &\quad \times \psi^*(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \psi^*(\mathbf{x}_3, \tau_3) \psi(\mathbf{x}_4, \tau_4) \end{aligned} \quad (4.7)$$

umschreiben mit dem Folgenden Vierertensor der Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2 | \mathbf{x}_3, \tau_3; \mathbf{x}_4, \tau_4) &\equiv \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_4) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) \\ &\quad \times \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\tau_1 - \tau_3) \delta(\tau_1 - \tau_4) . \end{aligned} \quad (4.8)$$

Neben der Zustandssumme (2.1) können wir hier noch die Greensche Funktion (2.49) untersuchen. Diese auch als voller Propagator bezeichnete Zwei-Punkt-Funktion ergibt sich unter Berücksichtigung der Wechselwirkung in einer zu (2.59) analogen Form als

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi^*(\mathbf{x}_2, \tau_2) e^{-(\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi] + \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi])/\hbar} . \quad (4.9)$$

Um die störungstheoretischen Entwicklungen der Zustandssumme (4.2) und des vollen Propagators (4.9) zu erhalten, nehmen wir ferner an, dass der Wirkungsanteil (4.4) klein ist, d.h. $\mathcal{A}^{(\text{int})}/\hbar \ll 1$. Damit erhalten wir für die Zustandssumme

$$Z_{GK} = Z_{GK}^{(0)} \left\{ 1 - \frac{1}{Z_{GK}^{(0)}} \oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) \left[\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}^{(\text{int})}[\psi^*, \psi] + \dots \right] e^{-\mathcal{A}^{(0)}[\psi^*, \psi]/\hbar} \right\} , \quad (4.10)$$

wobei der erste Term $Z_{GK}^{(0)}$ den wechselwirkungsfreien Beitrag (2.32) repräsentiert, den wir hier zur besseren Unterscheidung von der vollen Zustandssumme (4.2) mit dem oberen Index "(0)" versehen haben. Die weiteren Terme repräsentieren störungstheoretische Beiträge erster und höherer Ordnungen. Unmittelbar aus der Zustandssumme (4.2) lässt sich das großkanonische Potential

$$\mathcal{F}_{GK} \equiv -\frac{1}{\beta} \ln Z_{GK} = \mathcal{F}_{GK}^{(0)} - \frac{1}{\beta} W^{(\text{int})} \quad (4.11)$$

bestimmen. Der erste Term auf der rechten Seite $\mathcal{F}_{GK}^{(0)} \equiv -\ln Z_{GK}^{(0)}/\beta$ entspricht genau dem wechselwirkungsfreien großkanonischen Potential aus Abschnitt 2.1.4. Die dimensionslose Größe $W^{(\text{int})}$ stellt dabei den wechselwirkenden Anteil dar, welcher im Unterabschnitt 4.1.4 noch genauer bestimmt wird. Es ist interessant an dieser Stelle zu bemerken, dass die störungstheoretische Entwicklung des großkanonischen Potentials einer Kumulantenentwicklung entspricht, im Gegensatz zu der Momentenentwicklung der Zustandssumme. Nur die erste der beiden hat die angenehme Eigenschaft, in jeder Entwicklungsordnung extensive Ausdrücke zu liefern, d.h. proportional zur Teilchenzahl N zu sein. Damit ergeben sie auch im thermodynamischen Limes noch sinnvolle Resultate [51, Kapitel 3].

Zur störungstheoretischen Entwicklung des vollen Propagators (4.9) brauchen wir neben der Entwicklung des Funktionalintegrals noch die Entwicklung der Zustandssumme im Nenner. Bis zur führenden Entwicklungsordnung lässt sich dieser als

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) + \dots \quad (4.12)$$

ausschreiben. Der erste Summand stellt dabei den wechselwirkungsfreien Propagator (2.59) aus Abschnitt 2.1.3 dar, den wir hier mit dem überstehenden Index “(0)” versehen haben, um den Unterschied zum vollen Propagator hervorzuheben. Der explizite Ausdruck für den Term nächster Ordnung liesse sich zwar direkt angeben, wäre aber in dieser Form noch wenig aufschlussreich. Aus diesem Grund verweisen wir auf die störungstheoretische Entwicklung dieser Größe im Unterabschnitt 4.1.4.

4.1.2 Selbstenergie

Bei einer störungstheoretischen Entwicklung, wie sie z.B. für die Zustandssumme (4.10) durchgeführt wurde, war es von entscheidender Bedeutung, dass der Störungsterm klein ist. Dennoch ist dies auch in unseren Rechnungen zum verdünnten Bose-Gas nicht immer gewährleistet, und so müssen die Reihen auf eine angemessene Art resummiert werden. Eine relativ einfache Methode, mit der sich eine bestimmte Klasse von störungstheoretischen Termen zusammenfassen lässt, wird durch die so genannte Renormierung gegeben. Deren wichtigster Bestandteil ist die Selbstenergie, welche den mittleren Einfluss der Wechselwirkung auf die Parameter beschreibt, die in der wechselwirkungsfreien Theorie vorkommen, wie z.B. Masse, Frequenz und chemisches Potential.

Zur konkreten Diskussion dieser Größe bemerken wir zunächst die folgende wichtige Differentialgleichung für den freien Propagator (2.68):

$$\begin{aligned} \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{y}, \tau') &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{y}) \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi m(\tau-\tau')/\hbar\beta} \\ &= \hbar \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau-\tau'+n\hbar\beta) . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Die erste Gleichung ergibt sich unmittelbar aus der Eigenwertgleichung (2.35). Für die zweite wird die Entkopplung der Indizes \mathbf{k} und m ausgenutzt, und es werden Vollständigkeits-Relationen (2.36) und (2.39) angewendet. Weiterhin ergibt sich damit für die Imaginärzeiten $\tau', \tau'' \in (0; \hbar\beta]$ die folgende Beziehung zwischen dem Integralkern (4.6) und dem freien Propagator:

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x G^{(0)-1}(\mathbf{z}, \tau''; \mathbf{x}, \tau) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{y}, \tau') = \delta(\mathbf{z}-\mathbf{y}) \delta(\tau''-\tau') . \quad (4.14)$$

Daraus sehen wir, dass der Integralkern zum freien Propagator reziprok im funktionalen Sinne ist, wodurch auch seine Bezeichnung als $G^{(0)-1}$ gerechtfertigt ist. Nun gehen wir einen Schritt weiter und definieren den vollen Integralkern der wechselwirkenden Theorie \mathbf{G}^{-1} als die funktionale Umkehrung des vollen Propagators gemäß der Gleichung

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{z}, \tau''; \mathbf{x}, \tau) \mathbf{G}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{y}, \tau') = \delta(\mathbf{z}-\mathbf{y}) \delta(\tau''-\tau') . \quad (4.15)$$

Dieser volle Integralkern \mathbf{G}^{-1} spielt nun für Theorien mit Wechselwirkung eine ähnliche Rolle wie der freie Integralkern $G^{(0)-1}$ in wechselwirkungsfreien Theorien. Die Differenz zwischen den beiden

$$\Sigma(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) = G^{(0)-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) - \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) \quad (4.16)$$

beschreibt den reinen Effekt der Wechselwirkung und wird nun im Folgenden als die Selbstenergie bezeichnet.

Um die Bedeutung dieser Größe besser zu verstehen, formen wir die Identität (4.16) noch etwas um. Dafür erweitern wir sie mit dem vollen Propagator $\mathbf{G}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{y}, \tau')$ von links und dem freien Propagator $G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{z}_2, \tau_2)$ von rechts und integrieren die Zwischenpunkte (x, τ) und (\mathbf{y}, τ') aus. Damit ergibt sich nach (4.14) und (4.15) für den vollen Propagator

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{z}_2, \tau_2) &= G^{(0)}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{z}_2, \tau_2) \\ &+ \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' \int d^3x d^3y \mathbf{G}(\mathbf{z}_1, \tau_1; \mathbf{y}, \tau') \Sigma(\mathbf{y}, \tau'; \mathbf{x}, \tau) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{z}_2, \tau_2) . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Das ist die berühmte Dyson-Gleichung für die Greens-Funktionen [95]. Demnach kann die Propagation (in Imaginärzeit wie in Realzeit) eines wechselwirkenden Teilchens auf zwei verschiedene Weisen verlaufen. Bei der ersten ist es die freie Propagation ohne jegliche Wechselwirkungsprozesse, welche durch den ersten Summanden beschrieben ist. Bei der zweiten läuft ein Teilchen zuerst frei, bis es an einem Zwischenpunkt in einem Wechselwirkungsprozess teilnimmt. Danach setzt es seine Bewegung weiter fort, vielleicht völlig frei, vielleicht aber auch nur bis zum nächsten Wechselwirkungsvorgang. Nun wird jeder dieser einzelnen nicht trivialen Vorgänge durch die Selbstenergie (4.16) beschrieben. Dabei handelt es sich jedoch nicht um die Wechselwirkungsprozesse zwischen zwei verschiedenen Teilchen, sondern lediglich um die Wechselwirkung eines einzelnen Teilchens mit seiner Umgebung, welche durch die Präsenz des Teilchens selbst polarisiert wird. Effektiv gesehen, wirkt das Teilchen dabei mittels umgebender Felder auf sich selbst, woher auch die Bezeichnung “Selbstenergie” abstammt. Bei einer näheren Betrachtung der Dyson-Gleichung (4.17) fällt ihr selbstkonsistenter Charakter auf, denn der volle Propagator tritt darin auf beiden Seiten auf. Würde man also die Selbstenergie exakt kennen, so liesse sich der Propagator damit selbstkonsistent berechnen. Das ist ein wirklich großer Vorteil gegenüber dem rein störungstheoretischen Ausdruck, den wir direkt aus der Definitionsgleichung (4.9) gewinnen können. Und auch wenn man nur einige wenige Selbstenergie-Terme explizit angeben kann, so wird dadurch eine ganze Klasse von störungstheoretischen Termen des Propagators beschrieben. Genau das geschieht beispielsweise in der Hartree-Fock-Näherung, die wir im Abschnitt 4.1.5 noch behandeln werden.

Es lässt sich ferner noch eine weitere Interpretation der Renormierung angeben. Da die Propagation eines Teilchens unter Einfluss seiner Wechselwirkungen mit der Umgebung geschieht, ändern sich effektiv seine Eigenschaften. Man spricht in diesem Zusammenhang von einem “angezogenen” Teilchen im Gegensatz zu einem “nackten” Teilchen, das uns in der freien Theorie begegnet. Ursprünglich kommt die Renormierung aus der Quantenelektrodynamik (QED), wo man z.B. ein Elektron zunächst als ein Punktteilchen betrachtet und feststellt, dass seine Gesamtenergie damit unendlich wäre. Da jedoch ein Elektron im physikalischen Vakuum vom elektromagnetischen Feld umgeben ist, wird eine ebenfalls unendliche Energie für die Polarisation des Vakuums verbraucht. Die beiden durch Lokalität der QED entstandenen Unendlichkeiten kompensieren sich gegenseitig und ergeben ein renormiertes “angezogenes” Teilchen, dessen Energie und sonstige Eigenschaften vom real messbaren Elektron bekannt sind. Die Physik bei ultrakurzen Abständen ist uns dabei im Detail zwar nicht bekannt, in allen renormierbaren Theorien (un nur mit solchen haben wir

hier zu tun) spielt diese Ignoranz jedoch keine Rolle. Übertragen auf ein Gas-Atom oder Molekül heißt das natürlich nicht, dass es in einem völlig wechselwirkungsfreien Gas singuläre Eigenschaften eines Punktteilchens besitzt. Diese sind bereits durch die Präsenz des physikalischen Vakuums beseitigt. In einem wechselwirkenden Gas stellt dennoch ein durch Selbstenergie-Effekte angezogenes Gasteilchen einen besseren Ausgangspunkt für weitere theoretische Untersuchungen dar als das nackte Teilchen der freien Theorie. Interessant ist in diesem Zusammenhang auch noch zu wissen, wie die einzelnen Selbstenergie-Beiträge aussehen. Dazu werden sie im Unterabschnitt 4.1.5 in den beiden niedrigsten störungstheoretischen Ordnungen mit Hilfe von Feynman-Diagrammen graphisch dargestellt.

4.1.3 Einführung in die Diagrammtechnik

In diesem Unterabschnitt führen wir einige Abkürzungen ein, die das weitere Vorgehen bei der störungstheoretischen Entwicklung der Selbstenergie (4.16), des Propagators (4.9) sowie des großkanonischen Potentials (4.11) etwas erleichtern. Weiterhin lassen sich die störungstheoretischen Ausdrücke vereinfachen, indem man sie in Form von Diagrammen darstellt. Die dazu notwendigen graphischen Elemente sowie Anwendungsregeln werden ebenfalls erklärt.

Wir beginnen hier mit kleinen Abänderungen der Notation, welche die weitere Buchhaltung erleichtern sollen. Da wir es weiterhin nur mit einer endlichen Anzahl von kontinuierlichen Raum-Imaginärzeit-Punkten zu tun haben werden, bietet es sich an, sie mit einem einzigen Index zu bezeichnen. Damit ergeben sich z.B. die folgenden Abkürzungen:

$$\psi_i \equiv \psi(\mathbf{x}_i, \tau_i) \quad , \quad \int_i \equiv \int_0^{\hbar\beta} d\tau_i \int d^3x_i \quad . \quad (4.18)$$

Für den Integralkern (4.6) sowie den Vierertensor (4.8) ergibt sich damit

$$G_{ij}^{(0)-1} \equiv G^{(0)-1}(\mathbf{x}_i, \tau_i; \mathbf{x}_j, \tau_j) \quad , \quad V_{ij,kl}^{(\text{int})} \equiv V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_i, \tau_i; \mathbf{x}_j, \tau_j | \mathbf{x}_k, \tau_k; \mathbf{x}_l, \tau_l) \quad . \quad (4.19)$$

Die weiteren Größen wie Propagatoren oder die Selbstenergie werden in völliger Analogie dazu als $G_{ij}^{(0)}$, \mathbf{G}_{ij} bzw. Σ_{ij} bezeichnet.

Die störungstheoretischen Ausdrücke aller für uns interessanten Größen werden nun mit Hilfe der freien Propagatoren $G_{ij}^{(0)}$ und der Wechselwirkungen $V_{ij,kl}^{(\text{int})}$ dargestellt. Da es jedoch sehr schwer ist, zwischen den verschiedenen Indexkombinationen zu unterscheiden, die auftreten können, ziehen wir die diagrammatische Darstellungstechnik zu Rate. Diese wurde in der relativistischen Quantenfeldtheorie von Feynman etabliert, und daher werden solche graphischen Darstellungen als Feynman-Diagramme bezeichnet. Die Vorschriften, nach denen sich solche Diagramme bilden lassen, heißen weiterhin Feynman-Regeln. Sie variieren stark je nach Theorie und sind auch sonst an keine fest vorgeschriebenen Strukturen gebunden. So werden auch in unseren weiteren Darstellungen der Viel-Teilchen-Theorie Regeln verwendet, die z.B. von den in [48,50] benutzten etwas abweichen. Diese Regeln ermöglichen neben den Darstellungen der Vakuumdiagramme des großkanonischen Potentials auch eine konsistente Konstruktion der Selbstenergie-Diagramme. Sie wurden

zuerst in der skalaren ϕ^4 -Theorie in [45,96] verwendet und in [44] auf die Viel-Teilchen-Theorie verallgemeinert. Das Kernstück bildet dabei das graphische Element der Vierer-Wechselwirkung in Form zweier Vertizes, die miteinander durch eine geschlängelte Wechselwirkungslinie verbunden sind:

$$-\frac{1}{\hbar} V_{12,34}^{(\text{int})} \equiv \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad 4 \end{array} . \quad (4.20)$$

Ein weiteres Element ist der freie Propagator, der durch eine einfache gerichtete Linie dargestellt wird:

$$G_{12}^{(0)} \equiv 1 \longrightarrow 2 . \quad (4.21)$$

Der freie Integralkern $G^{(0)-1}$ aus (4.6) sowie sein wechselwirkendes Gegenstück \mathbf{G}^{-1} erhalten keine eigenen graphischen Bezeichnungen, aber dafür die Selbstenergie $\Sigma_{12} = G_{12}^{(0)-1} - \mathbf{G}_{12}^{-1}$ in Form eines Doppelkreises mit zwei offenen Stummeln

$$\Sigma_{12} \equiv 1 \text{---} \bigcirc \text{---} 2 . \quad (4.22)$$

Auch der volle Propagator bekommt seine Bezeichnung, die in Analogie zum freien Propagator (4.21) eine gerichtete Linie darstellt, diesmal jedoch eine doppelte:

$$\mathbf{G}_{12} \equiv 1 \rightleftarrows 2 . \quad (4.23)$$

Die graphischen Elemente (4.20)–(4.23) lassen sich auf verschiedene Weise kombinieren, wichtig ist dabei nur, dass die Linien an die Stummeln zu verbinden sind, nicht aber an die anderen Linien. So werden z.B. die Vierer-Wechselwirkung und der freie Propagator durch die folgende Anklebevorschrift aneinander geheftet:

$$-\frac{1}{\hbar} \int_4 V_{12,34}^{(\text{int})} G_{45}^{(0)} \equiv \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad 4 \end{array} \begin{array}{c} 4 \longrightarrow 5 \end{array} \equiv \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ 1 \quad 5 \end{array} . \quad (4.24)$$

Auch mit der Selbstenergie lässt sich eine einfache Linie (4.21) verbinden, wie im übrigen auch die Doppellinie (4.23):

$$\int_2 \mathbf{G}_{12} \Sigma_{23} = 1 \rightleftarrows \bigcirc \text{---} 3 \quad , \quad \int_2 \Sigma_{12} G_{23}^{(0)} = 1 \text{---} \bigcirc \text{---} 3 . \quad (4.25)$$

Eine weitere wichtige graphische Operation ist die Linienamputation, die zur Illustration der Funktionalableitung $\delta/\delta G^{(0)}$ dienen soll. Dazu stellen wir zunächst die folgende Identität fest:

$$\frac{\delta G_{12}^{(0)}}{\delta G_{34}^{(0)}} \equiv \frac{\delta 1 \longrightarrow 2}{\delta 3 \longrightarrow 4} = \delta_{13} \delta_{42} \quad , \quad (4.26)$$

welche die Funktionalableitungs-Vorschrift widerspiegelt. Die Deltas $\delta_{ij} \equiv \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \delta(\tau_i - \tau_j)$ stellen dabei lediglich die Indexvertauschungs-Operatoren dar, denn es gilt $\int_3 \delta_{13} G_{32}^{(0)} = G_{12}^{(0)}$ bzw. $\int_5 \delta_{15} V_{5234} = V_{1234}$. Wendet man also die Operation $\delta/\delta G_{34}^{(0)}$ auf eine Linie $G_{12}^{(0)}$ an, so wird sie nach (4.26) gelöscht (amputiert) und anschließend werden die Indizes (1,2) gegen (3,4) ausgetauscht.

Bei einigen Rechnungen kann auch die Funktionalableitung nach dem Integralkern $\delta/\delta G^{(0)-1}$ vorkommen. Diese lässt sich jedoch auf die bereits bekannte Funktionalableitung $\delta/\delta G^{(0)}$ zurückführen. Dazu benötigen wir erstens die Kettenregel der Funktionalableitungen

$$\frac{\delta}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = \int_{34} \frac{\delta G_{34}^{(0)}}{\delta G_{12}^{(0)-1}} \frac{\delta}{\delta G_{34}^{(0)}} . \quad (4.27)$$

Zweitens stehen uns die Funktionalumkehrungen (4.14) und (4.15) zur Verfügung, die wir mit (4.18), (4.19) und den dazu analogen Abkürzungen als

$$\int_3 G_{13}^{(0)-1} G_{32}^{(0)} = \delta_{12} \quad , \quad \int_3 \mathbf{G}_{13}^{-1} \mathbf{G}_{32} = \delta_{12} \quad (4.28)$$

schreiben. Mit der Funktionalableitungs-Vorschrift $\delta(\delta_{12})/\delta G_{34}^{(0)-1} = 0$ ergibt sich nun aus der ersten Gleichung (4.28) $\delta G_{34}^{(0)}/\delta G_{12}^{(0)-1} = -G_{31}^{(0)} G_{24}^{(0)}$ und nach (4.27) somit auch

$$\frac{\delta}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = - \int_{34} G_{31}^{(0)} G_{24}^{(0)} \frac{\delta}{\delta G_{34}^{(0)}} . \quad (4.29)$$

Manchmal kommt die Linienamputation zusammen mit anschließendem Anheften einer Linie an beide hinterbliebenen Stummel vor, also als

$$\hat{L} \equiv \int_{12} G_{12}^{(0)} \frac{\delta}{\delta G_{12}^{(0)}} . \quad (4.30)$$

Diese Operation entspricht dem Linienzähl-Operator. Eine einzelne Linie lässt er nämlich unberührt, denn wegen (4.26) gilt

$$\hat{L} G_{34}^{(0)} \equiv \int_{12} G_{12}^{(0)} \frac{\delta G_{34}^{(0)}}{\delta G_{12}^{(0)}} = G_{34}^{(0)} . \quad (4.31)$$

Bei einem Graphen mit N Linien wirkt der Operator \hat{L} auf jede Linie genau einmal und belässt diese entsprechend der Gleichung (4.31) in ihrem ursprünglichen Zustand. Da dies aber N mal angewandt wird, wird der ursprüngliche Graph N -fach kopiert und es gilt

$$\hat{L} \langle \text{Graph mit } N \text{ Linien} \rangle = N \times \langle \text{Graph mit } N \text{ Linien} \rangle . \quad (4.32)$$

Mit anderen Worten zählt der Operator \hat{L} in der Tat die Linien eines Graphen.

4.1.4 Rekursion für Selbstenergie

In diesem Abschnitt werden wir die Feynman-Diagramme der Selbstenergie, des Propagators sowie des großkanonischen Potentials bestimmen. Dafür benutzen wir die Schwinger-Dyson-Gleichung [97] der Vielteilchen-Theorie, die wir aus allgemeingültigen Überlegungen herleiten werden. Diese Gleichung hat die Form einer Selbstkonsistenz-Gleichung und ergibt zusammen mit der Dyson-Gleichung für die Greens-Funktion (4.17) ein geschlossenes Gleichungs-System, aus dem sich alle

Feynman-Diagramme der Selbstenergie mit den dazugehörigen Gewichten rekursiv bestimmen lassen. Die Feynman-Graphen der Greens-Funktion (des Propagators) ergeben sich dabei als Nebenprodukt. Dieser Abschnitt wird anschließend durch Erzeugung der so genannten Vakuum-Diagramme des großkanonischen Potentials komplettiert. Sie lassen sich aus den Graphen der Selbstenergie und des Propagators zusammensetzen und erfordern auf diese Weise keine eigenständige Rekursionsgleichung.

Zur Vorbereitung weiterer Rechnungen dieses Abschnitts beginnen wir mit der Wirkung der Vielteilchen-Theorie. Sie setzt sich additiv aus dem wechselwirkungsfreien Anteil (4.5) und dem Anteil der Wechselwirkung (4.7) zusammen und ist mit den Abkürzungen (4.18) und (4.19) als

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \hbar \int_{12} G_{12}^{(0)-1} \psi_1^* \psi_2 + \frac{1}{2} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \psi_1^* \psi_2 \psi_3^* \psi_4 \quad . \quad (4.33)$$

zu schreiben. Als Ausgangspunkt aller weiteren Überlegungen dient uns die folgende Integro-Differentialgleichung:

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \frac{\delta}{\delta \psi_1^*} \left\{ \psi_2^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} \right\} = 0, \quad (4.34)$$

die wir aus dem schnellen Verschwinden der Exponentialfunktion im Unendlichen folgern können. Nach der expliziten Ausführung der darin vorkommenden Funktionalableitung erhalten wir mit der Wirkung (4.33) die so genannte Schwinger-Dyson-Gleichung

$$\oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \left\{ \delta_{12} - \int_3 G_{13}^{(0)-1} \psi_3 \psi_2^* - \frac{1}{\hbar} \int_{345} V_{13,45}^{(\text{int})} \psi_5 \psi_4^* \psi_3 \psi_2^* \right\} e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} = 0 \quad . \quad (4.35)$$

Der erste Summand stellt dabei die Zustandssumme (4.2) multipliziert mit der Delta-Funktion dar, also $Z_{GK} \delta_{12}$. Der zweite Summand steht für die Verbindung des freien Integralkerns mit dem vollen Propagator (4.9) entsprechend der Gleichung $Z_{GK} \int_3 G_{13}^{(0)-1} \mathbf{G}_{32}$. Es bleibt also nur zu klären, was der letzte Summand in (4.35) bedeutet.

Zur Klärung dieser Frage berechnen wir zuerst die Funktionalableitung der Zustandssumme (4.2) nach dem freien Integralkern und erhalten

$$\frac{\delta Z_{GK}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} = - \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \psi_1 \psi_2^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} = -Z_{GK} \mathbf{G}_{12} \quad , \quad (4.36)$$

wobei wir uns bei der letzten Gleichung noch an die Definition des vollen Propagators in (4.9) erinnern. Weiterhin wenden wir die Funktionalableitung nach dem freien Integralkern auf diesen Propagator und erhalten

$$\frac{\delta \mathbf{G}_{34}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} = \mathbf{G}_{12} \mathbf{G}_{34} - \frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \psi_1 \psi_2^* \psi_3 \psi_4^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} \quad . \quad (4.37)$$

Der letzte Term hier hat schon die Form, die im letzten Summanden von der Schwinger-Dyson-Gleichung (4.35) erforderlich ist. Doch dazu formen wir die Funktionalableitung auf der linken

Seite in (4.37) noch etwas um. Durch die zweite Beziehung (4.28) lässt sich der volle Propagator identisch erweitern mit dem Ergebnis

$$\frac{\delta \mathbf{G}_{34}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} = - \int_{56} \mathbf{G}_{35} \frac{\delta \mathbf{G}_{56}^{-1}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{64} = - \mathbf{G}_{32} \mathbf{G}_{14} + \int_{56} \mathbf{G}_{35} \frac{\delta \Sigma_{56}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{64} . \quad (4.38)$$

Im letzten Schritt haben wir noch die Definition der Selbstenergie (4.16) verwendet. Zusammen mit (4.37) ergibt sich damit für den Mittelwert des Viererprodukts der Felder

$$\frac{1}{Z_{GK}} \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi \psi_1 \psi_2^* \psi_3 \psi_4^* e^{-\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar} = \mathbf{G}_{12} \mathbf{G}_{34} + \mathbf{G}_{32} \mathbf{G}_{14} - \int_{56} \mathbf{G}_{35} \frac{\delta \Sigma_{56}}{\delta G_{21}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{64} . \quad (4.39)$$

Übrigens entspricht diese Beziehung der verallgemeinerten Wick-Regel der Viererfeld-Mittelwerte [98]. Diese wurde für wechselwirkungsfreie Mittelwerte aufgestellt und ergab lediglich die Summe der beiden verschiedenen Produkte von freien Propagatoren. Für den Mittelwert der wechselwirkenden Theorie musste diese Regel offensichtlich um den Ableitungsterm der Selbstenergie erweitert werden.

Nach diesen Vorbemerkungen sind wir nun in der Lage, die Schwinger-Dyson-Gleichung (4.35) auf die Form

$$\begin{aligned} \delta_{12} - \int_3 G_{13}^{(0)-1} \mathbf{G}_{32} - \frac{1}{\hbar} \int_{345} V_{13,45}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{32} \mathbf{G}_{54} - \frac{1}{\hbar} \int_{345} V_{13,45}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{34} \mathbf{G}_{52} \\ + \frac{1}{\hbar} \int_{34567} V_{13,45}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{36} \frac{\delta \Sigma_{67}}{\delta G_{45}^{(0)-1}} \mathbf{G}_{72} = 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

zu bringen. Erinnern wir uns noch an die Definition der Selbstenergie (4.16) und die Darstellung der Delta-Funktion in (4.28), so erhalten wir nach Erweiterung mit $\int_2 \mathbf{G}_{28}^{-1}$

$$\Sigma_{12} = - \frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{\hbar} \int_{345678} V_{16,78}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{65} G_{37} G_{84} \frac{\delta \Sigma_{52}}{\delta G_{34}} . \quad (4.41)$$

Für den letzten Summanden verwendeten wir noch die Umformung (4.29). Die Gleichung (4.41) repräsentiert nun die Bestimmungsgleichung für die Selbstenergie und kann auch graphisch mit Hilfe der Elemente (4.21)–(4.23) und der Anklebevorschrift (4.24) als

$$1 \rightarrow \text{---} \circ \text{---} 2 = \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} 1 \text{---} \text{---} 5 \\ | \quad | \\ 3 \text{---} \text{---} 4 \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} 2 \end{array} \frac{\delta \Sigma_{52}}{\delta G_{34}} \quad (4.42)$$

dargestellt werden.

Zur Auswertung der Gleichung (4.41) bzw. (4.42) fehlt uns noch die explizite Kenntnis des darin vorkommenden vollen Propagators \mathbf{G} . Dieser kann aber wiederum aus der Selbstenergie nach der Dyson-Gleichung (4.17) bestimmt werden. Letztere lässt sich in der abgekürzten Schreibweise als

$$\mathbf{G}_{12} = G_{12}^{(0)} + \int_{34} \mathbf{G}_{13} \Sigma_{34} G_{42}^{(0)} \quad (4.43)$$

hinschreiben. Mit den graphischen Elementen (4.21)–(4.23) und Anklebevorschriften (4.25) lautet die dazugehörige diagrammatische Darstellung

$$1 \rightleftarrows 2 = 1 \leftarrow 2 + 1 \rightleftarrows \textcircled{\leftarrow} 2 \quad . \quad (4.44)$$

Diese Identität stellt nun zusammen mit der Bestimmungsgleichung für die Selbstenergie (4.42) ein selbstkonsistentes Gleichungs-System zur Erzeugung von Feynman-Diagrammen der Selbstenergie und des wechselwirkenden Propagators dar.

Dieses Gleichungs-System werten wir nun rekursiv Ordnung für Ordnung aus. Dazu bemerken wir zuerst, dass die Diagramme der Selbstenergie nach (4.42) mindestens eine Wechselwirkungsline besitzen. Daher hat der volle Propagator nach (4.44) einen einzigen wechselwirkungsfreien Beitrag, nämlich den freien Propagator. Das schreiben wir in der Form

$$1 \rightleftarrows 2 = 1 \leftarrow 2 + \dots \quad , \quad (4.45)$$

was der Gleichung (4.12) entspricht. Hier nutzen wir diesen Umstand weiterhin aus, um die Diagramme der Selbstenergie in der niedrigsten störungstheoretischen Ordnung zu erzeugen. Dazu bemerken wir noch, dass der letzte Term in (4.41) mindestens ab der zweiten Ordnung beiträgt und für das Resultat

$$1 \rightleftarrows \textcircled{\leftarrow} 2 = 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + \dots \quad (4.46)$$

noch keine Rolle spielt. Die beiden Beiträge der niedrigsten Ordnung in (4.46) werden als das direkte und das Austausch-Diagramm bezeichnet. Nach Einsetzen dieses Resultats in (4.44) erhalten wir zusammen mit (4.45) für den Propagator

$$1 \rightleftarrows 2 = 1 \leftarrow 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + \dots \quad . \quad (4.47)$$

Zur weiteren Auswertung der Selbstenergie nach (4.42) bemerken wir noch, dass die Ableitung nach einer einfachen Linie im letzten Term entsprechend der Amputationsregel (4.26) erfolgt mit dem Resultat

$$\frac{\delta 5 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2}{\delta 3 \leftarrow 4} = \begin{array}{c} 5 \\ \diagdown \\ \diagup \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \diagup \\ \diagdown \\ 4 \end{array} + \begin{array}{c} 5 \\ \diagdown \\ \diagup \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} 2 \\ \diagup \\ \diagdown \\ 4 \end{array} + \dots \quad . \quad (4.48)$$

An dieser Stelle ist noch zu bemerken, dass die beiden äußeren Enden der Selbstenergie-Diagramme durch die Linienamputation unberührt bleiben, weil es keine Linien, sondern nur Stummel sind. Die weitere Berechnung nach (4.42) ist unmittelbar ersichtlich und ergibt die Selbstenergie bis einschließlich der zweiter Ordnung zu

$$\begin{aligned} 1 \rightleftarrows \textcircled{\leftarrow} 2 &= 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 \\ &+ 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + 1 \leftarrow \textcircled{\leftarrow} 2 + \dots \quad . \quad (4.49) \end{aligned}$$

Für den vollen Propagator ergibt sich damit aus der Dyson-Gleichung (4.44) bis einschließlich der zweiten störungstheoretischen Ordnung

$$\begin{aligned}
 1 \rightleftarrows 2 &= 1 \leftarrow 2 + \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \\
 &+ \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} \\
 &+ \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \dots \quad (4.50)
 \end{aligned}$$

Interessant ist an dieser Stelle noch zu bemerken, dass die Selbstenergie (4.49) offensichtlich genau diejenigen Beiträge des Propagators (4.50) enthält, die Ein-Teilchen-irreduzibel sind. Das sind nämlich in der Tat nur diejenigen Diagramme, die nach einer beliebigen Amputation einer inneren gerichteten Linie immer noch zusammenhängend bleiben, und das sind in (4.50) alle bis auf die vier Diagramme der untersten Zeile. Aus diesem Grund wird die Selbstenergie in der Literatur manchmal auch als die Ein-Teilchen-irreduzible Zwei-Punkt-Funktion bezeichnet (z.B. in Ref. [50,99]). Dennoch kann man nicht sagen, dass die Selbstenergie aus einer Teilmenge der Propagator-Diagramme besteht, weil sich ihre diagrammatische Strukturen in einem Punkt stark unterscheiden. Die äußeren Enden der Selbstenergie-Diagramme werden durch Stummel repräsentiert, während es bei den Diagrammen des vollen Propagators ganze gerichtete Linien sind, die an den Stummel dranhängen. In unseren Diagrammen wurde dieser Umstand graphisch durch die etwas längeren äußeren Enden hervorgehoben.

Nach erfolgreicher Erzeugung der Diagramme der Selbstenergie und des Propagators sind wir nun auch in der Lage, die Graphen des wechselwirkenden Anteils des großkanonischen Potentials, die so genannten Vakuum-Diagramme, zu konstruieren. Wie sich in Kürze herausstellen wird, brauchen dafür die Diagramme aus (4.49) und (4.50) nur in einer geeigneter Weise verbunden zu werden. Diese Vorgehensweise stellt im gewissen Sinne eine Umkehrung der Darstellung in Ref. [100] dar. Darin wurden die Vakuum-Diagramme rekursiv aus einer selbstkonsistenten Gleichung erzeugt (siehe dazu auch Ref. [44]), und die Graphen der Selbstenergie entstanden daraus mit Hilfe der Linienamputation.

Als Ausgangspunkt der weiteren Ausführungen gilt uns hier die Feststellung

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{GK}}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = \frac{1}{\beta} \mathbf{G}_{21} \quad (4.51)$$

die nach Definition (4.11) direkt aus (4.36) folgt. Eine entsprechende Beziehung besteht auch zwischen den wechselwirkungsfreien Größen: $\delta \mathcal{F}_{GK}^{(0)}/\delta G_{12}^{(0)-1} = G_{21}^{(0)}/\beta$. Somit erhalten wir für den wechselwirkenden Anteil des großkanonischen Potentials $W^{(\text{int})}$ aus (4.11) die folgende Identität:

$$\frac{\delta W^{(\text{int})}}{\delta G_{12}^{(0)-1}} = -\mathbf{G}_{21} + G_{21}^{(0)} \quad (4.52)$$

Sie lässt sich noch umformen, indem wir die Ableitungsvorschrift (4.29) für die linke Seite und die Dyson-Gleichung (4.43) für die rechte Seite verwenden. Damit erhalten wir

$$\int_{34} G_{24}^{(0)} \frac{\delta W^{(\text{int})}}{\delta G_{34}^{(0)}} G_{31}^{(0)} = - \int_{34} \mathbf{G}_{24} \boldsymbol{\Sigma}_{43} G_{31}^{(0)} . \quad (4.53)$$

Erweitern wir diese Gleichung noch mit $\int_{12} G_{12}^{(0)-1}$, so ergibt sich nach der ersten Gleichung aus (4.28) das folgende Ergebnis:

$$\hat{L} W^{(\text{int})} = \int_{12} \mathbf{G}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{21} , \quad (4.54)$$

wobei wir uns noch an den Linienzähleroperator (4.30) erinnerten. Diese Gleichung lässt sich mit den Elementen (4.22) und (4.23) weiterhin graphisch als

$$\hat{L} W^{(\text{int})} = \text{Diagramm} \quad (4.55)$$

darstellen.

Mit der Gleichung (4.55) steht uns nun die Bestimmungsgleichung für den wechselwirkenden Anteil des großkanonische Potentials zur Verfügung, mit deren Hilfe wir die dazugehörigen Vakuum-Diagramme erhalten. Dazu verwenden wir die Ergebnisse für die Selbstenergie und die Paar-Korrelationsfunktion (4.49), (4.50) und beachten die Vorschriften (4.24) und (4.32). So ergibt sich bis zur zweiten Ordnung in der Wechselwirkung

$$\begin{aligned} W^{(\text{int})} = & \frac{1}{2} \text{Diagramm 1} + \frac{1}{2} \text{Diagramm 2} + \frac{1}{2} \text{Diagramm 3} + \text{Diagramm 4} \\ & + \frac{1}{2} \text{Diagramm 5} + \frac{1}{4} \text{Diagramm 6} + \frac{1}{4} \text{Diagramm 7} + \dots . \end{aligned} \quad (4.56)$$

Wie man aus den Resultaten (4.49), (4.50) erkennt, haben alle Diagramme der Selbstenergie und der Greens-Funktion Multiplizität eins. Bei den Vakuum-Diagrammen aus (4.56) ist dies allerdings nicht mehr der Fall. Die Multiplizitäten hier lassen sich jedoch mit Symmetrie-Eigenschaften der Diagramme erklären, wie in Ref. [44] erläutert wird.

Interessanterweise besitzen die hier präsentierten Diagramme eine verblüffende Ähnlichkeit mit denjenigen aus der Quantenelektrodynamik (QED) [100]. Jedoch wechseln die Vorzeichen der Diagramme dort je nach Anzahl der geschlossenen Teilchenschleifen, was auf das fermionische Charakter der beteiligten Elektronen zurückzuführen ist (siehe entsprechende Diagramme für die fermionische Vielteilchentheorie in [44]). Das ist auch kein Zufall, denn die zugrunde liegenden Theorien haben formal auch große Ähnlichkeiten. Lediglich die Interpretation einzelner Terme ist etwas verschieden. So werden in der QED alle Wechselwirkungen durch Photonen vermittelt, die man z.B. durch gewellte Linien darstellt. Auch in der hier diskutierten Vielteilchentheorie stehen die gewellten Linien für die Wechselwirkungen. Der prinzipielle Unterschied besteht nun darin, dass die Wechselwirkungen hier instantan per Fernwirkung ablaufen, was den nichtrelativistischen Charakter der Vielteilchen-Theorie verdeutlicht.

4.1.5 Molekularfeld-Näherung

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Folgen der Selbstenergie-Renormierung, die wir bereits im Unterabschnitt 4.1.2 angekündigt haben. Dabei verwenden wir zuerst die Hartree-Fock-Näherung für die Selbstenergie und berücksichtigen den Einfluss der Wechselwirkung im Mittel. Diese Vorgehensweise entspricht der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung, deren übliche Darstellung mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren z. B. in Ref. [65,101] zu finden ist. Die volle Wirkung im wechselwirkenden Problem (4.33) reduziert sich dadurch auf die so genannte effektive Wirkung, die nur quadratische Feldvariablen enthält. Die gesamte Theorie wird in dieser Näherung effektiv Gauss-artig.

Wir beginnen hier mit der Hartree-Fock-Näherung für die Selbstenergie. Sie basiert auf der selbst-konsistenten Gleichung (4.41) bzw. (4.42), die wir bei den ersten zwei Termen abbrechen, d.h. wir vernachlässigen den letzten Ableitungsterm, der von der höheren Wechselwirkungsordnung ist, und betrachten die Größe

$$\Sigma_{12}^{\text{HF}} \equiv \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} = -\frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{\hbar} \int_{34} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} . \quad (4.57)$$

Der erste direkte Term ist dabei der Hartree-Beitrag zur Selbstenergie und der zweite Austausch-Term ist der entsprechende Fock-Beitrag. Der Fehler, den wir durch die Beschränkung auf diese beide Terme in Kauf nehmen, ist mindestens von der zweiten Ordnung der Störungstheorie, wie man aus

$$\Sigma_{12} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} = \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \dots . \quad (4.58)$$

sieht. Die Diagramme der vollen Selbstenergie entnehmen wir dabei aus (4.49) und gewinnen diejenigen der Hartree-Fock-Näherung (4.57) durch Einsetzen der beiden niedrigsten Ordnungen von (4.50) anstelle des vollen Propagators. Vergleicht man (4.58) mit (4.49), so erkennt man weiterhin, dass bis zu dieser Ordnung nur die letzten beiden Diagramme der vollen Selbstenergie im Hartree-Fock genäherten Ausdruck fehlen. Dabei ist eine ganze Klasse von Diagrammen darin bereits absorbiert, wie am Beispiel der ersten sechs Diagramme aus (4.49) zu sehen ist.

Ähnlich wird auch das großkanonische Potential in dieser Näherung motiviert. Dazu setzt man die Selbstenergie (4.57) in (4.55) ein, verwendet den Operator \hat{L} aus (4.30) näherungsweise als den Zähleroperator der vollen Linien und vernachlässigt alle höheren Korrekturterme. Diese genäherte Größe ist

$$W^{\text{HF}} \equiv \frac{1}{2} \text{Diagram 5} + \frac{1}{2} \text{Diagram 6} = -\frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \mathbf{G}_{21} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} \mathbf{G}_{23} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{41} . \quad (4.59)$$

Auch hier heißt der erste Term das direkte oder Hartree-Vakuum-Diagramm und der zweite das Austausch- oder Fock-Vakuum-Diagramm. Der Fehler dieser Näherung ist ebenfalls von mindestens zweiter störungstheoretischer Ordnung. Allerdings repräsentieren die beiden Terme nicht die niedrigste Ordnung des großkanonischen Potentials, sondern erst die führenden Korrekturen zum $\mathcal{F}_{GK}^{(0)}$ -Term. Daher kann man hier auch nicht von einer Absorption bestimmter Diagrammen-Klassen in Hartree- und Fock-Termen sprechen, wie es bei den Selbstenergie-Diagrammen noch der Fall war.

Nun wollen wir sehen, welche Konsequenzen die Hartree-Fock-Näherung auf die Theorie hat. Dazu erweitern wir die Wirkung (4.33) mit der Hartree-Fock-Selbstenergie (4.57) additiv und erhalten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar &= \int_{12} \left[G_{12}^{(0)-1} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} \right] \psi_1^* \psi_2 + \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \psi_1^* \psi_2 \psi_3^* \psi_4 \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2 - \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2 . \end{aligned} \quad (4.60)$$

Die zu $V_{12,34}^{(\text{int})}$ gehörenden Paar- und Vierer-Felder ersetzen wir nun durch ihre Mittelwerte. Für die ersten der beiden ergeben sich dabei nach (4.36) die vollen Propagatoren $\langle \psi_1^* \psi_2 \rangle = \mathbf{G}_{21}$. Für die Vierer-Feld-Mittelwerte erinnern wir uns noch an die Beziehung (4.39) und stellen näherungsweise die Beziehung $\langle \psi_1^* \psi_2 \psi_3^* \psi_4 \rangle \approx \mathbf{G}_{21} \mathbf{G}_{43} + \mathbf{G}_{23} \mathbf{G}_{41}$ fest, für die wir den letzten Ableitungsterm höherer Wechselwirkungsordnung in (4.39) vernachlässigten. In dieser Mittelwert-Näherung, auch Molekularfeld-Näherung genannt, ergibt sich nun die Wirkung (4.60) zu

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi]/\hbar \approx \int_{12} \left[G_{12}^{(0)-1} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} \right] \psi_1^* \psi_2 - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21} - \frac{1}{2\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{41} \mathbf{G}_{23} . \quad (4.61)$$

Die beiden letzten Terme stellen gerade das großkanonische Potential in der Hartree-Fock-Näherung (4.59) dar. Der Ausdruck in den eckigen Klammern repräsentiert dabei entsprechend der Beziehung (4.16) den vollen Integralkern der Hartree-Fock-genäherten Theorie

$$\mathbf{G}_{12}^{\text{HF}-1} \equiv G_{12}^{(0)-1} - \Sigma_{12}^{\text{HF}} . \quad (4.62)$$

Damit lässt sich (4.61) auch als

$$\mathcal{A}[\psi, \psi]/\hbar \approx \mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi, \psi]/\hbar + W^{\text{HF}} \quad (4.63)$$

mit der Hartree-Fock-Wirkung

$$\mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi, \psi]/\hbar \equiv \int_{12} \mathbf{G}_{12}^{\text{HF}-1} \psi_1^* \psi_2 \quad (4.64)$$

schreiben. Diese effektive Wirkung der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung besitzt nun die angenehme Eigenschaft, quadratisch in den Feldvariablen zu sein, und führt somit zu einer effektiv wechselwirkungsfreien Gausschen Theorie. Lediglich das Energiespektrum oder solche Parameter der Theorie wie das chemische Potential ändern sich dabei unter dem Einfluss der Selbstenergie.

Die Näherung (4.63) kann alternativ auch mit Hilfe der so genannten Hubbard-Stratonovich-Transformation [102,103] in der niedrigsten Sattelpunkts-Näherung erhalten werden, wie es z.B. in Ref. [104] oder im Textbuch [48] geschildert wurde. In der letzteren Darstellung wurde allerdings noch darauf hingewiesen, dass die Hartree- und Fock-Anteile im Prinzip in beliebigen Proportionen auftreten dürfen. Ferner gibt es noch einen dritten Kandidaten, das Viererfeld in Feldpaar-Mittelwerte zu zerlegen. Dabei treten Paar-Erzeugungen bzw. -Vernichtungen in den so genannten anomalen oder Quasi-Mittelwerten $\langle \psi_i^* \psi_j^* \rangle$ bzw. $\langle \psi_i \psi_j \rangle$ auf. Sie sind Konsequenzen der Bogoliubovschen Feldzerlegungen $\psi = \langle \psi \rangle + \delta\psi$ in den dominierenden Hintergrundanteil $\langle \psi \rangle$ und

den kleinen Fluktuationsanteil $\delta\psi$ [70]. Die auf dieser Zerlegung basierende Molekularfeld-Näherung liefert für schwache Wechselwirkungen insbesondere bei einer verschwindenden Temperatur akkurate Mittelwerte thermodynamischer Größen. Für höhere Temperaturen kann der Fluktuationsanteil nicht mehr als klein behandelt werden und so muss die Bogoliubov-Näherung erweitert werden. So ergibt sie beispielsweise in Verbindung mit der Hartree-Fock-Näherung die so genannte Hartree-Fock-Bogoliubov-Approximation, die aber bekanntermaßen im thermodynamischen Limes kein lückenloses Spektrum besitzt [105]. Damit kollidiert sie mit der allgemeingültigen Forderung des Hugenholz-Pines Theorems [106]. Speziell bei nicht zu niedrigen Temperaturen um den kritischen Punkt sind jedoch die Hintergrund-Anteile $\langle\psi\rangle$ bzw. $\langle\psi^*\rangle$ und somit auch die zusätzlichen Bogoliubov-Terme zu vernachlässigen.

Wie gehen wir in unseren späteren Berechnungen konkret vor und welche Rolle spielt dabei die Selbstenergie-Resummation? Die exakte großkanonische Zustandssumme Z_{GK} oder das Potential \mathcal{F}_{GK} , von denen wir in der obigen Diskussion ausgegangen sind, liegen uns dabei natürlich nicht vor. Stattdessen müssen wir auf ihre störungstheoretischen Ausdrücke zurückgreifen. In der führenden störungstheoretischen Ordnung erhalten wir aus (4.11) mit dem direkten und dem Austausch-Term des großkanonischen Potentials aus (4.56) den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{GK} &= \mathcal{F}_{GK}^{(0)} + \mathcal{F}_{GK}^{(D)} + \mathcal{F}_{GK}^{(A)} + \dots \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln Z_{GK}^{(0)} + \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} G_{43}^{(0)} G_{21}^{(0)} + \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} G_{41}^{(0)} G_{23}^{(0)} + \dots \quad (4.65)\end{aligned}$$

Um zu sehen, wie der erste Logarithmus-Term durch die Selbstenergie-Resummation beeinflusst wird, formen wir die freie Zustandssumme identisch um und erhalten mit dem Hartree-Fock-Integrkern (4.62) und der effektiv freien Wirkung (4.64)

$$Z_{GK}^{(0)} = \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi^*,\psi]/\hbar} \exp\left\{-\int_{12} \Sigma_{12}^{\text{HF}} \psi_1^* \psi_2\right\}. \quad (4.66)$$

Nach Taylor-Entwicklung der Exponential-Funktion ergibt sich daraus mit der expliziten Form der Selbstenergie (4.57)

$$Z_{GK}^{(0)} \approx \oint \mathcal{D}\psi^* \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{A}^{\text{HF}}[\psi^*,\psi]/\hbar} \left\{1 + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2 + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \psi_1^* \psi_2\right\}, \quad (4.67)$$

was wir auch als

$$Z_{GK}^{(0)} \approx Z_{GK}^{(0)\text{HF}} \left\{1 + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21}^{\text{HF}} + \frac{1}{\hbar} \int_{1234} V_{14,32}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21}^{\text{HF}}\right\} \quad (4.68)$$

schreiben können. Mit $Z_{GK}^{\text{HF}(0)}$ meinen wir dabei das mit Hilfe der Hartree-Fock-Wirkung gewichtete Funktionalintegral, welches im ersten Summanden in (4.67) vorkommt. Der Ausdruck $\mathbf{G}_{21}^{\text{HF}}$ stellt den dazu entsprechenden Feldpaar-Mittelwert dar, den effektiv freien Propagator in Hartree-Fock-Näherung. Setzt man nun das Resultat (4.68) in (4.65) ein, so erhält man das bis zur ersten Ordnung gültige großkanonische Potential

$$\mathcal{F}_{GK} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{GK}^{\text{HF}(0)} - \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{43} \mathbf{G}_{21} - \frac{1}{2\hbar\beta} \int_{1234} V_{12,34}^{(\text{int})} \mathbf{G}_{41} \mathbf{G}_{23} + \dots \quad (4.69)$$

Dabei ersetzen wir noch alle freien und effektiv freien Hartree-Fock-Propagatoren durch die vollen Propagatoren nach den Näherungsvorschriften $G_{21}^{(0)} = \mathbf{G}_{21} + \dots$ bzw. $\mathbf{G}_{21}^{\text{HF}} = \mathbf{G}_{21} + \dots$, was bis zur ersten Ordnung der Störungstheorie legitim war. Das Ergebnis (4.69) entspricht nun genau demjenigen, welches wir aus der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung mit der Wirkung (4.63) erhalten würden. Interessant zu bemerken ist dabei noch, dass die beiden $V^{(\text{int})}$ -Terme in (4.69) denjenigen aus dem ursprünglichen Potential (4.65) entsprechen, aber mit dem umgekehrten Vorzeichen vorkommen. Die Ersetzung der freien Parameter der Theorie durch die renormierten Größen liefert aber diesen Vorzeichenwechsel automatisch mit.

4.2 Modell der Wechselwirkung

Das Hauptaugenmerk der Untersuchungen dieses Kapitels gilt dem Einfluss einer schwachen Wechselwirkungen auf das Bose-Gas. Doch welche Wechselwirkungen meinen wir und wie sehen diese aus? Genau dieser Fragestellung widmen wir uns in der anschließenden Diskussion dieses Abschnitts.

4.2.1 Kontakt-Wechselwirkung

Die wichtigste Wechselwirkung zwischen den einzelnen Atomen bzw. Molekülen in einem stark verdünnten neutralen Bose-Gas ist die so genannte Kontakt-Wechselwirkung. Dabei handelt es sich um eine effektive Beschreibung der mikroskopischen Prozesse, die uns aus der Welt makroskopischer Stoßteilnehmer vertraut ist. Man denke dabei z.B. nur an die aneinander stoßenden Billardkugeln. Doch die Welt der mikroskopischen Gasteilchen wird von den Coulomb-Kräften regiert. Obwohl die einzelnen Atome oder Moleküle insgesamt neutral sind, bestehen sie aus den geladenen Kernen und den Elektronen, welche inhomogen im Raum verteilt sind und sich z.B. in den Van-der-Waals-Kräften zeigen. Das Wechselwirkungspotential ist im allgemeinen kompliziert, z.B. Lennard-Jones-artig, kann jedoch für verdünnte Gase im Tieftemperaturbereich stark vereinfacht werden. So erstreckt sich ein Atom bei Temperaturen unterhalb des kritischen Wertes effektiv über die thermische de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda \equiv \left(\frac{2\pi\hbar^2\beta}{M} \right)^{1/2} \quad (4.70)$$

aus (2.93) von typischerweise $\lambda > 1000 \sim 10000 a_B$, wobei a_B den Bohrschen Radius darstellt. Die effektive Reichweite der Wechselwirkung liegt demgegenüber in den meisten Experimenten in etwa bei $a_{ww} \sim 100 a_B$. Bei diesen Größenordnungen werden die Details des Wechselwirkungspotentials ausgeschmiert, so dass die Wechselwirkung mit einer ausreichenden Genauigkeit allein durch ihre Reichweite zu charakterisieren ist [107,108]. Weiterhin ersetzen wir daher die kurzreichweitige Wechselwirkung zwischen zwei Atomen durch die effektive Kontakt-Wechselwirkung zweier Kugeln des Radius a_s .

Das Problem der Streuung harter Kugeln ist aus rechnerischer Sicht nicht unproblematisch, weil dadurch das Volumen, das einem Teilchen zur Verfügung steht, explizit einzuschränken ist.

Doch für dieses Problem kann mit Hilfe der Pseudopotential-Methode von Fermi Abhilfe geschaffen werden [85,109,110]. Damit kann ein Hartkugel-Potential näherungsweise durch eine Reihe lokaler Pseudopotentiale ersetzt werden. Die Idee dahinter führen wir des Weiteren explizit vor und formulieren dafür zuerst das Streuproblem zweier identischer Atome im Schwerpunkts-Koordinatensystem:

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^*} \psi(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M^*} \Delta_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) , & |\mathbf{x}| > a_s \\ \infty & , |\mathbf{x}| \leq a_s . \end{cases} \quad (4.71)$$

Der Ausdruck M^* steht hier für die reduzierte Masse $M^* \equiv M \times M / (M + M) = M/2$ der Relativbewegung der Teilchen, \mathbf{k} für den Relativ-Impuls und \mathbf{x} für die Relativ-Koordinate. Die Eigenfunktion ψ repräsentiert dabei die Zwei-Teilchen-Wellenfunktion nach Abseparation des Schwerpunkts-Anteils. Damit erhalten wir sofort

$$\psi(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{für} \quad |\mathbf{x}| \leq a_s . \quad (4.72)$$

Im Gebiet $|\mathbf{x}| > a_s$ schreiben wir das Problem in Kugelkoordinaten $\mathbf{x} = \mathbf{x}(r, \theta, \phi)$ mit Hilfe des Drehimpuls-Operators $\hat{\mathbf{L}}$ als

$$\left[\mathbf{k}^2 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2(\theta, \phi)}{\hbar^2 r^2} \right] \psi(r, \theta, \phi) = 0 . \quad (4.73)$$

Weiterhin separieren wir die Radial- und Winkel-Komponenten nach $\psi(r, \theta, \phi) = R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ ab. Die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} genügen dabei der Eigenwertgleichung $\hat{\mathbf{L}}^2(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi)$, wobei l für die Drehimpuls-Quantenzahl steht. Die Gleichung (4.73) reduziert sich dabei zu

$$\left[k^2 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{lm}(r) = 0 . \quad (4.74)$$

Für die so genannte s -Wellen-Streuung mit $l = 0$ (und $m = 0$) lässt sich das Problem durch die Wellenfunktion

$$\psi_s(\mathbf{x}) = \frac{c}{r} \sin k(a_s - r) \quad (4.75)$$

mit einer noch unbestimmten Konstante c lösen. Hierfür haben wir noch die Identität $Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi} = \text{const}$ ausgenutzt und berücksichtigt, dass aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion die Anschluss-Bedingung $\psi_s(r = a_s) = 0$ an die Lösung (4.72) gilt.

Nun kommen wir zur Pseudopotential-Beschreibung, indem wir die Wellenfunktion (4.75) auf das gesamte Raumvolumen fortsetzen. Dafür definieren wir eine neue Wellenfunktion

$$\tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = \frac{c}{r} \sin k(a_s - r) \quad \text{für alle} \quad \mathbf{x} \quad (4.76)$$

und suchen nach der Schrödinger Gleichung, der sie genügt. Nun stellen wir als erstes durch direkte Ableitung fest, dass die Beziehung

$$(\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{für alle} \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad (4.77)$$

gilt. Um zu erfahren, ob diese Gleichung auf den Ursprung $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ auszuweiten ist oder ob an diesem Punkt eine Singularität vorliegt, integrieren wir die linke Seite der obigen Gleichung über den gesamten Raum. Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes erhalten wir schließlich

$$\int d^3x (\Delta_{\mathbf{x}} + k^2) \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = -4\pi c \sin ka_s \quad (4.78)$$

und erkennen, dass es am Ursprung eine δ -förmige Singularität geben muss. Statt (4.77) lässt sich für die fortgesetzte Wellenfunktion (4.76) die zu (4.71) entsprechende Form

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^*} \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2M^*} \Delta_{\mathbf{x}} \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) - \frac{4\pi\hbar^2 \sin ka_s}{2M^*} c \delta(\mathbf{x}) \quad (4.79)$$

feststellen. Die darin vorkommende Konstante c muss allerdings noch bestimmt werden. Dazu bemerken wir die aus (4.76) unmittelbar herleitbare Identität

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} [r \tilde{\psi}_s(\mathbf{x})] \right|_{r=0} = -ck \cos ka_s \quad (4.80)$$

und bestimmen daraus die gesuchte Konstante. Die Gleichung (4.79) lässt sich somit weiterhin effektiv in Form einer Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^*} \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M^*} \Delta_{\mathbf{x}} + V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) \right] \tilde{\psi}_s(\mathbf{x}) \quad (4.81)$$

mit dem so genannten Pseudopotential

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi\hbar^2}{2M^*} \frac{\tan ka_s}{k} \delta(\mathbf{x}) \left. \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \right|_{r=0} \quad (4.82)$$

schreiben.

Dieses Pseudopotential kann noch etwas vereinfacht werden. So ergibt sich mit der reduzierten Masse $M^* = M/2$ für die niedrigenergetische Streuung mit $ka_s \ll 1$ die impulsunabhängige Näherung

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M} \delta(\mathbf{x}) \left. \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \right|_{r=0} . \quad (4.83)$$

Sie ist besonders dann gut erfüllt, wenn man sich für die Untersuchungen im Temperaturbereich unterhalb des kritischen Wertes interessiert. Denn mit Hilfe der thermischen de Broglie-Wellenlänge (4.70) lässt sich die Abschätzung $ka_s \sim \sqrt{4\pi} a_s / \lambda$ herleiten. Das ist mit den am Anfang dieses Unterabschnitts erwähnten Werten in der Tat eine kleine Zahl im Bereich $ka_s \sim 0.1$ oder kleiner. Auch der Pseudopotential-Operator $\left. \frac{\partial}{\partial r} (r \bullet) \right|_{r=0}$ lässt sich in den meisten interessanten Fällen weglassen. Auf reguläre Wellenfunktionen wirkt er entsprechend $\left. \frac{\partial}{\partial r} [r \tilde{\psi}(\mathbf{x})] \right|_{r=0} = \tilde{\psi}(\mathbf{0})$ [85], wie die Diracsche δ -Funktion in (4.83) auch schon. Damit reduziert sich das Pseudopotential für die s -Wellen-Streuung zu

$$V_{\delta}^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{M} \delta(\mathbf{x}) . \quad (4.84)$$

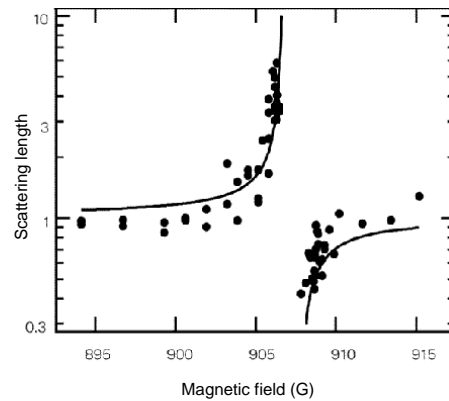


Abbildung 4.1: Streuwellenlängen a_s (in geeigneter Skalierung) im ^{23}Na -Experiment [25] in Abhängigkeit des äußeren magnetischen Feldes. Punkte stellen Messergebnisse und die durchgezogenen Kurven theoretische Erwartungen dar. Bild aus [25].

Interessanterweise spielt also bei einem niederenergetischen Streuprozess zweier Teilchen der effektive Hartkugel-Radius a_s die Rolle der Wechselwirkungs-Stärke. Sie wird in der Literatur auch als die s -Wellen-Streulänge bezeichnet.

In der gerade beschriebenen Situation handelte es sich um die elastische Streuung der beiden Stoßteilnehmer. Doch diese beiden sind keine strukturlose Gebilde wie etwa die modellhaften harten Billardkugeln. Zwischen den streuenden Atomen können nämlich inelastische Prozesse ablaufen, die z.B. zur Bildung eines metastabilen Molekül-ähnlichen Zustandes führen. Solche Prozesse sind von der Streuung zweier Nukleonen bekannt und werden durch so genannte Feshbach-Resonanzen [111,112] erklärt. Sie ergeben sich immer dann, wenn die Streuenergien in der Nähe eines Bindungsniveaus eines kurzlebigen Zwei-Teilchen-Zustandes liegen. Dann wird die Streuung auch besonders effizient und der Streuquerschnitt bzw. die Streulänge a_s steigt über mehrere Größenordnungen an. Die ursprünglich abstoßende Wechselwirkung ($a_s > 0$) kann dabei weiterhin zu einer effektiven Anziehung ($a_s < 0$) wechseln und umgekehrt. Jahrzehnte nach den erfolgreichen Erklärungen nuklearer Prozesse durch die Feshbach-Resonanz wurden analoge Betrachtungen in Ref. [113,114] auf die Vielteilchen-Theorie ausgeweitet. Hier ergab sich sogar eine Möglichkeit, das Energieniveau des Resonanz-Zustandes von aussen zu justieren. Dazu stelle man sich ein tiefgekühltes verdünntes Gas aus spinpolarisierten Atomen vor, für die es in dem entsprechenden Hyperfein-Zustand keine Bindung gibt. Eine solche existiert in einem anderen Hyperfein-Zustand, der durch die Austausch-Wechselwirkung erreicht werden kann. Da es sich um verschiedene Hyperfein-Zustände handelt, können sie mittels des Zeemann-Effekts mit dem äußeren magnetischen Feld gegeneinander energetisch verschoben werden. Bei bestimmten Feldstärken liegen die Niveaus der Bindungszustände bei den niederenergetischen Streuzuständen des spinpolarisierten Hyperfein-Kanals, so dass die Austausch-Wechselwirkung resonant verstärkt wird. Diese Voraussagen wurden 1998 in der Gruppe von Ketterle experimentell bestätigt [25]. Ihre Ergebnisse sind in Abb. 4.1 für positive Werte der Streulängen in ^{23}Na dargestellt. Es zeigt sich also eindeutig, dass die s -Wellen-Streulänge in (4.84) ein effektiver Parameter ist, der experimentell in seiner Größe und sogar Vorzeichen justierbar ist.

Die vorhergehende Diskussion beschränkte sich auf die s -Wellen-Streuung mit der Drehimpulsquantenzahl $l = 0$. Aber wie steht es nun mit den Streuungen in p - ($l = 1$), d - ($l = 2$) und noch höheren Streukanälen? Dazu betrachte man die radiale Schrödinger-Gleichung (4.74) und stelle fest, dass der Drehimpuls-Term darin wie eine Zentrifugalbarriere wirkt, welche die Teilchen daran hindert, den zum Kontakt benötigten Abstandsradius $r = a_s$ zu erreichen. Eine einfache Abschätzung zeigt, dass die zum Überwinden dieser Barriere notwendige Wellenzahl k der Bedingung $ka_s \sim l(l+1)$ genügen muss. Doch wie wir oben bereits bemerkten, ist es für die niederenergetischen Streuungen im Tieftemperaturbereich selbst für $l = 1$ bei Weitem verfehlt. Weiterhin ist für die spinpolarisierten Gase der $l = 1$ -Kanal verboten und $l = 2$ ist die kleinstmögliche nichtverschwindende Drehimpulsquantenzahl. Sie erhöht die Höhe der Zentrifugalbarriere gegenüber dem $l = 1$ -Fall nochmals um einen Faktor 3. Das interessante daran ist jedoch ihre räumliche Anisotropie, die sonst für die dipolare Wechselwirkung charakteristisch ist. Daher wurde sie in der Literatur etwas genauer unter die Lupe genommen (siehe z.B. [115,116]). Natürlich können auch dabei inelastische Streueffekte ähnlich den Feshbach-Resonanzen auftreten, welche die d -Wellen-Streuungen verstärken würden. In der Nähe solcher Resonanzen wurde das Problem in den kürzlich erschienenen Arbeiten [117,118] untersucht. Darin fanden die Autoren zusätzlich zu dem Dipol-artigen Potential einen im Impulsraum nichtlokalen Beitrag, das so genannte Derevianko-Potential. Dieses soll das gewöhnliche dipolare Streu-Potential sogar effektiv um ein Vielfaches übertreffen. Zurzeit gibt es in keinen experimentellen Realisierungen ernsthafte Anzeichen für die d -Wellen-Resonanzen, und solange das so bleibt, ist davon auszugehen, dass Streuungen in den $l = 2$ - und höheren Kanälen im niederenergetischen Bereich stark unterdrückt sind. Deshalb wird uns die s -Wellen-Streuung (4.84) als das Modell der Kontakt-Wechselwirkung schon ausreichen.

4.2.2 Dipolare Wechselwirkung

In einer niederenergetischen Streuung konnte, wie oben bemerkt, die anisotrope dipolare Wechselwirkung noch nicht nachgewiesen werden. Dennoch gibt es noch andere Quellen für derartige Wechselwirkungen. Die wohl naheliegendste Möglichkeit ist bei dipolaren Gasteilchen gegeben, welche im elektromagnetischen Feld dipolare Wechselwirkungen per Fernwirkung erfahren. Man bedenke dabei nur, dass die Alkali-Metalle bereits ein schwaches magnetisches Dipolmoment von $|\mathbf{m}| = 1 m_B$ aufweisen, wobei m_B das Bohrsche Magneton ist. Kürzlich wurde in der Gruppe um Tilman Pfau ein Gas von Chromatomen ^{52}Cr zur Bose-Einstein-Kondensation gebracht [16]. Diese Atome besitzen sechs ungepaarte Valenz-Elektronen und haben daher im Vergleich zu den üblichen Alkali-Metallen das sechsfache magnetische Dipolmoment von $|\mathbf{m}| = 6 m_B$. Eine ganze Klasse von Elementen mit großen Dipolmomenten stellen die seltenen Erden dar, sowie Molybden (Mo) und Mangan (Mn). Ihre Dipolmomente liegen im Bereich von $|\mathbf{m}| = 4 \sim 10 m_B$. Zurzeit können diese Elemente bis zum mK-Bereich vorgekühlt werden [119,120], ihre Kondensations-Temperatur ist aber damit noch nicht erreicht. Andere Systeme mit relativ starken Dipol-Dipol-Wechselwirkungen sind z.B. Rydberg-Atome [121,122]. Aber auch Atome mit induzierten elektrischen Dipolmomenten von etwa 10^{-2} Debye können von Interesse sein [123]. Noch stärkere elektrische Dipolmomente sind in heteronuklearen Molekülen möglich. Ihre Dipolmomente können im Bereich von etwa 1 De-

bye liegen und somit Effekte ergeben, die mehrere Hundert Mal stärker sind als z.B. beim Chrom. Solche Moleküle können in einen ultrakalten (aber noch nicht kondensierten) Zustand durch raffinierte Kühlmethode gebracht [124–126] oder durch die Photoassoziation im metastabilen Zustand erzeugt werden [127–129].

Die spezifische Dipol-Dipol-Wechselwirkung für alle oben beschriebene Systeme lautet

$$V_{DD}^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{3 [\mathbf{m} \mathbf{x}]^2}{|\mathbf{x}|^5} - \frac{\mathbf{m}^2}{|\mathbf{x}|^3} \right\} + \frac{\mu_0 \mathbf{m}^2}{3} \delta(\mathbf{x}) . \quad (4.85)$$

Im Falle der magnetischen dipolaren Wechselwirkung bedeutet \mathbf{m} das magnetische Dipolmoment und μ_0 die magnetische Permeabilitäts-Konstante. Für elektrische Dipol-Dipol-Wechselwirkungen bedeuten sie entsprechend das elektrische Dipolmoment und die reziproke elektrische Vakuum-Suszeptibilität $1/\varepsilon_0$. Interessanterweise taucht bei dieser Wechselwirkung noch ein δ -Term auf. Abgesehen von der Form, hat er mit der Kontakt-Wechselwirkung nichts (4.84) zu tun, sondern regularisiert lediglich die Divergenz des ersten Potentialterms am Ursprung. Häufig wird er in der Literatur übersehen, ist aber in akkurateren Darstellungen, wie z.B. im Lehrbuch von Jackson zur klassischen Elektrodynamik [130], mitberücksichtigt. Der Ursprung dieses Term liegt in der Impuls-Darstellung der Wechselwirkung (4.85)

$$V_{DD}^{(\text{int})}(\mathbf{q}) = \mu_0 \sum_{i,j=1}^3 m_i m_j \frac{q_i q_j}{q^2} , \quad (4.86)$$

welche man unmittelbar aus der Multipol-Entwicklung des Coulomb-Potentials im Impulsraum gewinnt. Ihre Fourier-Rücktransformierte lautet

$$V_{DD}^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i,j=1}^3 m_i m_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\mathbf{x}|} . \quad (4.87)$$

Die zweifache Ortsableitung müssen wir nun mit besonderer Vorsicht ausführen und erhalten mit Hilfe des Gaussischen Integralsatzes die Identität [131]

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\mathbf{x}|} = \frac{3x_i x_j - \delta_{ij} \mathbf{x}^2}{|\mathbf{x}|^5} - \frac{4\pi}{3} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x}) . \quad (4.88)$$

Die Formel (4.85) entsteht nun durch Einsetzen von (4.88) in (4.87). In Ref. [132] gingen die Autoren den umgekehrten Weg und berechneten ausgehend von dem Dipolpotential (4.85) ohne den regularisierenden δ -Beitrag die entsprechende Fourier-Transformierte. Dabei ergab sich zuerst eine UV-Divergenz, welche mit dem künstlich eingeführten Cutoff beliebiger Größe am Koordinatenursprung beseitigt werden konnte. Diese Regularisierungs-Vorschrift führte nun ebenfalls zu dem richtigen Ergebnis (4.86).

Nach diesen Vorbemerkungen betrachten wir nun das gesamte Wechselwirkungs-Potential als die Summe der beiden Wechselwirkungen (4.84) und (4.85). Wir schreiben sie zusammenfassend als

$$V^{(\text{int})}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi \hbar^2 a}{M} \delta(\mathbf{x}) + \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{3 [\mathbf{m} \mathbf{x}]^2}{|\mathbf{x}|^5} - \frac{\mathbf{m}^2}{|\mathbf{x}|^3} \right\} , \quad (4.89)$$

wobei wir hier noch die effektive δ -Potential-Stärke

$$a \equiv a_s + \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2} \quad (4.90)$$

verwenden. An dieser Stelle müssen wir noch bemerken, dass diese naive Addition der beiden Wechselwirkungen keineswegs als a-priori gegeben zu betrachten ist. Die vorhandenen dipolaren Wechselwirkungen können nämlich Übergänge zwischen den verschiedenen atomaren Hyperfein-Niveaus hervorrufen und somit ähnlich den bereits erwähnten Austausch-Prozessen die s -Wellen-Streuungen resonant beeinflussen. In diesem Fall würde die gesamte Wechselwirkung sehr stark von den Details des dipolaren Anteils abhängen und sich somit nicht als die Summe unabhängiger Terme verstehen lassen. Diese Fragestellung wurde in den kürzlich erschienenen Publikationen [133,134] untersucht mit dem Ergebnis, dass die erste dipol-induzierte Resonanz auftritt, wenn die relative Stärke der Dipol-wechselwirkung

$$\epsilon_{DD} \equiv \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 a} \quad (4.91)$$

den Wert $\epsilon_{DD} \approx 2.8$ erreicht. Zum Vergleich beträgt ihre Stärke im ^{52}Cr -Experiment [16] gerade mal $\epsilon_{DD} \approx 0.144$. Damit ist gesichert, dass zumindest dort keine dipol-induzierten Feshbach-Resonanzen zu verzeichnen sind und die Näherung (4.89) ohne Einschränkung gilt.

4.3 Kritische Temperatur in dipolaren Bose-Gasen

Die meisten statistischen und dynamischen Eigenschaften der idealen Bose-Gase sind sehr gut bekannt und lassen nur wenige Fragestellungen offen. Doch Wechselwirkungen bringen neue interessante Aspekte ins Spiel, insbesondere seitdem es so wirkungsvolle Methoden der Steuerung ihrer Stärke gibt wie die Feshbach-Resonanzen. Dennoch beschränkt sich ein Großteil der Untersuchungen in wechselwirkenden bosonischen Systemen auf ihre dynamische Eigenschaften. Dazu gehören sicherlich Untersuchungen ihrer suprafluiden Eigenschaften [135,136] und der Eigenmoden ihrer Schwingungen [65,137,138]. Weitere interessante dynamische Effekte wurden mit Erzeugung des dipolaren Bose-Einstein-Kondensates an ^{52}Cr -Atomen möglich [16]. Charakteristische anisotrope Deformationen wurden experimentell beobachtet [139] und neuartige Maxon-Roton-Anregungen vorhergesagt [140]. Aber auch die grundlegenden Fragen nach der dynamischen Stabilität in Anwesenheit der Dipol-Wechselwirkung wurden zum Objekt der Diskussion [121,131,141,142]. Dennoch werden in den theoretischen Untersuchungen dieser Eigenschaften alle thermodynamischen Effekte vernachlässigt, welche die Dynamik selbst bei niedrigen Temperaturen im Bose-Einstein-kondensierten Bereich dämpfen können.

Eine Reihe von Arbeiten beschäftigt sich auch mit dem Einfluss schwacher Wechselwirkungen auf die thermodynamischen Eigenschaften der Bose-Gase, siehe z. B. [65,143–147]. Als besonders interessant erweist sich dabei die Frage nach der Fluktuation der Teilchenzahl. Aber auch die Frage nach den wechselwirkungs-bedingten Abweichungen der kritischen Temperatur ist von grundsätzlichem Interesse. Es ist eine bekannte Tatsache, dass eine schwache Teilchen-Abstoßung

in homogenen Systemen die Kondensation begünstigt, weil sich Teilchen im gleichen Zustand schwächer abstoßen, als wenn sie sich in verschiedenen Zuständen befinden. In homogenen Systemen sind abstoßende Wechselwirkungen im diesem Sinne attraktiv im Impulsraum [85,148]. Damit vergrößert sich mit stärkeren Abstoßungen auch die kritische Temperatur [149–151]. Quantitative Berechnung dieser Temperatur-Verschiebung ist allerdings nicht trivial, weil in einem homogenen System alle störungstheoretischen Ausdrücke an Infrarot-Divergenzen leiden. Im Rahmen der Variations-Störungs-Theorie [50,152] lassen sie sich jedoch resumieren und ergeben endliche Korrekturen der kritischen Temperatur, so zumindest für genügend schwache Abstoßungen. Doch mit weiter steigenden Wechselwirkungs-Stärken kommt ein Konkurrenz-Prozess zum Tragen, nämlich die so genannte Bogoliubov-Entleerung des Grundzustandes durch die Quanten-Fluktuationen. Sie reduzieren den Anteil der Teilchen im Grundzustand und somit auch die kritische Temperatur. Ab einer bestimmten Wechselwirkungs-Stärke gewinnt dieser Prozess die Oberhand und es kommt zum in Ref. [153,154] vorhergesagten Wiedereintritt-Effekt. Dabei kondensiert das Bose-Gas bei einer festen Temperatur etwas oberhalb des kritischen wechselwirkungsfreien Wertes, wenn die Wechselwirkungs-Stärke einen bestimmten unteren kritischen Wert überschreitet. Bei einer weiteren Erhöhung dieser Stärke über den oberen kritischen Wert verliert das System seine Fähigkeit zu Kondensieren wieder.

Etwas einfacher stellt sich die Situation im experimentell relevanten Fall des harmonischen Hintergrund-Potentials dar. Hier lässt sich die kritische Temperatur störungstheoretisch berechnen, weil die für homogene Systeme typischen Infrarot-Divergenzen hier durch die Anwesenheit der Falle eliminiert werden. Die Kondensation in einer Falle wird durch einen stark lokalisierten Kondensatpeak in der Fallmitte begleitet. Der Argumentation in Ref. [65] zufolge sind hier Wechselwirkungen zwischen den Kondensat-Teilchen aufgrund einer höheren Dichte häufiger, als zwischen den Teilchen in der wesentlich dünneren thermischen Wolke. Daher schmelzen hier Energie-Unterschiede zwischen dem Grundzustand und den thermisch angeregten Zuständen eher zusammen, und die Anregungen aus dem Kondensat werden begünstigt. Dies äußert sich in einer Reduktion der kritischen Temperatur gegenüber dem idealen Fall, die bereits in der niedrigsten störungstheoretischen Ordnung gefunden werden konnte [143,155]. Dieses Resultat wurde kürzlich auch experimentell bestätigt [156]. Eine weiterführende quantitative Diskussion betreffend der kritischen Temperatur ist in Ref. [157] oder im Übersichtsartikel [68] zu finden.

Alle oben genannten thermodynamischen Untersuchungen beschränkten sich auf die Auswirkungen der richtungsunabhängigen Kontakt-Wechselwirkung (4.84). Wir gehen in der anschließenden Diskussion dieses Abschnitts etwas weiter und berücksichtigen den zusätzlichen Einfluss der anisotropen dipolaren Wechselwirkung (4.85). Die wichtigsten Punkte der Rechnung dazu wurden in den Publikationen [46,47] dargelegt und werden hier nochmals zusammenfassend dargestellt. Dabei beschränken wir uns auf den zur Zeit experimentell relevanten Spezialfall verdünnter Bose-Gase in einer harmonischen Falle der allgemeinstmöglichen Form (1.7).

Durch die Anisotropie der Falle sind in dipolar wechselwirkenden Systemen nicht triviale Effekte zu erwarten, zumindest wenn alle Teilchen spinpolarisiert sind und somit gleichgerichtete Dipolmomente besitzen. Dazu betrachten wir die Situation in Abb. 4.2, wo die Dipolmomente entlang der drei verschiedenen Symmetrie-Achsen des äußeren Fallen-Potentials ausgerichtet sind.

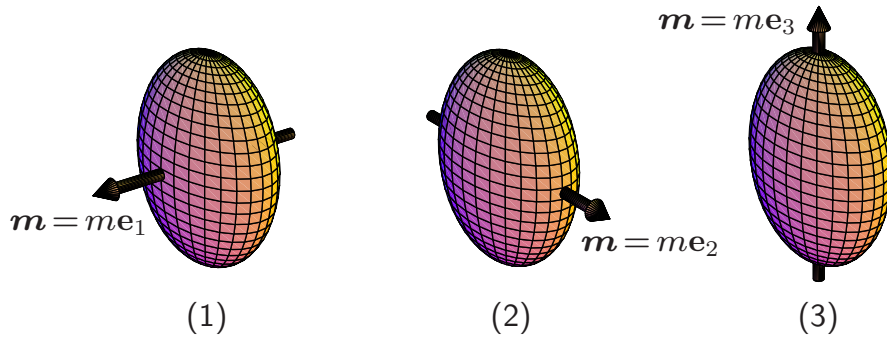


Abbildung 4.2: Verschiedene Ausrichtungen der magnetischen Dipole in einem total anisotropen harmonischen Fallen-Potential (1.7) mit Frequenzen $\omega_1 > \omega_2 > \omega_3$.

Die asymmetrischen Ellipsoide in Abb. 4.2 repräsentieren die modellhafte Kondensatform in dem gegebenen Potential, so dass stärkeren Verengungen in Richtung der größeren Frequenzen zum Ausdruck kommen. Die Anisotropie der Dipol-Dipol-wechselwirkung (4.85) äußert sich nun darin, dass die entlang einer Linie ausgerichteten Dipolmomente ($\mathbf{m} \parallel \mathbf{x}$) sich effektiv anziehen und die nebeneinander parallel aufgestellten Dipolmomente ($\mathbf{m} \perp \mathbf{x}$) sich abstoßen. Die erste Situation trifft nun vorwiegend auf die dritte Einstellung in Abb. 4.2 zu, während die zweite eher für die erste Einstellung in Abb. 4.2 typisch ist. Die Anziehung würde erwartungsgemäß die kritische Temperatur erhöhen, während die Abstoßung sie weiterhin reduzieren würde. Zu erwarten wäre weiterhin auch, dass die Unterschiede in den kritischen Temperaturen bei verschiedenen Orientierungen der Dipole nur auf die Anisotropie der dipolaren wechselwirkung zurückzuführen sind.

Die Aufgabe der weiteren Ausführung dieses Abschnitts besteht nun darin, die qualitativen Erwartungen durch eine quantitative Analyse zu bestätigen und auch dahingehend zu verfeinern, die optimalen experimentellen Einstellungen zu liefern. Das Gerüst der theoretischen Untersuchungen bildet hierbei die im Abschnitt 4.1.5 entwickelte Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung, die wir in der ersten störungstheoretischen Ordnung auswerten. Durch die Verwendung der semiklassischen Näherung werden diese analytischen Rechnungen noch erheblich erleichtert.

4.3.1 Semiklassische Näherung

Bevor wir zur Berechnung der Wechselwirkungs-Beiträge der Selbstenergie und des großkanonischen Potentials im nächsten Unterabschnitt 4.3.2 übergehen, diskutieren wir hier die dazu benötigte semiklassische Näherung. Zuerst geben wir den wechselwirkungsfreien Propagator des harmonischen Oszillators in der Form an, mit der wir ihn für die besagten Rechnungen verwenden. Es wird sich dabei zeigen, dass sich seine Ortsabhängigkeit mit Hilfe von Schwerpunkt- und Relativ-Koordinaten schreiben lässt. Letztere können noch mit Hilfe der Fourier-Transformation als konjugierte Variablen des Impulses dargestellt werden. Die weitere Fourier-Transformation in der Imaginärzeit ergibt die Spektral-Darstellung des freien Propagators in der semiklassischen

Näherung. Unter der Prämisse, dass der Propagator am kritischen Punkt divergiert, bestimmen wir anschließend das Kriterium für das Einsetzen der Kondensation im wechselwirkungsfreien Fall. Welche Relevanz eine solche semiklassische Behandlung hat, zeigten bereits die wechselwirkungsfreien Rechnungen im Abschnitt 2.3. Wie wir daraus nämlich wissen, liefert diese Näherung insbesondere für große Teilchenzahlen N gute Ergebnisse, so dass die kritische Temperatur z.B. bereits bei $N = 1000$ akkurat wiedergegeben ist.

Wir beginnen hier mit dem semiklassischen Ausdruck für den freien Propagator (2.225), in dem wir den darin explizit vorkommenden Grundzustands-Anteil entsprechend der Beziehung

$$G_G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \approx 0 \quad (4.92)$$

praktisch vernachlässigen. Da wir uns des Weiteren auf den kritischen Punkt konzentrieren, an dem sich der Grundzustand noch nicht in einem makroskopischen Maßstab ausgebildet hat, wird diese Näherung insbesondere im Limes großer Teilchenzahlen gut erfüllt. Die weiteren Beiträge zum Propagator (2.225) schreiben wir mit Hilfe der Schwerpunkts-Koordinaten $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$ und der Relativ-Koordinaten $\mathbf{x}' \equiv \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ um. Bemerken wir noch, dass die Schwerpunkts-Koordinaten \mathbf{X} in (2.225) ausschließlich in der Form $M \sum_{j=1}^3 \omega_j^2 X_j^2 / 2 = V(\mathbf{X})$ vorkommen, welche dem Potential am Schwerpunkt entspricht, so erhalten wir

$$\begin{aligned} G^{(0)}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) &\approx \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ &\times \frac{1}{\lambda^3} e^{\beta \hat{\mu}(n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \left(\frac{\hbar \beta}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} V(\mathbf{X}) \right\} \\ &\times \exp \left\{ - \frac{M}{2 \hbar (n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2)} \sum_{j=1}^3 \left[(n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2)^2 \omega_j^2 + 1 \right] x_j'^2 \right\}. \quad (4.93) \end{aligned}$$

Der Ausdruck λ steht dabei für die thermodynamische de Broglie-Wellenlänge (4.70) und $\hat{\mu}$ für das chemische Potential abzüglich der Grundzustandsenergie $\hat{\mu} \equiv \mu - E_G$, wie bereits in (2.122) angegeben.

Bemerken wir weiterhin, dass der Ausdruck in der eckigen Klammer des letzten Faktors aus (4.93) in semiklassischer Näherung $\beta \hbar \omega_j \ll 1$ von der eins dominiert wird, so erhalten wir die folgende semiklassische Näherung:

$$\begin{aligned} G^{(0)}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) &\approx \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} e^{\beta \hat{\mu}(n + \frac{\tau_1 - \tau_2}{\hbar \beta})} \\ &\times \frac{1}{\lambda^3} \left(\frac{\hbar \beta}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right)^{3/2} \exp \left\{ - \frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} V(\mathbf{X}) - \frac{M}{2 \hbar} \frac{\mathbf{x}'^2}{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2} \right\}. \quad (4.94) \end{aligned}$$

Wie man hier sieht, ist die Schwerpunkts-Koordinate von der Relativ-Koordinate entkoppelt. Damit können wir die letztere in die Impuls-Abhängigkeit nach der Fourier-Transformation

$$G^{(0)}(\mathbf{p}; \mathbf{X}, \tau_1 - \tau_2) \equiv \int d^3 x' e^{-i \mathbf{p} \mathbf{x}' / \hbar} G^{(0)}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) \quad (4.95)$$

umschreiben, so dass ein Ausdruck zurückbleibt, der nur von der Schwerpunkts-Koordinate abhängt. Dieser ergibt sich nun zu

$$G^{(0)}(\mathbf{p}; \mathbf{X}, \tau_1 - \tau_2) \approx \lim_{\eta \searrow 0} \left\{ \Theta(\tau_1 - \tau_2 - \eta \hbar \beta) \sum_{n=0}^{\infty} + \Theta(\tau_2 - \tau_1 + \eta \hbar \beta) \sum_{n=1}^{\infty} \right\} \\ \times \exp \left\{ - \frac{n \hbar \beta + \tau_1 - \tau_2}{\hbar} \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu} \right] \right\}. \quad (4.96)$$

Da die Imaginärzeiten dabei nur in Form der Differenzen vorkommen, lässt sich für den freien Propagator die folgende Fourier-Matsubara-Darstellung

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \equiv \int_0^{\hbar \beta} d(\tau_1 - \tau_2) e^{i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} G^{(0)}(\mathbf{p}; \mathbf{X}, \tau_1 - \tau_2) \quad (4.97)$$

finden. Im gesamten Integrationsbereich gilt $\tau_1 - \tau_2 > 0$ (mit Ausnahme eines einzigen 0-Punktes vom Maß Null) und somit ist hier die erste n -Summe aus (4.96) zu verwenden. Da sich weiterhin aufgrund der Bedingung (2.38) für die Matsubara-Frequenz die Identität $\omega_m \hbar \beta = 2\pi m$ ergibt, folgt daraus die Spektral-Darstellung des freien Propagators

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) = \frac{\hbar}{-i\hbar\omega_m + \mathbf{p}^2/2M + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu}}. \quad (4.98)$$

Eine analoge Spektral-Darstellung des Integralkerns (4.6) ist nach den beiden Formeln (4.95) und (4.97) als

$$G^{(0)-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \equiv \int_0^{\hbar \beta} d(\tau_1 - \tau_2) \int d^3x' e^{i\omega_m(\tau_1 - \tau_2)} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}'/\hbar} G^{(0)-1}\left(\mathbf{X} + \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_1; \mathbf{X} - \frac{\mathbf{x}'}{2}, \tau_2\right) \quad (4.99)$$

darzustellen und ergibt sich zu

$$G^{(0)-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \approx \frac{1}{\hbar} \left(-i\hbar\omega_m + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu} \right). \quad (4.100)$$

Dabei ersetzen wir noch etwas heuristisch das chemische Potential μ durch das reduzierte Potential $\hat{\mu} = \mu - 3\hbar\bar{\omega}/2$, wobei $\bar{\omega} = (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)/3$ das arithmetische Mittel der Frequenzen darstellt. Da der Unterschied von rein quantenmechanischer Natur ist, ist es auch nicht verwunderlich, dass dieser Punkt in der oben präsentierten semiklassischen Rechnung nicht korrekt herausgearbeitet wurde. Durch diese Ersetzung wurde ferner erreicht, dass der Integralkern in seiner Spektral-Darstellung (4.100) explizit reziprok zum freien Propagator (4.98) ist. Diese reziproke Abhängigkeit der beiden Größen wurde übrigens schon in der Funktional-Schreibweise (4.14) allgemein festgestellt.

Nun sind wir in der Lage, den kritischen Punkt zu untersuchen, unterhalb dessen die Teilchen in den Grundzustand kondensieren. Ein solcher Übergang der Teilchen in den Bose-Einstein-kondensierten Zustand äußert sich im Auftreten von Polstellen des Propagators (4.98). Diese treten im gesamten Temperaturbereich unterhalb des gesuchten kritischen Temperaturwertes auf.

Für weitere Untersuchungen bemerken wir noch, dass die Polstellen des Propagators gleichzeitig den Nullstellen seiner Umkehrung (4.100)

$$G^{(0)-1}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) = 0 \quad (4.101)$$

entsprechen. Für ein reelles chemisches Potential $\hat{\mu}$ kann diese Gleichung nur für die Matsubara Null-Mode $\omega_m = 0$ erfüllt werden. Da außerdem das chemische Potential eine Konstante darstellt, verschwindet der Kern (4.100) nur für den Impuls $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Die Schwerpunkts-Koordinate soll dabei ebenfalls verschwinden, d.h. $\mathbf{X} = \mathbf{0}$, weil in einer harmonischen Falle (1.7) das Potentialminimum am Ursprung vorliegt. In einem allgemeineren Fall muss es jedoch nicht immer so sein, wie es z.B. in einem überkritisch schnell rotierenden Bose-Gas der Fall ist, wo das Potential die Form eines mexikanischen Huts hat [158]. In einem solchen Fall unterliegt das reduzierte chemische Potential im Bose-Einstein-kondensierten Bereich der allgemeinen Minimum-Bedingung

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_c^{(0)} = \min_{\mathbf{X}} V(\mathbf{X}) , \quad (4.102)$$

wobei wir hier mit $\hat{\mu}_c^{(0)}$ den kritischen Wert des chemischen Potentials in der wechselwirkungsfreien Theorie bezeichneten. Beschränken wir uns weiterhin auf die harmonische Falle, so erhalten wir $\hat{\mu}_c^{(0)} = 0$, und das entspricht einem chemischen Potential, welches dem Grundzustand-Energiewert gleich ist. Das ist auch die aus dem Kapitel 2 bekannte Tatsache, welche im Abschnitt 2.3.1 dafür benutzt wurde, die kritische Temperatur eines idealen Bose-Gases auszuwerten. In der semiklassischen Näherung ergaben sich damit die Resultate (2.134) nullter bzw. (2.135) erster Ordnung.

Im Unterabschnitt 4.3.3 sollen die Berechnungen der kritischen Temperatur auch auf das wechselwirkende Bose-Gas ausgeweitet werden. Doch dazu benötigen wir noch die störungstheoretischen Wechselwirkungs-Beiträge zur Selbstenergie und zum großkanonischen Potential, die im nächsten Unterabschnitt ausgewertet werden.

4.3.2 Selbstenergie- und Vakuum-Diagramme führender Ordnung

Zur Auswertung der Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung (4.63) benötigen wir sowohl die Selbstenergie (4.57) als auch den Wechselwirkungs-Anteil des großkanonischen Potentials (4.59). Wir können sie in der niedrigsten störungstheoretischen Ordnung explizit berechnen, wenn wir die darin vorkommenden Propagatoren \mathbf{G}_{ij} durch die wechselwirkungsfreien Ausdrücke $G_{ij}^{(0)}$ ersetzen. In dieser Näherung schreiben wir die einzelnen Ausdrücke explizit in der Orts-Imaginärzeit-Darstellung aus. Dafür benötigen wir die Vorschriften (4.19) und die Vierer-Wechselwirkung in der Form (4.8), so dass sich

$$\begin{aligned} \Sigma^{(D)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \mathbf{x}_1 \tau_1 \begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \\ \leftarrow \end{array} \mathbf{x}_2 \tau_2 \\ &= -\frac{1}{\hbar} \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \int d^3x V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) G^{(0)}(\mathbf{x}, \tau_1; \mathbf{x}, \tau_1) , \quad (4.103) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(A)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= \mathbf{x}_1 \tau_1 \begin{array}{c} \curvearrowright \\ \leftarrow \end{array} \mathbf{x}_2 \tau_2 \\ &= -\frac{1}{\hbar} \delta(\tau_1 - \tau_2) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_1) \quad (4.104) \end{aligned}$$

für den direkten und den Austausch-Term der Selbstenergie ergibt. Für die entsprechenden Terme des großkanonischen Potentials gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{GK}^{(D)} &= -\frac{1}{\beta} W^{(D)} = -\frac{1}{2\beta} \text{Diagram} \\ &= \frac{1}{2\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x_1 d^3x_2 G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_1, \tau) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_2, \tau; \mathbf{x}_2, \tau),\end{aligned}\quad (4.105)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{GK}^{(A)} &= -\frac{1}{\beta} W^{(A)} = -\frac{1}{2\beta} \text{Diagram} \\ &= \frac{1}{2\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x_1 d^3x_2 G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) V^{(\text{int})}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) G^{(0)}(\mathbf{x}_2, \tau; \mathbf{x}_1, \tau).\end{aligned}\quad (4.106)$$

Bei genauerem Hinsehen erkennt man, dass in allen oben genannten störungstheoretischen Ausdrücken erster Ordnung nur die zeitlich lokalen freien Propagatoren vorkommen. Diese lassen sich aus dem semiklassischen Resultat (4.94) zu

$$G^{(0)}(\mathbf{x}_1, \tau; \mathbf{x}_2, \tau) \approx \frac{1}{\lambda^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{n\beta M}{8} \sum_{j=1}^3 \omega_j^2 (x_{1j} + x_{2j})^2 - \frac{M(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2}{2n\hbar^2\beta} \right\} \quad (4.107)$$

reduzieren. Für die weiteren Berechnungen verwenden wir noch die Fourier-Transformierte des Wechselwirkungspotentials $V^{(\text{int})}(\mathbf{q})$ und erhalten die Beiträge des großkanonischen Potentials (4.105) und (4.106)

$$\mathcal{F}_{GK}^{(D)} = \frac{1}{2(2\pi\hbar)^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^6} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{e^{(n+n')\beta\hat{\mu}}}{n^3 n'^3} \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{n+n'}{2\hbar^2\beta M n n'} \sum_{j=1}^3 \frac{q_j^2}{\omega_j^2} \right\}, \quad (4.108)$$

$$\mathcal{F}_{GK}^{(A)} = \frac{1}{2(2\pi\hbar)^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{e^{(n+n')\beta\hat{\mu}}}{(n+n')^3} \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{\beta n n'}{2M(n+n')} \mathbf{q}^2 \right\}, \quad (4.109)$$

wobei wir hier noch das geometrische Mittel der Frequenzen $\tilde{\omega} \equiv (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}$ aus (2.130) verwendet haben. Die Selbstenergie-Beiträge (4.103) und (4.104) lassen sich prinzipiell analog dazu berechnen. Da uns allerdings für weitere Untersuchungen nur ihre Spektral-Darstellungen interessieren, geben wir sie gleich in der Fourier-Matsubara-transformierten Form an. Die jeweiligen Selbstenergie-Terme lassen sich in Analogie zur Darstellung des Integral-Kerns (4.99) berechnen und lauten

$$\begin{aligned}\Sigma^{(D)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) &= -\frac{1}{\hbar(2\pi\hbar)^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n^3} \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar^2\beta M n} \sum_{j=1}^3 \frac{q_j^2}{\omega_j^2} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{X} \right\},\end{aligned}\quad (4.110)$$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(A)}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) = & -\frac{1}{\hbar(2\pi\hbar)^3} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \exp \left\{ -\frac{n\beta M}{2} \sum_{j=1}^3 \omega_j^2 X_j^2 \right\} \\ & \times \int d^3q V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{n\beta}{2M} (\mathbf{q} + \mathbf{p})^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.111)$$

Zur weiteren Verwendung von (4.110) und (4.111) sei auf den nächsten Unterabschnitt 4.3.3 verwiesen.

Des Weiteren konzentrieren wir uns auf die Berechnung der direkten und Austausch-Vakuum-Diagramme (4.108) und (4.109). Dabei spezifizieren wir das Wechselwirkungs-Potential auf die im Abschnitt 4.2 diskutierte Summe der Kontakt- und Dipol-Dipol-Wechselwirkung (4.89). Die Fourier-Transformierte der Kontakt-Wechselwirkung (4.84) wird dabei durch die reine Konstante $V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) = 4\pi\hbar^2 a_s/M$ dargestellt. Diejenige der Dipol-Dipol-Wechselwirkung haben wir bereits mit (4.86) angegeben. Verwenden wir nun das räumlich feste Koordinatensystem mit den Achsen parallel zu den Symmetrie-Achsen des Fallen-Potentials in Abb. 4.2, so können wir darin das magnetische Dipolmoment in Kugelkoordinaten als $\mathbf{m} = m (\sin \alpha \cos \phi, \sin \alpha \sin \phi, \cos \alpha)$ schreiben. Damit ergibt sich die Fourier-Darstellung von (4.89)

$$\begin{aligned} V^{(\text{int})}(\mathbf{q}) = & \mu_0 m^2 \left\{ \frac{1}{3\epsilon_{DD}} - \frac{1}{3} + \sin^2 \alpha \left(\frac{q_1^2}{q^2} \cos^2 \phi + \frac{q_2^2}{q^2} \sin^2 \phi \right) + \frac{q_3^2}{q^2} \cos^2 \alpha \right. \\ & \left. + 2 \sin \alpha \cos \alpha \left(\frac{q_1 q_3}{q^2} \cos \phi + \frac{q_2 q_3}{q^2} \sin \phi \right) + 2 \sin^2 \alpha \frac{q_1 q_2}{q^2} \sin \phi \cos \phi \right\}, \end{aligned} \quad (4.112)$$

wobei wir hier noch die Abkürzung ϵ_{DD} für die relative dipolare Wechselwirkungs-Stärke (4.91) mit dem effektiven Parameter (4.90) verwendet haben.

Für weitere Untersuchungen definieren wir eine Abkürzung für das in verschiedenen Ausführungen auftretende Master-Integral

$$I^{(\text{int})} \left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3} \right) = \frac{3}{\mu_0 m^2 a_1 a_2 a_3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 dq_2 dq_3}{\pi^{3/2}} V^{\text{int}}(\mathbf{q}) \exp \left\{ -\frac{q_1^2}{a_1^2} - \frac{q_2^2}{a_2^2} - \frac{q_3^2}{a_3^2} \right\}. \quad (4.113)$$

Dabei nehmen wir hier vorweg, dass diese Form nur von den Quotienten der Parameter a_1 , a_2 und a_3 abhängt, was natürlich nicht sofort klar und deshalb noch zu verifizieren ist. Die Beiträge (4.108) und (4.109) lassen sich damit als

$$\mathcal{F}_{GK}^{(D)} = \frac{\mu_0 m^2}{6(\beta\hbar\tilde{\omega})^3 \lambda^3} \zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right), \quad (4.114)$$

$$\mathcal{F}_{GK}^{(A)} = \frac{\mu_0 m^2}{6(\beta\hbar\tilde{\omega})^3 \lambda^3} \zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) I^{(\text{int})}(1, 1) \quad (4.115)$$

schreiben, wobei hier die thermische Wellenlänge (4.70) und als weitere Abkürzung die verallgemeinerte polylogarithmische Funktion

$$\zeta_{a,b,c}(z) \equiv \sum_{n,n'=1}^{\infty} \frac{z^{n+n'}}{n^a n^b (n+n')^c} \quad (4.116)$$

verwendet wurde. Bevor wir uns in der anschließenden Diskussion mit dem Lösen des Integrals (4.113) beschäftigen, beschränken wir uns zuerst auf die speziellen Einstellungen des Dipolmoments \mathbf{m} aus Abb. 4.2 und definieren dafür das Teilproblem

$$I^{(j)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \frac{3}{a_1 a_2 a_3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1 dq_2 dq_3}{\pi^{3/2}} \left(\frac{1}{3 \epsilon_{DD}} - \frac{1}{3} + \frac{q_j^2}{\mathbf{q}^2} \right) \exp \left\{ -\frac{q_1^2}{a_1^2} - \frac{q_2^2}{a_2^2} - \frac{q_3^2}{a_3^2} \right\}. \quad (4.117)$$

Die allgemeine Form (4.113) lässt sich darauf zurückführen. Es gibt zwar in der Wechselwirkung (4.112) noch Anteile von der Form $q_i q_j / \mathbf{q}^2$ mit $i \neq j$, die durch (4.117) nicht erfasst werden. Aufgrund der Symmetrie des Integrandes aus (4.113) verschwinden allerdings alle solche Terme, so dass sich das Gesamtproblem auf

$$\begin{aligned} I^{(\text{int})}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) &= \sin^2 \alpha \cos^2 \phi I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) + \sin^2 \alpha \sin^2 \phi I^{(2)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) \\ &\quad + \cos^2 \alpha I^{(3)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) \end{aligned} \quad (4.118)$$

reduziert. Daraus kann man unmittelbar erkennen, dass das volle Wechselwirkungs-Integral für beliebige Parameter a_j genau dann ihre Extremalwerte annimmt, wenn das Dipolmoment \mathbf{m} in Richtung der jeweiligen Symmetrieachsen der Falle zeigt. Genau diese Extremalfälle sind in Abb. 4.2 schematisch dargestellt. Dabei treten folgende Raumwinkel und entsprechende Spezifizierungen des Integrals (4.118) auf:

$$I^{(\text{int})}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \begin{cases} I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right), & \alpha = \pi/2, \quad \phi = 0, \pi, \\ I^{(2)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right), & \alpha = \pi/2, \quad \phi = \pi/2, 3\pi/2, \\ I^{(3)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right), & \alpha = 0, \quad \phi \text{ beliebig.} \end{cases} \quad (4.119)$$

Ob diese Extrema allerdings die Maxima oder Minima ergeben, lässt sich nicht sofort beantworten, sondern hängt von den konkreten Koeffizienten $I^{(j)}$ ab. Des Weiteren müssen wir sie allerdings nicht alle einzeln berechnen, denn zwischen ihnen liegen noch folgende Beziehungen vor:

$$I^{(2)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = I^{(1)}\left(\frac{a_2}{a_3}, \frac{a_2}{a_1}\right), \quad I^{(3)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = I^{(1)}\left(\frac{a_3}{a_1}, \frac{a_3}{a_2}\right), \quad (4.120)$$

welche sich unmittelbar aus der allgemeinen Form (4.117) ableiten lassen. Damit brauchen wir lediglich einen einzigen Spezialfall explizit auszuwerten und nehmen dafür beispielsweise den mit $j=1$.

Zur Ausführung der Integration (4.117) verwenden wir für den Term \mathbf{q}^{-2} die so genannte Schwingersche Eigenzeit-Darstellung

$$\frac{1}{\mathbf{q}^2} = \int_0^{\infty} d\tau e^{-\tau \mathbf{q}^2}, \quad (4.121)$$

die wir aus der allgemeineren Formel (2.76) mit der Potenz $x = 1$ gewinnen. Damit reduziert sich (4.117) nach der Impuls-Integration zu

$$I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \frac{1}{\epsilon_{DD}} - 1 + \frac{3}{2a_1a_2a_3} \int_0^\infty \frac{d\tau}{(\tau + 1/a_1^2)^{3/2} (\tau + 1/a_2^2)^{1/2} (\tau + 1/a_3^2)^{1/2}} . \quad (4.122)$$

Das noch übrig gebliebene τ -Integral lässt sich ferner mit Hilfe der unvollständigen elliptischen Funktionen erster und zweiter Art [61, (8.111)] darstellen:

$$F(\phi, k) \equiv \int_0^{\sin \phi} \frac{dx}{(1-x^2)^{1/2} (1-k^2x^2)^{1/2}} , \quad E(\phi, k) \equiv \int_0^{\sin \phi} \frac{dx (1-k^2x^2)^{1/2}}{(1-x^2)^{1/2}} . \quad (4.123)$$

Damit ergibt sich das Master-Integral (4.122) zu

$$I^{(1)}\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) = \frac{1}{\epsilon_{DD}} - f\left(\frac{a_1}{a_2}, \frac{a_1}{a_3}\right) , \quad (4.124)$$

wobei die Anisotropie-Funktion f eine noch weiter zu spezifizierende Kombination der elliptischen Integrale (4.123) darstellt. So ergibt sie sich für den Fall $a_1 < a_2, a_3$ nach der Substitution $\tau \equiv (1/a_1^2 - 1/a_2^2)/x^2 - 1/a_1^2$ zu

$$f(\eta, \kappa) = 1 + \frac{3\kappa\eta}{\sqrt{1-\kappa^2} (1-\eta^2)} \left\{ E\left(\arcsin\sqrt{1-\kappa^2}, \frac{\sqrt{1-\eta^2}}{\sqrt{1-\kappa^2}}\right) - F\left(\arcsin\sqrt{1-\kappa^2}, \frac{\sqrt{1-\eta^2}}{\sqrt{1-\kappa^2}}\right) \right\} \quad \text{für } \kappa, \eta < 1 . \quad (4.125)$$

Für den Fall $a_3 < a_2 < a_1$ muss diese Funktion allerdings mit Hilfe von [61, (8.127)] analytisch fortgesetzt werden und lautet danach

$$f(\eta, \kappa) = \frac{1+2\eta^2}{1-\eta^2} - \frac{3\kappa\eta}{(1-\eta^2)(\kappa^2-1)} \left\{ \sqrt{\kappa^2-\eta^2} E\left(\arcsin\frac{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}{\kappa}, \frac{\sqrt{\kappa^2-1}}{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}\right) - \frac{1-\eta^2}{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}} F\left(\arcsin\frac{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}{\kappa}, \frac{\sqrt{\kappa^2-1}}{\sqrt{\kappa^2-\eta^2}}\right) \right\} \quad \text{für } 1 < \eta < \kappa . \quad (4.126)$$

Für den Spezialfall $a_2 < a_3 < a_1$ ist die Situation analog zu der gerade behandelten, lediglich die Parameter tauschen ihre Rollen, d.h. hierfür ist die Ersetzung $\eta \leftrightarrow \kappa$ vorzunehmen. Die Anisotropie-Funktion $f(\eta, \kappa)$ aus (4.125) und (4.126) spielte interessanterweise bereits bei Null-Temperatur-Untersuchungen der dynamischen Ausbreitung einer dipolaren Gas-Wolke eine wichtige Rolle [159]. Ebenfalls dort wurden noch einige wichtige Symmetrie-Eigenschaften dieser Funktion angegeben:

$$f(\eta, \kappa) = f(\kappa, \eta) , \quad f(\eta, \kappa) + f\left(\frac{\kappa}{\eta}, \frac{1}{\eta}\right) + f\left(\frac{1}{\kappa}, \frac{\eta}{\kappa}\right) = 0 . \quad (4.127)$$

Abschließend ist diese Funktion noch für die zylinder-symmetrische Fallen-Konfigurationen auszuwerten. Durch die entsprechenden Reihendarstellungen der elliptischen Funktionen erhalten wir dafür

$$f(\kappa, \kappa) = -2f(1, 1/\kappa) \equiv f_s(\kappa) , \quad (4.128)$$

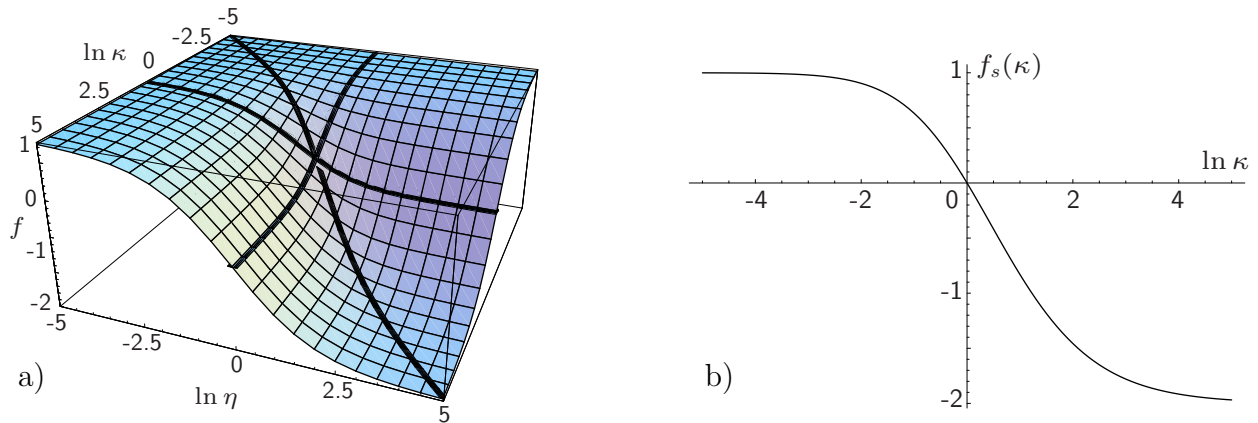


Abbildung 4.3: a) Logarithmische Darstellung der Anisotropie-Funktion $f(\eta, \kappa)$ aus (4.125) und (4.126). Schwarze Kurven stellen Spezialfälle aus (4.128) dar, so repräsentiert die Querlinie die Funktion $f(\kappa, \kappa)$ und die Linien parallel zu den Koordinatenachsen $f(1, \kappa)$ und $f(\eta, 1)$. b) Logarithmische Darstellung der Zylinder-symmetrischen Anisotropie-Funktion $f_s(\kappa)$ aus (4.129). Abbildungen wie in [47] für a) bzw. [46] für b).

wobei wir hier die halb-symmetrische Anisotropie-Funktion [46,131,142,160]

$$f_s(\kappa) = \begin{cases} \frac{2\kappa^2 + 1}{1 - \kappa^2} - \frac{3\kappa^2}{(1 - \kappa^2)^{3/2}} \operatorname{artanh} \sqrt{1 - \kappa^2} & , \quad 0 < \kappa < 1 \\ 0 & , \quad \kappa = 1 \\ -\frac{2\kappa^2 + 1}{\kappa^2 - 1} + \frac{3\kappa^2}{(\kappa^2 - 1)^{3/2}} \arctan \sqrt{\kappa^2 - 1} & , \quad \kappa > 1 \end{cases} \quad (4.129)$$

verwenden. Diese Funktion konvergiert im Grenzbereich $\kappa \rightarrow \infty$ gegen -2 und für $\kappa \rightarrow 0$ gegen den Wert 1 . Weitere Details zur vollen Anisotropie-Funktion f aus (4.125) bzw. (4.126) sowie zu ihrem halb-symmetrischen Spezialfall f_s aus (4.129) sind der Abb. 4.3 zu entnehmen. Im anschließenden Unterabschnitt werden wir diese Funktion verwenden, um den Effekt der anisotropen Dipol-Wechselwirkung auf die kritische Temperatur in einem verdünnten Bose-Gas zu berechnen.

4.3.3 Berechnung der kritischen Temperatur

In diesem Unterabschnitt berücksichtigen wir den Einfluss der Wechselwirkung auf die thermodynamische Größen. Weiterhin spezifizieren wir hier das Kriterium für den kritischen Kondensationspunkt in Anwesenheit der Wechselwirkung. Die beiden Wechselwirkungs-Effekte führen zur Verschiebung der kritischen Temperatur. Die dabei angewendete Vorgehensweise wurde in den Publikationen [46,47] dargestellt und liefert die Verallgemeinerung des Resultats aus [65,143] für den Fall dipolar wechselwirkender Bose-Gase.

Bevor wir zur Bestimmung des kritischen Punktes übergehen, stellen wir hier die thermodynamischen Gleichungen auf, welche in der anschließenden Diskussion von entscheidender Bedeutung sein werden. Als Ausgangspunkt dient uns dabei das großkanonische Potential (4.65) mit dem

wechselwirkungsfreien Anteil $\mathcal{F}_{GK}^{(0)}$ aus dem semiklassischen Resultat in der führenden Ordnung (2.131). Mit den beiden Wechselwirkungs-Beiträgen (4.114) und (4.115) erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{GK} = & \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] - \frac{1}{\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_4(e^{\beta\hat{\mu}}) - \frac{3\beta\hbar\tilde{\omega}}{2\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) \\ & + \frac{\mu_0 m^2}{6\lambda^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) + \dots \quad (4.130) \end{aligned}$$

Die ersten drei Terme repräsentieren wechselwirkungsfreie Beiträge und stehen für den Anteil der Grundzustands- und thermischer Teilchen in der nullten und ersten semiklassischen Ordnung. Die beiden letzten Summanden sind die Wechselwirkungs-Korrekturen vom direkten und dem Austausch-Term. Interessanterweise besitzt der zuletzt Genannte keine Abhängigkeit von der Anisotropie der Wechselwirkung, wodurch er sich deutlich vom direkten Term unterscheidet. Aus der Gleichung (4.130) lässt sich nach der Beziehung $N = -\partial\mathcal{F}_{GK}/\partial\hat{\mu}$ die Teilchenzahl

$$\begin{aligned} N = & N_{\mathbf{0}}^{(0)} + \frac{1}{(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}}) + \frac{3\beta\hbar\tilde{\omega}}{(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}}) \\ & - \frac{\mu_0 m^2 \beta}{3\lambda^3(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \zeta_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(e^{\beta\hat{\mu}}) + \dots \quad (4.131) \end{aligned}$$

ableiten, wobei wir hierfür noch die aus (4.116) folgende Beziehung $\zeta_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}}(z) = 2\zeta_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}}(z)$ verwendeten. Der erste Summand $N_{\mathbf{0}}^{(0)}$ steht dabei für die Grundzustands-Teilchenzahl im idealen Fall (2.125). Mit der kritischen Temperatur des idealen Gases im thermodynamischen Limes (2.134) lässt sich die Gleichung (4.131) noch weiterhin umformen zu

$$\begin{aligned} 1 = & \frac{N_{\mathbf{0}}^{(0)}}{N} + \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^3 \frac{\zeta_3(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta(3)} + \frac{3\tilde{\omega}}{2\tilde{\omega}N^{1/3}} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^2 \frac{\zeta_2(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta^{2/3}(3)} \\ & - \frac{\mu_0 m^2 \beta}{3\lambda^3} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}} \right)^3 \left[I^{(\text{int})} \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3} \right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \frac{\zeta_{1/2, 3/2, 3/2}(e^{\beta\hat{\mu}})}{\zeta(3)} + \dots \quad (4.132) \end{aligned}$$

Der erste Term auf der rechten Seite steht dabei für den Anteil der Teilchen im Grundzustand der freien Theorie, der zweite und dritte für denjenigen der thermisch angeregten Teilchen ohne Wechselwirkung, und nur die letzten beiden Summanden repräsentieren den Anteil der wechselwirkenden Teilchen. Doch das vermittelt ein grundsätzlich falsches Bild über die Zusammenhänge in realen Systemen, denn eigentlich wechselwirken alle Gas-Teilchen miteinander permanent, wenn auch nur schwach.

Zur geeigneten Korrektur des störungstheoretischen Bildes verwenden wir an dieser Stelle die Selbstenergie-Renormierung des Energie-Spektrums (siehe dazu auch die grundsätzliche Diskussion in Abschnitt 4.1.2). Dafür schreiben wir den Integral-Kern der wechselwirkenden Theorie in der Hartree-Fock-Näherung (4.62) in führender Ordnung der Störungstheorie

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \left\{ -i\hbar\omega_m + E_{\text{kin}}^*(\mathbf{p}) + V^*(\mathbf{X}) - \hat{\mu}^* \right\} = & \frac{1}{\hbar} \left\{ -i\hbar\omega_m + \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{X}) - \hat{\mu} \right\} - \Sigma^{(\text{D})}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \\ & - \Sigma^{(\text{A})}(\mathbf{p}, \omega_m; \mathbf{X}) \quad (4.133) \end{aligned}$$

mit dem direkten und dem Austausch-Term der Selbstenergie (4.110) und (4.111). Dabei verwenden wir die renormierte kinetische $E_{\text{kin}}^*(\mathbf{p})$ und potentielle $V^*(\mathbf{X})$ Energie und das renormierte chemische Potential $\hat{\mu}^*$. Die beiden Selbstenergie-Ausdrücke sind erstens unabhängig von der Matsubara-Frequenz ω_m und zweitens reell, wie man unmittelbar aus (4.110) und (4.111) sieht. Damit ändert sich der imaginäre Anteil des Integralkerns in der Hartree-Fock-Näherung nicht. Das chemische Potential erfährt in Anwesenheit der Selbstenergie eine Verschiebung um eine konstante Größe und wird zum renormierten chemischen Potential

$$\hat{\mu}^* = \hat{\mu} + \hbar \Sigma^{(D)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) + \hbar \Sigma^{(A)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) \equiv \hat{\mu} - \hat{\mu}^{(D)} - \hat{\mu}^{(A)} . \quad (4.134)$$

Die beiden Wechselwirkungs-Korrektur-Terme aus (4.110) und (4.111) lassen sich mit dem Integral (4.113) in einer kurzen Form als

$$\hat{\mu}^{(D)} = -\hbar \Sigma^{(D)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) = \frac{\mu_0 m^2}{3 \lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \hat{\mu}}) I^{(\text{int})}\left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3}\right) , \quad (4.135)$$

$$\hat{\mu}^{(A)} = -\hbar \Sigma^{(A)}(\mathbf{0}, 0; \mathbf{0}) = \frac{\mu_0 m^2}{3 \lambda^3} \zeta_{3/2}(e^{\beta \hat{\mu}}) I^{(\text{int})}(1, 1) \quad (4.136)$$

darstellen. Damit sind wir nun in der Lage, die Renormierung des chemischen Potentials in die Gleichung (4.132) einzubauen, indem wir den freien Parameter $\hat{\mu}$ mit Hilfe des renormierten Ausdrucks nach (4.134) darstellen. Führen wir dies störungstheoretisch bis zur ersten Ordnung durch, so erhalten wir

$$1 = \frac{N_{\mathbf{0}}^{(0)}}{N} + \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^3 \frac{\zeta_3(e^{\beta \hat{\mu}^*})}{\zeta(3)} + \frac{3\bar{\omega}}{2\bar{\omega} N^{1/3}} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^2 \frac{\zeta_2(e^{\beta \hat{\mu}^*})}{\zeta^{2/3}(3)} - \frac{\mu_0 m^2 \beta}{3 \lambda^3} \left(\frac{T}{T_c^{(0)}}\right)^3 \quad (4.137)$$

$$\times \left[I^{(\text{int})}\left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3}\right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right] \frac{1}{\zeta(3)} \left\{ \zeta_{1/2, 3/2, 3/2}(e^{\beta \hat{\mu}^*}) - \zeta_{3/2}(e^{\beta \hat{\mu}^*}) \zeta_2(e^{\beta \hat{\mu}^*}) \right\} + \dots .$$

Die restlichen Impuls- und Orts-Abhängigkeiten der Selbstenergie-Terme führen zur Renormierung des Hintergrund-Potentials (der Fallenfrequenz ω) und der kinetischen Energie (der Masse M). Die Renormierung dieser Größen würde sich aber erst ab der zweiten Ordnung der Störungstheorie und der semiklassischen Korrektur der Wechselwirkung bemerkbar machen, so dass wir sie in unseren weiteren Untersuchungen nicht berücksichtigen werden.

An dieser Stelle wollen wir noch das Kriterium für den kritischen Punkt finden und verweisen dabei auf die Analogie zur Diskussion im Abschnitt 4.3.1. Darin haben wir nämlich festgestellt, dass der Propagator unterhalb des kritischen Punktes die Divergenz im Grundzustand besitzt oder, äquivalent dazu, dass der Integralkern verschwindet, siehe Gl. (4.101). Eine ähnliche Situation liegt auch im wechselwirkenden Fall vor mit dem Unterschied, dass nun der volle Integralkern der wechselwirkenden Theorie unterhalb der kritischen Temperatur verschwinden muss. In dem Ausdruck (4.133) müsste dazu das renormierte chemische Potential $\hat{\mu}^*$ entsprechend der Beziehung (4.102) dem Minimum der potentialen Energie sowie demjenigen der kinetischen Energie gleichen. Da die Ausdrücke (4.110) und (4.111) nur sanfte \mathbf{p} - und \mathbf{X} -Abhängigkeiten besitzen, behalten die beiden Energiearten zumindest für schwache Wechselwirkungen näherungsweise ihre Struktur. Somit hat das Hintergrund-Potential sein Minimum immer noch am Ursprung $\mathbf{X} = \mathbf{0}$ und auch

der kinetische Energie-Term bei verschwindenden Impulsen $\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Dadurch ist gesichert, dass das renormierte chemische Potential in der kondensierten Phase verschwindet, d.h. es gilt $\hat{\mu}^* = 0$. Der kritische Punkt wird zusätzlich durch die Forderung charakterisiert, dass die Kondensat-Fraktion an diesem Punkt noch mikroskopisch ist. Somit können wir im thermodynamischen Limes den Beitrag des Grundzustandes $N_0^{(0)}/N$ aus (4.137) vernachlässigen und erhalten

$$1 = \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right)^3 + \frac{3\bar{\omega}}{2\bar{\omega}N^{1/3}} \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right)^2 \frac{\zeta(2)}{\zeta^{2/3}(3)} - c_\delta \frac{\mu_0 m^2 \beta_c}{3\lambda_c^3} \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right)^3 \left[I^{(\text{int})}\left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3}\right) + I^{(\text{int})}(1, 1) \right], \quad (4.138)$$

wobei wir hier noch die in [46] eingeführte Abkürzung

$$c_\delta \equiv \frac{4}{3\zeta(3)} \left\{ \zeta\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) - \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \zeta(2) \right\} \quad (4.139)$$

mit der erweiterten Riemannschen Zeta-Funktion

$$\zeta(a, b, c) \equiv \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{1}{n'^a n^b (n+n')^c} \quad (4.140)$$

verwenden. Aus der Beziehung (4.138) lassen sich nun die Verschiebungen der kritischen Temperatur berechnen. Die Resultate spezifizieren wir dabei zuerst auf die wichtigsten Extremalfälle aus (4.119) mit Dipolmomenten, die wie in Abb. 4.2 entlang der Symmetrieachsen des Fallen-Potentials ausgerichtet sind. In den jeweiligen Konfigurationen $j = 1, 2, 3$ erhalten wir dann mit Hilfe (4.124) die Resultate [47]

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}}\right)^{(1)} &= -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\bar{\omega}N^{1/3}} - c_\delta \frac{a}{\lambda_c^{(0)}} + \frac{c_\delta}{2} \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 \lambda_c^{(0)}} f\left(\frac{\omega_1}{\omega_2}, \frac{\omega_1}{\omega_3}\right), \\ \left(\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}}\right)^{(2)} &= -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\bar{\omega}N^{1/3}} - c_\delta \frac{a}{\lambda_c^{(0)}} + \frac{c_\delta}{2} \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 \lambda_c^{(0)}} f\left(\frac{\omega_2}{\omega_3}, \frac{\omega_2}{\omega_1}\right), \\ \left(\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}}\right)^{(3)} &= -\frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta^{2/3}(3)\bar{\omega}N^{1/3}} - c_\delta \frac{a}{\lambda_c^{(0)}} + \frac{c_\delta}{2} \frac{\mu_0 m^2 M}{12\pi\hbar^2 \lambda_c^{(0)}} f\left(\frac{\omega_3}{\omega_1}, \frac{\omega_3}{\omega_2}\right). \end{aligned} \quad (4.141)$$

Dabei erinnern wir uns an die relative Stärke des Anteils der anisotropen Wechselwirkung ϵ_{DD} aus (4.91) und nutzten für die beiden letzten Resultate die allgemeinen Beziehungen (4.120) aus. Diese Ergebnisse spiegeln für den Fall ohne Dipol-Wechselwirkung ($m = 0$) die aus Literatur bekannten Resultate wider [65,143,147] und können als Verallgemeinerungen für den Fall mit nicht verschwindenden Dipolmomenten m gesehen werden.

Zum Abschluss dieses Unterabschnitts diskutieren wir noch den Anwendungsbereich unserer störungstheoretischen Resultate der kritischen Temperatur (4.141). Natürlich stellen diese Ergebnisse nur eine Näherung führender Ordnung zu der an sich selbstkonsistenten Hartree-Fock-Molekularfeld-Näherung dar. Dennoch ist es eine bekannte Tatsache, dass eine solche Molekularfeld-Näherung ohnehin alle Fluktuationen unterschätzt und somit in der Nähe des kritischen Punktes nicht gültig ist. Nach einem Dimensions-Argument ergibt sich ein so genannter Ginzburg-Bereich

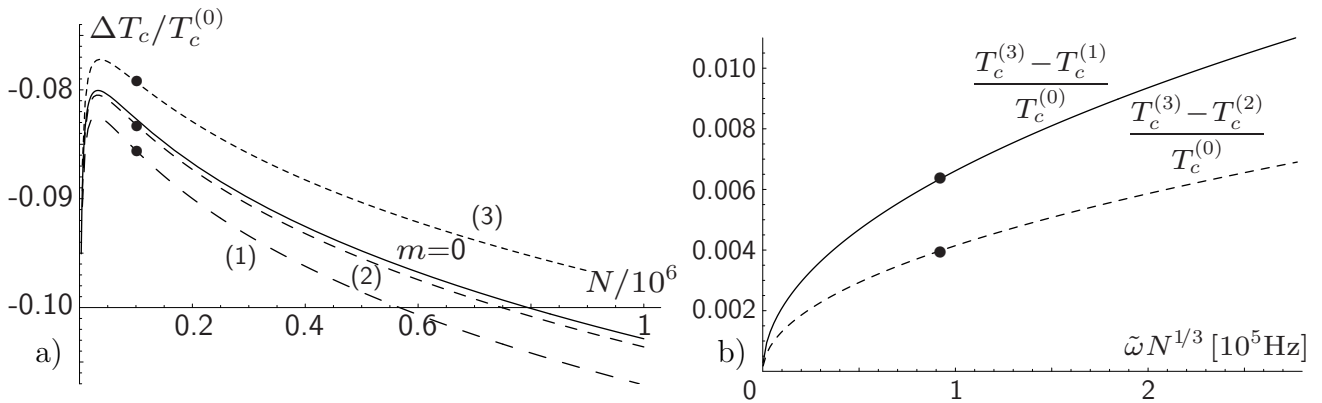


Abbildung 4.4: a) Abhängigkeit der relativen Abweichungen der kritischen Temperatur aus (4.141) von der Teilchenzahl für die Parameter im ^{52}Cr -Experiment [16]. Durchgezogene Kurve spiegelt das Resultat ohne Dipol-Dipol-Wechselwirkung $m = 0$ wider und die gestrichelten mit $m = 6m_B$ für Konfigurationen (1), (2) und (3) aus Abb. 4.2. b) Relative Temperaturdifferenzen zwischen den verschiedenen Konfigurationen in Abhängigkeit der Teilchenzahl N und der mittleren Frequenz $\tilde{\omega}$ für Parameter aus a). Schwarze Punkte stehen für die im Experiment vorliegenden N - und $\tilde{\omega}$ -Werte. Beide Abbildungen entstammen der Arbeit [47].

um die kritische Temperatur, in dem die Fluktuationen dominieren, und dieser skaliert im dreidimensionalen Raum mit der zweiten Potenz der Wechselwirkungs-Stärke [48]. Das bedeutet, alle in der selbstkonsistenten Molekularfeld-Näherung ausgerechneten Abweichungen der kritischen Temperatur ab der zweiten störungstheoretischen Ordnung sollten aufgrund der Wechselwirkungs-Korrelationen korrigiert werden [65]. Dazu müssten Beiträge jenseits der Hartree-Fock-Approximation von der in (4.58) dargestellten Art in die Molekularfeld-Näherung einbezogen werden. Andererseits bedeutet diese Aussage aber auch, dass die Korrekturen der kritischen Temperatur in der ersten störungstheoretischen Ordnung (4.141) durch die starken kritischen Fluktuationen unbeeinflusst bleiben. Mit unseren Näherungen bleiben wir somit auch am kritischen Punkt noch im sicheren Bereich.

4.3.4 Diskussion der Resultate

Nach der Herleitung der kritischen Temperatur für Kontakt- und Dipol-Dipol-wechselwirkende Systeme im letzten Unterabschnitt diskutieren wir hier die Resultate am Beispiel des verdünnten Gases aus ^{52}Cr -Atomen. Weiterhin erörtern wir ausgehend von den Gleichungen (4.141) die Möglichkeiten zur Verstärkung der charakteristischen dipolaren Effekte.

Zur Veranschaulichung des Hauptergebnisses aus dem letzten Unterabschnitt (4.141) stellen wir die Korrekturen der kritischen Temperatur in allen drei extremalen Konfigurationen in Abb. 4.4 a) in Abhängigkeit der Teilchenzahl N graphisch dar. Diese N -Abhängigkeit resultiert einerseits aus dem ersten semiklassischen Korrekturterm mit seinem dominanten Effekt bei kleinen Teilchenzahlen. Andererseits skalieren die thermischen Wellenlängen λ_c aus (4.70) mit der Teilchenzahl als $\lambda_c \sim N^{1/6}$ und dominieren den Bereich großer Teilchenzahlen N . Die konkreten Werte der

Streuwellenlänge von etwa $a = 105 a_B$ mit dem Bohrschen Radius a_B , der Masse $M = 52$ a.e., der magnetischen Dipolmomente $m = 6 m_B$ und der Frequenzen $\omega_1 = 2\pi \cdot 581$ Hz, $\omega_2 = 2\pi \cdot 406$ Hz, $\omega_3 = 2\pi \cdot 138$ Hz wurden aus dem ^{52}Cr -Experiment von Griesmaier u.a. entnommen [16]. Zum Vergleich beträgt der Wert der idealen kritischen Temperatur (2.134) in der besagten Versuchsanordnung mit $N = 10^5$ Teilchen etwa $T_c = 670$ nK. Die relative Abweichung der kritischen Temperatur aufgrund des Finite-Size-Effekts liegt in etwa bei -1.8 % und die aufgrund der Delta-Wechselwirkung bei -6.4 %. Die spezifischen Effekte der Dipol-Wechselwirkung belaufen sich bei den Werten von $f(\omega_1/\omega_2, \omega_1/\omega_3) = -0.625$ für die erste, $f(\omega_2/\omega_3, \omega_2/\omega_1) = -0.110$ für die zweite und $f(\omega_3/\omega_1, \omega_3/\omega_2) = +0.735$ für die dritte Konfiguration jeweils auf -0.29 %, -0.05 % und +0.34 %. Diese Resultate sind in Abb. 4.4 a) durch die schwarzen Punkte verdeutlicht. Sie spiegeln unsere qualitativen Vermutungen am Anfang des Abschnitts 4.3 wider. Darin stellten wir fest, dass für die erste Konfiguration aus Abb. 4.2 die Dipol-Wechselwirkung eher abstoßend wirkt und den Kondensationspunkt zu niedrigen Temperaturen verschiebt. Für die dritte Konfiguration sollte demnach genau das Gegenteil eintreten. Mit diesen Vermutungen lagen wir nun in der Tat richtig, die qualitativ unentscheidbare Situation bei der zweiten Konfiguration erwies sich nun auch quantitativ als grenzwertig mit nur einer minimalen dipolaren Netto-Abweichung. Insgesamt scheinen die dipolaren Effekte für Chrom-Atome relativ schwach zu sein und, wie man aus Abb. 4.4 a) erkennt, ändern sie sich selbst bei einer Verzehnfachung der Teilchenzahl nur marginal. Welche Ansatzpunkte es gibt, einen messbaren Effekt der Dipol-Wechselwirkung auf die kritische Temperatur festzustellen, wird im Folgenden noch erörtert.

Es fällt bei einer genaueren Betrachtung der Ergebnisse (4.141) auf, dass sowohl die semiklassische Finite-Size-Korrektur der kritischen Temperatur als auch der Effekt der Delta-Wechselwirkung Konfigurations-unabhängig sind. Die Resultate unterschieden sich bei verschiedenen Konfigurationen allein durch die Beiträge der anisotropen Dipol-Wechselwirkung. Diese Tatsache kann nun dazu verwendet werden, die klare Signatur der Dipol-Wechselwirkung anhand der Differenz-Messung der kritischen Temperatur zwischen den verschiedenen Einstellungen herauszulösen. Unsere ersten Abschätzungen dieser Differenzen sind in Abb. 4.4 b) zusammengestellt. Darin sind sie in Abhängigkeit eines Parameters dargestellt, welcher nach der Beziehung $\tilde{\omega} N^{1/3} = k_B T_c^{(0)} \zeta^{1/3}(3)/\hbar$ proportional zur kritischen Temperatur und somit auch zur mittleren Teilchendichte im thermischen Gas in der Falle ist. Wie man aus Abb. 4.4 b) und den darin eingetragenen schwarzen Punkten sieht, beträgt die Temperaturdifferenz zwischen den beiden extremalen Konfigurationen (1) und (3) derzeit 0.61 % der kritischen Temperatur $T_c^{(0)}$ des idealen Gases. Diese Differenz skaliert mit dem obigen Parameter als $(\tilde{\omega} N^{1/3})^{1/2}$, so dass seine Verdopplung den dipolaren Effekt auf einen knappen Prozent vergrößern würde. Eine weitere Vergrößerung der Dichte kann allerdings ab einem gewissen Punkt durch Drei-Körper-Verlustprozesse limitiert werden.

Eine weitere Möglichkeit zur Verstärkung der dipolaren Effekte bietet sich durch die Variation der Fallen-Anisotropie an. Diese geht nämlich in den Anisotropie-Faktor $f(\kappa, \eta)$ aus (4.141) ein, der mit (4.125) bzw. (4.126) angegeben und in Abb. 4.3 a) graphisch dargestellt ist. Gehen wir nun von der Teilchenzahl $N = 10^5$ und der mittleren Frequenz $\tilde{\omega} = 2\pi \cdot 319$ Hz aus, die in der experimentellen Realisierung mit ^{52}Cr -Atomen derzeit vorliegen. Wie würden sich die Differenzen der kritischen Temperaturen ändern, wenn man lediglich die jeweiligen Frequenz-Verhältnisse

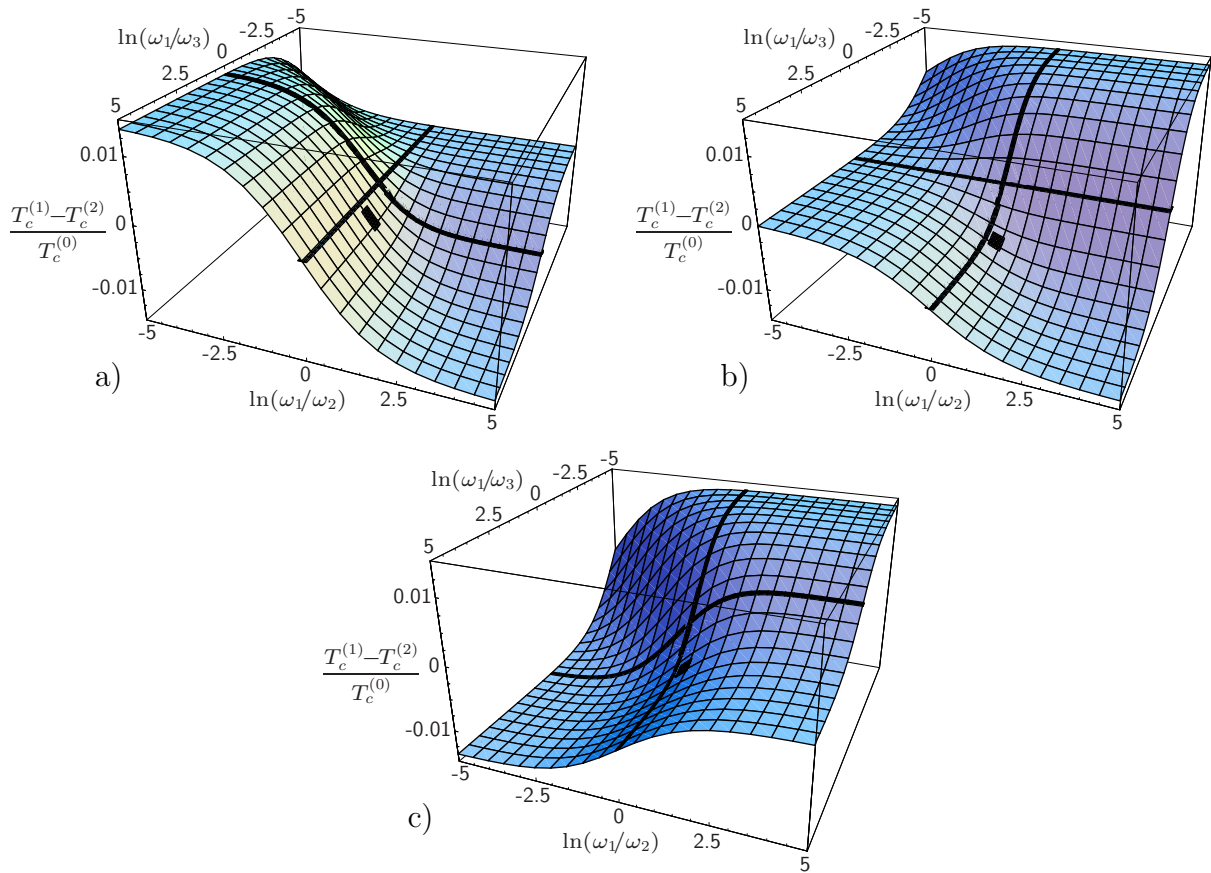


Abbildung 4.5: Relative Differenzen der kritischen Temperaturen in Konfigurationen (1), (2) und (3) aus Abb. 4.2 für die festen Teilchenzahlen $N = 10^5$ und mittleren Frequenzen $\tilde{\omega} = 2\pi \cdot 319$ Hz wie im ^{52}Cr -Experiment [16]. Alle Darstellungen sind in Abhängigkeit der beiden Anisotropie-Koeffizienten ω_1/ω_2 und ω_1/ω_3 in logarithmischer Skalierung. Schwarze Linien markieren zylindersymmetrische Konfigurationen, so dass an ihrem Kreuzungspunkt die Kugel-Symmetrie vorliegt. Die schwarzen Rauten repräsentieren die im Experiment realisierten Einstellungen. Alle Abbildungen wurden aus Ref. [47] entnommen.

verschieben würde? Die Antwort auf diese Frage ist in Abb. 4.5 zu sehen. Bei den in der experimentellen Anordnung bestehenden Anisotropien ist die Differenz der kritischen Temperaturen $T_c^{(1)} - T_c^{(3)}$ in der Tat noch am größten, aber auch sie ist noch weit vom optimalen Bereich entfernt. Das sieht man an den schwarz hervorgehobenen Rauten in jeweiligen Bildern, die in etwa die tatsächlichen Verhältnisse im Chrom-Experiment darstellen. Aus Abb. 4.5 b) erkennt man auch, dass zur weiteren Optimierung der Messung in erster Linie der Parameter ω_1/ω_2 noch etwas größer werden sollte. Dadurch würde sich ebenfalls die Differenz $T_c^{(1)} - T_c^{(2)}$ vergrößern, während $T_c^{(2)} - T_c^{(3)}$ eher geringer ausfallen würde. In der Tat sind Vergrößerungen für bestimmte Temperaturdifferenzen immer mit Verringerungen für die eine oder beide anderen verknüpft, weil die Anisotropie-Funktion an die zweite Beziehung (4.127) gebunden ist. Dieser Umstand stellt aber kein Problem dar, denn es geht darum, wenigstens eine der Differenzen zwischen zwei extremalen Einstellungen hervorzuheben. Im optimalen Bereich könnte die Temperaturdifferenz mit dem

derzeit vorliegenden Dichte-Parameter $\tilde{\omega}N^{1/3} = 9.3 \cdot 10^4$ Hz auf maximal 1.39 % der kritischen Temperatur $T_c^{(0)}$ gebracht werden, was etwas mehr als einer Verdopplung des aktuellen Wertes entspricht.

Nach der obigen Diskussion sieht man mehrere Möglichkeiten, den dipolaren Effekt auf die kritische Temperatur derart zu vergrößern, dass er für eine Messung relevant werden kann. Zum Einen ist es die Vergrößerung der Teilchendichte, zum Anderen die Optimierung der Fallen-Anisotropie. Mit beiden Effekten scheint es durchaus realistisch, den aktuellen Wert von 0.6 % auf etwa 2 % zu erhöhen. Damit kämen wir schon annähernd in den Bereich, der für die Messungen zugänglich ist. Die besten Messungen der kritischen Temperatur heutzutage wurden in der Gruppe von Aspect durchgeführt [156] und wiesen einen relativen Fehler von etwa 5 % der kritischen Temperatur des idealen Bose-Gases auf. Das ist zwar immer noch zu viel für die obigen Abschätzungen des dipolaren Effekts, man muss dabei allerdings bedenken, dass die größten Fehler systematisch sind. Dazu zählt z.B. in erster Linie die Unsicherheit der Temperatur-Kalibrierung [156]. Setzt man jedoch statt der absoluten Temperatur-Messungen auf diejenigen der Temperatur-Differenzen zwischen den verschiedenen räumlichen Konfigurationen [46,47], so dürften Kalibrierungs-Probleme auch keine Rolle spielen, weil sie alle Konfigurationen im gleichen Maß betreffen. Die restlichen statistischen Fehler liessen sich durch mehrere Wiederholungen der Experimente auf realistische 1 % senken. Die Realisierungen dieses experimentellen Vorhabens beim atomaren Chrom-Gas sind also nur die Frage der Zeit. Noch wichtiger ist aber an dieser Stelle zu bemerken, dass sich unsere Untersuchungen zur kritischen Temperatur der dipolaren Systeme keineswegs auf das Chrom-Kondensat beschränken. Wie wir bereits im Abschnitt 4.2 diskutierten, gibt es noch weitere Vertreter der dipolar-wechselwirkenden Materie, die stärkere dipolare Effekte aufweisen würden (bis Faktor 100). Zurzeit sind sie zwar noch nicht zur Kondensation gebracht worden, aber auch das ist sicherlich nur eine Frage der Zeit.

Kapitel 5

Zusammenfassung

Wir haben uns in dieser Promotionsschrift ausführlich mit theoretischen Aspekten der Bose-Einstein-Kondensation stark verdünnter Gase beschäftigt. Das Hauptinteresse galt dabei den grundsätzlichen Fragestellungen, die von der Statistik innerhalb endlicher bosonischer Systeme bei sehr tiefen Temperaturen im Hinblick auf die Kondensation der Materie in den Grundzustand aufgeworfen wurden.

Im einleitenden Kapitel 1 beschrieben wir zuerst die historischen Entwicklungen, die der experimentellen Realisierung der Bose-Einstein-Kondensation in verdünnten Gasen von Materie-Teilchen vorausgingen. Auch die dazu notwendigen experimentellen Techniken wurden darin beschrieben. Weiterhin diskutierten wir den Begriff der Kondensation in endlichen Systemen von Bosonen. Dabei stellten wir einige Befunde in ihrer theoretischen Beschreibungen innerhalb verschiedener Ensemble-Theorien vor und wiesen auf das Problem der inkompletten Äquivalenz der großkanonischen und kanonischen Ensembles in Anwesenheit des Kondensates hin.

Im Kapitel 2 beschrieben wir die thermodynamischen und statistischen Eigenschaften der idealen wechselwirkungsfreien Bose-gase aus der Sicht der großkanonischen Ensemble-Theorie. Darin leiteten wir zuerst die Bose-Einstein-Verteilung mit Hilfe feldtheoretischer Methoden her. Dieses Ergebnis wendeten wir anschließend auf das spezifische Problem der Bose-Gase in homogenen Systemen sowie in der harmonischen Falle und im Kasten-Potential an. Neben den bestimmten Merkmalen der Grundzustand-Besetzung und der Wärmekapazität, die allen Bose-Einstein-kondensierten Systemen eigen sind, wurden für diese Größen dennoch mehrere System-abhängige Besonderheiten festgestellt. Weiterhin galt unsere besondere Aufmerksamkeit dem Vergleich analytischer Resultate aus den semiklassischen Näherungen mit den numerischen Daten aus quantenmechanisch exakten Rechnungen. Die größten Unterschiede der beiden Vorgehensweisen wurden in der Nähe des kritischen Punktes festgestellt, an dem die Bose-Einstein-Kondensation in makroskopischen Maßstäben einsetzt. So wurden auch Unterschiede in den Lagen der kritischen Temperaturen selbst identifiziert, die in Abb. 2.5 b) fürs Fallen-Potential und in Abb. 2.7 für den Kasten dargestellt sind. Die analytischen Untersuchungen dazu wurden in einer kurzer Form in der Publikation [42] vorgestellt und bildeten dort eines der Hauptergebnisse. Weiterhin beschäftigten wir uns im Kapitel 2 mit den Greens-Funktionen und leiteten daraus die lokale Teilchendichte in der Falle und im Kasten ab. Zum Abschluss unserer Untersuchungen im großkanonischen Ensemble gingen wir dem

aus Literatur bekannten Problem der unphysikalisch großen Teilchenzahl-Fluktuationen nach. Dazu berechneten wir die mittlere Varianz der Teilchenzahl im Grundzustand und bestätigten diese auf den ersten Blick überraschende Tatsache.

Inwiefern die Resultate nach der großkanonischen Bose-Einstein-Verteilung überhaupt sinnvoll sind, stellten wir mit Hilfe der Rechnungen in der kanonischen Ensemble-Theorie fest. Diese wurden im Kapitel 3 präsentiert. Ausgehend von der Feynmanschen Pfadintegral-Darstellung der Viel-Teilchen-Zustände wurde hier die kanonische Zustandssumme für eine feste Zahl N der wechselwirkungsfreien Bosonen ausgewertet. Daraus lies sich weiterhin der Anteil der Teilchen im Kondensat und die Greens-Funktion in einem N -Teilchen-Ensemble bestimmen. Als erstes werten wir die kanonischen Größen in einem homogenen System wie im Buch von Feynman [43] direkt aus und finden physikalisch sinnlose Ergebnisse sowohl für die Wärmekapazität als auch für den Kondensat-Anteil in Abb. 3.3. Bereits eine leichte Korrektur des homogenen Gas-Modells mit dem explizit berücksichtigten Grundzustand ergab die gewünschten Verbesserungen der Resultate. Auch die Berechnungen im Kastenpotential wiesen keine Anomalien auf. Die entsprechenden Ergebnisse für die Wärmekapazitäten und Kondensatteilchen-Anteile wurden in der kürzlich erschienenen Publikation [42] veröffentlicht. Durch den Vergleich der kanonischen Resultate mit denjenigen aus den großkanonischen Rechnungen wurden insbesondere für große Teilchenzahlen keine nennenswerte Abweichungen weder im Kastenpotential noch in der harmonischen Falle gefunden. Trotzdem besteht kein trivialer Zusammenhang zwischen den großkanonischen und kanonischen Ensembles. So führten Untersuchungen der Teilchenzahl-Fluktuation im Grundzustand zu einer offensichtlichen Diskrepanz zwischen den beiden Ensembles. Außerdem ergaben sich im Temperaturbereich unterhalb des kritischen Wertes vollkommen verschiedene Teilchenzahl-Statistiken. Kanonische Resultate zeigten dabei im Gegensatz zu großkanonischen Erwartungen ein physikalisch sinnvolles Verhalten. Da auch die Energie-Fluktuationen in kanonischen Ensembles keine Anomalien aufwiesen, schloßen wir das Kapitel 3 mit der Feststellung ab, dass die Beschreibungen dieser Theorie sogar für abgeschlossene Systeme mit einer fest vorgegebenen Energie noch adäquat sind.

Nach den gerade geschilderten Darstellungen der grundsätzlichen Fragen der Bose-Einstein-Kondensation in idealen Bose-Gasen wendeten wir im Kapitel 4 unsere Aufmerksamkeit dem Problem schwach wechselwirkender bosonischer Systeme zu. Dabei beschränkten wir uns auf die störungstheoretische Behandlung des Problems mit anschließender Resummation der Ausdrücke mit Hilfe der so genannten Selbstenergie-Renormierung. In unserer Darstellung griffen wir verstärkt auf die Feynman-diagrammatische Technik zurück, die in unseren Publikationen [44,45] entwickelt wurde. Wie wir weiterhin zeigten, führte unsere Vorgehensweise unter Berücksichtigung der störungstheoretischen Ausdrücke bis zur ersten Ordnung auf die Hartree-Fock-artige Molekularfeld-Näherung. Außerdem diskutierten wir verschiedene Wechselwirkungen, die in verdünnten Bose-Gasen bei tiefen Temperaturen im Kondensationsbereich vorliegen. Die Pseudo-Potential-Methode zur Beschreibung kontakt-wechselwirkender Bosonen und die Wechselwirkung zwischen den dipolaren Gasteilchen wurden erörtert. Als konkretes Beispiel berechneten wir anschließend den analytischen Ausdruck für die kritische Temperatur in einer harmonischen Falle für dipolar-wechselwirkende Bose-Gasen. Insbesondere interessant war in diesem Zusammenhang der Einfluss der Fallen-Anisotropie auf die Ergebnisse. Dieser Einfluss war nämlich charakteristisch für die ebenfalls ani-

sotrope Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Aus diesem Grund diente er uns als die Grundlage für die in Publikationen [46,47] vorgeschlagene Methode, die Signatur der dipolaren Effekte in thermodynamischen Größen auch experimentell nachzuweisen.

Anhang A

Poissonsche Summen-Formel

In diesem Abschnitt leiten wir die so genannte Poissonsche Summen-Formel ab. Sie ist sowohl für Berechnungen der Greenschen Funktion und des großkanonischen Potentials in den Abschnitten 2.1.3 und 2.1.4, als auch für die Dualitäts-Transformation im Kastenpotential in den Abschnitten 2.4.1 und 3.2.2 von immenser Bedeutung.

Zu Beginn definieren wir die periodisch fortgesetzte Delta-Funktion, welche zuweilen auch als die Kamm-Funktion bezeichnet wird:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) \equiv \delta^{(p)}(x) . \quad (\text{A.1})$$

Aufgrund ihrer Periodizität lässt sie sich in eine Fourier-Reihe entsprechend der Beziehung

$$\delta^{(p)}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta_n^{(p)} e^{2\pi i n x} \quad (\text{A.2})$$

zerlegen. Die Fourier-Koeffizienten $\delta_n^{(p)}$ folgen aus der direkt verifizierbaren Identität

$$\delta_m^{(p)} = \int_{-1/2}^{1/2} dx e^{-2\pi i m x} \delta^{(p)}(x) . \quad (\text{A.3})$$

Aufgrund der zu (2.40) analogen Beziehung

$$\int_{-1/2}^{1/2} dx e^{2\pi i (m-n)x} = \delta_{n,m} \quad (\text{A.4})$$

ergibt sich aus (A.3) der m -unabhängige Fourier-Koeffizient $\delta_m^{(p)} = 1$ und somit auch die Fourier-Zerlegung (A.2) der Kamm-Funktion (A.1):

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n x} . \quad (\text{A.5})$$

Damit sind wir nun auch in der Lage, die diskrete Summe über jede an den ganzzahligen Stützstellen stetige Funktion f in einer etwas anderen Form zu schreiben:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) f(x) . \quad (\text{A.6})$$

Nach Einsetzen der Umformung (A.5) und Vertauschung der Summe mit dem Integral erhalten wir

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{2\pi i n x} . \quad (\text{A.7})$$

Diese Beziehung stellt nun die gesuchte Poissonsche Summen-Formel dar, mit deren Hilfe wir duale Formen für bestimmte Reihen erhalten.

Anhang B

Robinsonsche Entwicklungs-Formeln

In diesem Abschnitt leiten wir die Regeln her, die im Kapitel 2 für Entwicklungen der polylogarithmischen Funktionen

$$\zeta_\nu(e^{-x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nx}}{n^\nu} \quad (\text{B.1})$$

nach dem Kleinheits-Parameter $x > 0$ notwendig sind. Dieses Problem stellt insofern kein triviales Problem dar, als dass die naive Entwicklung der Exponentialfunktion und die Vertauschung der beiden Reihen auf das Resultat

$$\zeta_\nu(e^{-x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{n^k}{n^\nu} \frac{(-x)^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(\nu - k) \quad (\text{B.2})$$

mit der Riemannschen Zeta-Funktion $\zeta(\nu - k)$ aus (2.100) führt. Diese letzte Gleichung hat offensichtlich nur einen eingeschränkten Gültigkeitsbereich, denn für $\nu < 1$ erwarten wir für sehr kleine x -Werte eine Divergenz auf der linken Seite, während die rechte Seite eine konvergente Reihe darstellt, vorausgesetzt die Riemannschen Zeta-Funktionen darin werden im analytisch-fortgesetzten Sinne verstanden. Für den Fall $\nu = 1$ besitzt der Ausdruck auf der rechten Seite von (B.2) sogar eine explizite $\zeta(1)$ -Singularität, welche durch die analytische Fortsetzung nicht zu beheben ist. Eine ähnliche Situation tritt bei allen positiven ganzzahligen Werten von ν auf, auch wenn das nicht die Terme der führenden Ordnung in x betrifft. Bei einer genaueren Untersuchung findet man in der Tat für alle ν -Werte eine Beziehung zwischen der polylogarithmischen Funktion (B.1) und den fortgesetzten Riemann-Funktionen, die sich aber für viele wichtige Spezialfälle von der naiven Version (B.2) unterscheidet. Um genau diese zuerst von Robinson hergeleitete Beziehung [53] geht es in der folgenden Diskussion.

Als Ausgangspunkt für weitere Ausführungen dient uns die so genannte Mellin-Transformation [161]. Die entsprechend transformierte Funktion ergibt sich aus

$$\mathcal{M}[f](s) \equiv \int_0^\infty dx f(x) x^{s-1} \quad (\text{B.3})$$

und lautet für den Spezialfall der polylogarithmischen Funktion

$$\mathcal{M}[\zeta_\nu](s) = \Gamma(s) \zeta(\nu + s) . \quad (\text{B.4})$$

Die ursprüngliche Funktion erhält man daraus nach der Rücktransformations-Vorschrift

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} ds \mathcal{M}[f](s) x^{-s} , \quad (\text{B.5})$$

wobei der Integrationsweg \mathcal{C} zuerst rechts von allen Polstellen parallel der imaginären Achse verläuft und dann die linke Halbebene im Uhrzeigersinn einschließt. Somit lautet die polylogarithmische Funktion

$$\zeta_{\nu}(e^{-x}) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} ds \Gamma(s) \zeta(\nu + s) x^{-s} . \quad (\text{B.6})$$

Die explizite Berechnung des Integrals beläuft sich auf die Auswertung der Residuen an den jeweiligen Polstellen des Integrandes. Im vorliegenden Fall gibt es einerseits eine Polstelle bei $\nu + s = 1$, die von der Riemannschen Zeta-Funktion herrührt und sich für kleine ϵ als

$$\zeta(1 + \epsilon) = \frac{1}{\epsilon} + \gamma + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (\text{B.7})$$

spezifizieren lässt [162], wobei $\gamma \approx 0.5772$ die Euler-Mascheroni-Konstante darstellt. Andererseits besitzen die Gamma-Funktionen in (B.6) ihre Polstellen bei allen nicht positiven ganzzahligen Werten und haben die Form [50, Kapitel 8]

$$\Gamma(-k + \epsilon) = \frac{(-1)^k}{k!} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \gamma + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n} + \mathcal{O}(\epsilon) \right\} . \quad (\text{B.8})$$

Beschränken wir uns nun zuerst auf den Fall $\nu < 1$, so befinden sich alle Polstellen der Gamma-Funktion links von der Polstelle $s = 1 - \nu$ der Zeta-Funktion und somit sind alle Polstellen einfach. Das Problem (B.6) reduziert sich dabei auf

$$\zeta_{\nu}(e^{-x}) = \Gamma(1 - \nu) x^{\nu-1} \underset{s=1-\nu}{\text{Res}} \zeta(\nu + s) + \sum_{k=0}^{\infty} x^k \zeta(\nu - k) \underset{s=-k}{\text{Res}} \Gamma(s) . \quad (\text{B.9})$$

Das Residuum der Zeta-Funktion lässt sich unmittelbar aus (B.7) zu $\text{Res}_{s=1-\nu} \zeta(\nu + s) = 1$ bestimmen. Die Residuen der Gamma-Funktionen ergeben sich aus (B.8) zu $\text{Res}_{s=-k} \Gamma(s) = (-1)^k / k!$. Somit erhalten wir die gesuchte Entwicklung der polylogarithmischen Funktion für den Fall $\nu < 1$:

$$\zeta_{\nu}(e^{-x}) = \Gamma(1 - \nu) x^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(\nu - k) . \quad (\text{B.10})$$

Vergleicht man diese Beziehung mit der naiven Formel (B.2), so fällt einem die Ähnlichkeit auf, die aber aufgrund des ersten Zusatzterms unvollständig ist. Genau dieser Zusatzterm beschreibt in dem betreffenden Bereich die Divergenz der polylogarithmischen Funktion für kleine x -Werte.

Ein weiterer wichtiger Spezialfall tritt bei $\nu = 1$ auf. Hierbei trifft die Polstelle der Zeta-Funktion $s = 0$ die erste Polstelle der Gamma-Funktion, und wir haben einen Doppelpol vorliegen. Die polylogarithmische Funktion (B.6) kann auch für diesen Fall in Analogie zu (B.9) als

$$\zeta_1(e^{-x}) = \underset{s=0}{\text{Res}} \left[\Gamma(s) \zeta(1 + s) x^s \right] + \sum_{k=1}^{\infty} x^k \zeta(1 - k) \underset{s=-k}{\text{Res}} \Gamma(s) \quad (\text{B.11})$$

ausgedrückt werden. Das Residuum an der doppelten Polstelle $s = 0$ ist entsprechend der Gleichung [163, (3.4.8)]

$$\operatorname{Res}_{s=0} \left[\Gamma(s) \zeta(1+s) x^{-s} \right] = \frac{\partial}{\partial s} \left[s^2 \Gamma(s) \zeta(1+s) x^{-s} \right]_{s=0} \quad (\text{B.12})$$

auszuwerten. Mit den Entwicklungen (B.7) und (B.8) für $\epsilon = s$ ergibt sich dieses Residuum zu

$$\operatorname{Res}_{s=0} \left[\Gamma(s) \zeta(1+s) x^{-s} \right] = -\ln x . \quad (\text{B.13})$$

Die restlichen Polstellen bei $s = -k$ sind einfach, und die Residuen liefern nach wie vor $(-1)^k/k!$, so dass sich aus (B.11) die endgültige Form

$$\zeta_1(e^{-x}) = -\ln x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(1-k) \quad (\text{B.14})$$

ergibt. Auch sie unterscheidet sich deutlich von (B.2) durch den ersten logarithmischen Term, der anstelle des x -unabhängigen $k = 0$ -Summandes auftritt.

Für die weiteren wichtigen Fälle mit natürlichen Argumenten $\nu = n \geq 2$ gibt es im Integranden von (B.6) immer doppelte Polstellen bei $s = 1 - n$. Die Integrale (B.6) werden dann in Analogie zum gerade betrachteten Fall $\nu = 1$ ausgewertet und liefern z.B. für $\nu = 2$

$$\zeta_2(e^{-x}) = \zeta(2) - x [1 - \ln x] + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(2-k) \quad (\text{B.15})$$

und für $\nu = 3$

$$\zeta_3(e^{-x}) = \zeta(3) - x \zeta(2) + \frac{x^2}{2} \left[\frac{3}{2} - \ln x \right] + \sum_{k=3}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(3-k) . \quad (\text{B.16})$$

Die Gleichungen (B.14)–(B.16) und ihre Verallgemeinerungen für alle positiven ganzzahligen ν -Werte setzen die Beziehung (B.10) auf den besagten Wertebereich fort. Für alle nicht ganzzahligen Werte von ν kann (B.10) weiterhin direkt übernommen werden, weil sie ohne Beschränkung der Allgemeinheit überall dort gilt, wo nur einfache Polstellen des Integrands aus (B.6) vorliegen. Das gilt für $\nu < 1$ immer und für $\nu > 1$ fast überall bis auf die ganzzahligen Werte.

Anhang C

Numerische Auswertung der kanonischen Rekursion

In diesem Abschnitt beschreiben wir Probleme der praktischen Auswertung der Rekursionsbeziehung für kanonische Zustandssummen

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Z_1(n\beta) Z_{N-n}^B(\beta) \quad (\text{C.1})$$

ausgehend von dem Rekursionsanfang $Z_N^B(\beta) = 1$. Die darin vorkommenden Ein-Teilchen-Zustandssummen $Z_1(n\beta)$ stellen die Spektral-Summen aus (3.45)

$$Z_1(n\beta) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-n\beta E_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C.2})$$

dar. Die Gleichung (C.1) war eines der Hauptergebnisse in den kanonischen Untersuchungen im Abschnitt 3.1 und ergab bosonische N -Teilchen-Zustandssummen, die zur Bestimmung der Grundzustandsbesetzung (3.81) und der Wärmekapazität (3.120) weiterverwendet wurden.

Zur Auswertung der Beziehung (C.1) für große Teilchenzahlen N hat sich das Computer-Algebra-Programm “Mathematica” als wenig hilfreich herausgestellt. Die in (C.1) vorkommenden Operationen beinhalten lediglich die trivialen Multiplikationen und Additionen der Zahlen, da es aber sehr viele solcher gibt, bedarf es großer Speicher-Kapazitäten und einer schnellen Ausführung der wenigen Rechen-Grundregeln. Gerade für solche Aufgabefelder scheinen z.B. die gewöhnlichen Computer-Programme prädestiniert zu sein. Doch bevor wir hier eine “C++”-Routine präsentieren, müssen wir die möglichen numerischen Fehlerquellen umgehen. Das ist das Hauptziel der weiteren Darstellung.

Für niedrige Temperaturen ($\beta \rightarrow \infty$) spielt der energetische Grundzustand E_0 für die Ein-Teilchen-Zustandssumme (C.2) die dominierende Rolle. Da dieser in quantenmechanisch exakten Rechnungen nicht verschwindet, resultieren daraus für genügend tiefe Temperaturen extrem kleine Z_1 -Werte. Diese kleinen Zahlen potenzieren sich durch die Rekursion und stellen einen Computer vor unüberwindbare Probleme. Als konkretes Zahlenbeispiel betrachten wir das Problem im Kästenpotential aus Abschnitt 3.2.2, in dem sich eine relativ kleine Zahl $N = 100$ von Teilchen bei

einer Temperatur von $T = 0.01 T_c^{(0)}$ befindet. Die Zustandssumme ergibt sich in diesem Fall zu $\sim e^{-2075}$. Für $N = 1000$ bei derselben relativen Temperatur erniedrigt sich dieser ohnehin extrem kleine Wert auf $\sim e^{-4470}$. Dennoch kann diese Schwierigkeit im Tieftemperatur-Bereich von vorn herein eliminiert werden, wenn man die reduzierten Zustandssummen

$$\tilde{Z}_1(n\beta) \equiv e^{n\beta E_G} Z_1(n\beta) \quad , \quad \tilde{Z}_N^B(\beta) \equiv e^{N\beta E_G} Z_N^B(\beta) \quad (C.3)$$

verwendet und statt der Rekursion (C.1) die analoge Beziehung

$$\tilde{Z}_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \tilde{Z}_1(n\beta) \tilde{Z}_{N-n}^B(\beta) \quad (C.4)$$

zwischen diesen reduzierten Größen ausgewertet. Der Unterschied zur ursprünglichen Version besteht hierbei darin, dass die Bausteine dieser Rekursion $\tilde{Z}_1(n\beta)$ für verschwindende Temperaturen gegen eins konvergieren und somit nicht zum Problem der unhandlich niedrigen Werte für die Größe $\tilde{Z}_N^B(\beta)$ führen. Die kanonische Grundzustandsbesetzung (3.81) ändert sich durch diese Umskalierung der Zustandssumme nicht, wenn man statt des Grundzustand-Beitrags (3.64) die reduzierte Größe

$$\tilde{\gamma}_n(\beta) \equiv e^{n\beta E_G} \gamma_n(\beta) = 1 \quad (C.5)$$

verwendet. Die Beziehung (3.81) reduziert sich dadurch auf die analoge Gleichung

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \frac{\tilde{Z}_{N-n}^B(\beta)}{\tilde{Z}_N^B(\beta)} \quad (C.6)$$

Die Wärmekapazität (3.120) wird durch die Umskalierung (C.3) nicht beeinflusst, weil sich der darin enthaltene Term $T \ln Z_N^B$ von seinem reduzierten Gegenstück $T \ln \tilde{Z}_N^B$ nur durch die Temperatur-unabhängige Grundzustands-Energie E_G unterscheidet. Durch die in (3.120) vorkommende zweifache T -Ableitung ändert sich dann durch einen konstanten Zusatzterm nichts.

Ein weiteres Problem tritt bei der numerischen Umsetzung der Rekursion (C.4) auf, wenn man in den Hochtemperatur-Bereich kommt. Dann gibt es nämlich in einem N -Teilchen-Ensemble N Ein-Teilchen-Zustandssummen $Z_1(n\beta)$ von verschiedenen Größen. So stellt man generell fest, dass $Z_1(n\beta)$ eine monoton abfallende Funktion der Zykluslänge n ist, was zum Ausdruck bringt, dass die kurzen Zyklen wahrscheinlicher sind als die langen. Die Beiträge mit unterschiedlichen Zykluslängen tauchen in der Rekursion in einer sehr gemischten Form auf und verursachen somit große Rechenfehler. Dieses Problem ist eher buchhalterischer Natur und wurde in Ref. [73] erfolgreich bewältigt. Die Lösung besteht in der Ausnutzung des multiplikativen Charakters einer Zustandssumme. Der Beitrag jedes zusätzlichen Teilchens wird nämlich mit dem Beitrag aller anderen bereits vorhandenen Teilchen multipliziert. Daher empfiehlt es sich, die komplette N -Teilchen-Zustandssumme entsprechend der Beziehung

$$\tilde{Z}_N^B(\beta) \equiv \prod_{k=1}^N \eta_k(\beta) \quad (C.7)$$

zu faktorisieren. Die einzelnen Faktoren erfüllen dann die Rekursions-Relation

$$\eta_k(\beta) = \frac{1}{k} \left\{ \tilde{Z}_1(\beta) + \sum_{m=2}^k \tilde{Z}_1(m\beta) \prod_{n=1}^{m-1} \frac{1}{\eta_{k-n}(\beta)} \right\}, \quad (\text{C.8})$$

die wir aus einer adäquaten Umschreibung von (C.4) erhalten. Diese Faktoren η_k sind alle größer als eins und fallen in etwa exponentiell schnell mit dem Parameter k ab.

Die Wärmekapazität (3.120) ergibt sich mit der Zerlegung (C.7) aus der Gleichung

$$C_N^B = k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left\{ T \sum_{k=1}^N \ln \eta_k(T) \right\}. \quad (\text{C.9})$$

Der Vorteil dieser Schreibweise gegenüber der ursprünglichen liegt auf der Hand. Da die Summe aus N Logarithmen viel genauer auszuwerten ist, als das Logarithmus eines N -fachen Produktes, für welches \tilde{Z}_N^B steht, zumal letzteres extrem groß sein kann. Die Grundzustand-Besetzung (C.6) schreibt sich nach der Zerlegung (C.7) als

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \prod_{k=1}^n \frac{1}{\eta_{N+1-k}(\beta)}. \quad (\text{C.10})$$

Die ersten n -Summanden spielen in dieser Schreibweise die dominante Rolle, weil für die ansteigenden n 's die η -Faktoren mit immer niedrigeren Indizes im Nenner auftauchen und somit die entsprechenden Beiträge immer stärker unterdrücken. Die kompletten Viel-Teilchen-Zustandssummen müssen dabei nicht exakt bestimmt werden, wie das in der Original-Fassung (C.6) noch der Fall war. Genau aus diesem Grunde ist die Formulierung (C.10) gegenüber (C.6) vorzuziehen.

Des Weiteren präsentieren wir das konkrete Beispiel der Berechnung von der Grundzustand-Besetzung nach (C.10) für ein ideales Bose-Gas aus N Teilchen im Kastepotential (2.171). Die Spektral-Zerlegung der reduzierten Ein-Teilchen-Zustandssumme aus (C.2) mit (C.3) lautet für diesen Fall in Analogie zu (3.139)

$$\tilde{Z}_1(n/\tau) = \left\{ e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right\}^3 \quad (\text{C.11})$$

mit dem dimensionslosen Temperatur-Parameter aus (2.178) bzw. (3.117)

$$\tau \equiv \frac{MV^{2/3}}{2\pi\hbar^2\beta} = \left[\frac{N}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \frac{T}{T_c^{(0)}} \quad (\text{C.12})$$

im Tieftemperatur-Bereich einerseits. Andererseits lautet sie im Hochtemperatur-Bereich entsprechend der Dualitäts-Umformung (3.143)

$$\tilde{Z}_1(n/\tau) = e^{3n\pi/4\tau} \left\{ \sqrt{\frac{\tau}{n}} - \frac{1}{2} + 2 \sqrt{\frac{\tau}{n}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-4\tau\pi m^2/n} \right\}^3. \quad (\text{C.13})$$

Das Kriterium dafür, wann der Tieftemperatur-Bereich, wo die Reihe aus (C.11) schnell konvergiert, in den Hochtemperatur-Bereich übergeht, wo das die Reihe aus (C.13) tut, haben wir

bereits im Abschnitt 2.4.2 gefunden. Darin konnten wir aus Abb. 2.8 den Übergangswert mit $0.2 < \tau/n < 0.5$ abschätzen und beschränken uns weiterhin z.B. auf $\tau = 0.3n$. Nach diesen Vorbemerkungen sind wir nun in der Lage, das Vorhaben in einem Computer-Programm umzusetzen, das in C-Code (mit C++-Ausgangsmodus) geschrieben ist.

Im Hauptprogramm werden die Werte der Grundzustands-Teilchenzahl in einem Ensemble aus beispielsweise $N = 1000$ Teilchen für verschiedene Temperaturwerte $t = T/T_c^{(0)} \in [0.01; 2.00]$ in die Ausgabe-Datei geschrieben. Ihre eigentliche Berechnung wird im Unterprogramm "Nkond" ausgeführt. Dabei bestimmen wir zuerst die Ein-Teilchen-Zustandssummen $Z_1(n/\tau)$ für alle $n = 1, 2, \dots, N$, wobei wir für $\tau < 0.3n$ nach der Gleichung (C.11) und sonst nach (C.13) vorgehen und die jeweiligen Reihen nach den ersten $m \leq 5$ Summanden abbrechen. Im zweiten Teil des Unterprogramms berechnen wir die einzelnen Faktoren η_k für alle $k = 1, 2, \dots, N$ nach (C.8) und im dritten Teil bestimmen wir aus ihnen schließlich die mittleren Teilchenzahlen im Grundzustand nach (C.10). Dieses nachfolgend dargestellte einfache Programm braucht auf den zurzeit handelsüblichen Rechner für die Auswertung mit $N = 1000$ Teilchen etwa zwei Sekunden und mit $N = 10000$ Teilchen etwa zwei Minuten. Die Resultate für Teilchenzahlen $N = 10, 100$ und 1000 sind in Abb. 3.7 a) und b) zu sehen. Für Berechnungen weiterer Größen wie z.B. der Wärmekapazität aus Abb. 3.6 oder auch für Ergebnisse in anderen Potentialen aus dem gesamten Abschnitt 3.2 werden ähnliche Programme verwendet, die wir hier aber aus Platzgründen nicht vorstellen.

```

/*          PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER ANTEILE KONDENSIRTER TEILCHEN          */
/*          IM KANONISCHEN ENSEMBLE IM KASTENPOTENTIAL                        */
using namespace std;
#include<iostream>
#include<math.h>
#include<fstream>

ofstream mycout("Kond1000kast-mat.dat") ;                               //Ausgabe-Datei
const int N = 1000 ;                                                    //Teilchenzahl
const double eps = 0.01 ;                                               //Schrittweite
const double zeta = 2.61238 ;                                           //Zeta(3/2)
const double Pi = 3.14159 ;
const double c = pow(N/zeta,0.666667) ;                                  //Umrechnungsfaktor von t zu tau
/*~~~~~Hauptprogramm~~~~~*/
int main()
{ double t ;
  double Nkond(double) ;                                               //Definition des Unterprogramms
  /*~~~~~Ausgabe der Daten zum Kondensat-Anteil~~~~~*/
  mycout <<"{0.0,1.0}" ;
  for ( t = 0.01 ; t <= 2.00 ; t = t + eps )
    { mycout <<","<< t <<","<< Nkond(t)/N <<"}" ; } ;
  mycout <<"}" ;
}

```

```

/*~~~~~Unterprogramm zur Berechnung der Kondensat-Teilchenzahl~~~~~*/
double Nkond(double t)
{ int k,m ;
  double tau,fakt,expo,sum,prod,N0 ;
  double Z1[N+1],eta[N+1] ;
      /*~~~~~Werte der 1-Teilchen-Zustandssummen~~~~~*/
tau = t*c ;
for ( k = 1 ; k <= N ; k++ )
  { if (tau < 0.3*k)                                     //Tieftemperatur-Bereich
    { fakt = 0.0 ;
      for ( m = 1 ; m <= 5 ; m++ )
        { expo = 0.25*Pi*(m*m - 1)*k/tau ; fakt = fakt + exp(-expo) ; }
      Z1[k] = fakt*fakt*fakt ;
    }
  else                                               //Hochtemperatur-Bereich
    { sum = 0.0 ;
      for ( m = 1 ; m <= 5 ; m++ )
        { expo = 4.0*Pi*m*m*tau/k ; sum = sum + exp(-expo) ; }
      fakt = sqrt(tau/k)*(2*sum + 1) - 0.5 ;
      Z1[k] = exp(0.75*k*Pi/tau)*fakt*fakt*fakt ;
    }
  }
      /*~Werte der Faktoren eta zur N-Teilchen-Zustandssumme~*/
for ( k = 1 ; k <= N ; k++ )
  { sum = 0.0 ; prod = 1.0 ;
    for ( m = 2 ; m <= k ; m++ )
      { prod = prod/eta[k+1-m] ; sum = sum + Z1[m]*prod ; }
    eta[k] = (Z1[1] + sum)/k ;
  }
      /*~~~~~Zahl der Kondensat-Teilchen~~~~~*/
N0 = 0.0 ;
prod = 1.0 ;
for ( k = 1 ; k <= N ; k++ )
  { prod = prod/eta[N+1-k] ; N0 = N0 + prod ; }
return N0 ;                                           //Ausgabe des Resultats ins Hauptprogramm
}

```


Literaturverzeichnis

- [1] S. N. Bose, *Planks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Z. Phys. **26**, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss., 261 (1924); zweite Abhandlung (1925).
- [3] W. Pauli, *The Connection Between Spin and Statistics*, Phys. Rev. **58**, 716 (1940).
- [4] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [5] J. L. Lin und J. P. Wolfe, *Bose-Einstein Condensation of Paraexcitons in Stressed Cu₂O*, Phys. Rev. Lett. **71**, 1222 (1993).
- [6] O. Yamamoto, *Semiconductor Physics: Half-Matter, Half-Light Amplifier*, Nature **405**, 629 (2000).
- [7] O. V. Misochko, M. Hase, K. Ishioka und M. Kitajama, *Transient Bose-Einstein Condensation of Phonons*, Phys. Lett. A **321**, 381 (2004).
- [8] S. O. Demokritov, V. E. Demidov, O. Dzyapko, G. A. Melkov, A. A. Serga, B. Hillebrands und A. N. Slavin, *Bose-Einstein Condensation of Quasi-Equilibrium Magnons at Room Temperature Under Pumping*, Nature **443**, 430 (2006).
- [9] C. E. Hecht, *The Possible Superfluid Behaviour of Hydrogen Atom Gases and Liquids*, Physica **25**, 1159 (1959).
- [10] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wiemann und E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [11] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [12] C. Bradley, C. Sackett, J. Tollett und R. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [13] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H. -C. Nägerl und R. Grimm, *Bose-Einstein Condensation of Cesium*, Science **299**, 232 (2003).

- [14] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner und T. J. Greytak, *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [15] Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki und Y. Takahashi, *Spin-Singlet Bose-Einstein Condensation of Two-Electron Atoms*, Phys. Rev. Lett. **91**, 040404 (2003).
- [16] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler und T. Pfau, *Bose-Einstein Condensation of Chromium*, Phys. Rev. Lett. **94**, 160401 (2005).
- [17] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C. I. Westbrook und A. Aspect, *A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms*, Science **292**, 461 (2001).
- [18] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. -J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Observation of Interference Between Two Bose Condensates*, Science **275**, 637 (1997).
- [19] M. O. Mewes, M. R. Andrews, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend und W. Ketterle, *Output Coupler for Bose-Einstein Condensed Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [20] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels und W. Ketterle, *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*, Science **292**, 476 (2001).
- [21] V. Bretin, S. Stock, Y. Seurin und J. Dalibard, *Fast Rotation of a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **92**, 050403 (2004).
- [22] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch und I. Bloch, *Quantum Phase Transition from a Superfluid to a Mott Insulator in a Gas of Ultracold Atoms*, Nature **415**, 39 (2002).
- [23] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl und T. Esslinger, *Exciting Collective Oscillations in a Trapped 1D Gas*, Phys. Rev. Lett. **91**, 250402 (2003).
- [24] M. D. Girardeau, *Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension*, J. Math. Phys. **1**, 516 (1960).
- [25] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn und W. Ketterle, *Observation of Feshbach Resonances in a Bose-Einstein Condensate*, Nature **392**, 151 (1998).
- [26] M. Greiner, C. A. Regal und D. S. Jin, *Emergence of a Molecular Bose-Einstein Condensate from a Fermi Gas*, Nature **424**, 47 (2003).
- [27] E. A. Cornell, J. R. Ensher und C. E. Wiemann, *Experiments in Dilute Atomic Bose-Einstein Condensation*, cond-mat/9903109 (1999).
- [28] W. Ketterle, D. S. Durfee und D. M. Stamper-Kurn, *Making, Probing and Understanding Bose-Einstein Condensates*, cond-mat/9904034 (1999).

- [29] H. F. Hess, D. A. Bell, G. P. Kochanski, R. W. Cline, D. Kleppner und T. J. Greytak, *Observation of Three-Body Recombination in Spin-Polarized Hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **51**, 483 (1983).
- [30] J. V. Prodan, W. D. Philips und H. Metcalf, *Laser Production of a Very Slow Monoenergetic Atomic Beam*, Phys. Rev. Lett. **49**, 1149 (1982).
- [31] S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable und A. Ashkin, *Three-Dimensional Viscous Confinement and Cooling of Atoms by Resonance Radiation Pressure*, Phys. Rev. Lett. **55**, 48 (1985).
- [32] J. Dalibard und C. Cohen-Tannoudji, *Dressed-Atom Approach to Atomic Motion in Laser Light: the Dipol Force Revisited*, J. Opt. Soc. Am. B **2**, 1707 (1985).
- [33] A. L. Migdal, J. V. Prodan und W. D. Philips, *First Observation of Magnetically Trapped Neutral Atoms*, Phys. Rev. Lett. **54**, 2596 (1985).
- [34] H. F. Hess, *Evaporative Cooling of Magnetically Trapped and Compressed Spin-Polarized Hydrogen*, Phys. Rev. B **34**, 3476 (1986).
- [35] E. A. Cornell und C. E. Wieman, *Nobel Lecture: Bose-Einstein Condensation in a Dilute Gas, the First 70 Years and Some Recent Experiments* Rev. Mod. Phys. **74**, 875 (2002).
- [36] D. J. Han, R. H. Wynar, P. Courteille und D. J. Heinzen, *Bose-Einstein Condensation of Large Numbers of Atoms in a Magnetic Time-Averaged Orbiting Potential Trap*, Phys. Rev. A **57**, 4114 (1998).
- [37] A. E. Leanhardt, T. A. Pasquini, M. Saba, A. Schirotzek, Y. Shin, D. Kielpinski, D. E. Pritchard und W. Ketterle, *Cooling Bose-Einstein Condensates Below 500 Picokelvin*, Science **301**, 1513 (2003).
- [38] R. van Roijen, J.J. Berkhout, S. Jaakkola und J. T. M. Walraven, *Experiments with Atomic Hydrogen in a Magnetic Trapping Field*, Phys. Rev. Lett. **61**, 931 (1988).
- [39] A. Kastler, *Optical Orientation of Atoms and its Applications*, J. Phys. et le Radium **11**, 255 (1950).
- [40] M. Fattori, T. Koch, S. Goetz, A. Griesmaier, S. Hensler, J. Stuhler und T. Pfau, *Demagnetization cooling of a gas*, Nature Physics **2**, 765 (2006).
- [41] C. S. Adams, H. J. Lee, N. Davidson, M. Kasevich und S. Chu, *Evaporative Cooling in a Crossed Dipole Trap*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3577 (1995).
- [42] K. Glaum, H. Kleinert und A. Pelster, *Condensation of Ideal Bose Gas Confined in a Box within a Canonical Ensemble*, Phys. Rev. A **76**, 063604 (2007).
- [43] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Benjamin, Reading, 1972).

- [44] A. Pelster und K. Glaum, *Many-Body Vacuum Diagrams and their Recursive Graphical Construction*, Phys. Stat. Solidi B **237**, 72 (2003).
- [45] A. Pelster und K. Glaum, *Recursive Graphical Solution of Closed Schwinger-Dyson Equations in ϕ^4 -Theory – Generation of Connected and One-Particle Irreducible Feynman Diagrams*, Physica A **335**, 455 (2004).
- [46] K. Glaum, A. Pelster, H. Kleinert und T. Pfau, *Critical Temperature of Weakly Interacting Dipolar Condensates*, Phys. Rev. Lett. **98**, 080407 (2007).
- [47] K. Glaum und A. Pelster, *Bose-Einstein Condensation Temperature of Dipolar Gas in Anisotropic Harmonic Trap*, Phys. Rev. A **76**, 023604 (2007).
- [48] J. W. Negele und H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, New York, 1988).
- [49] S. F. Edwards und P. W. Anderson, *Theory of Spin Glasses*, J. Phys. France **5**, 965 (1975).
- [50] H. Kleinert und V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of ϕ^4 -Theories* (World Scientific, Singapore, 2001).
- [51] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, 4th ed. (World Scientific, Singapore, 2006).
- [52] H. Kleinert, ebendort im Kapitel 8. In gekrümmten Räumen verliert die Operation der Normalordnung ihre Bedeutung. Der absolute Wert der Energie spielt dabei eine wichtige Rolle.
- [53] J. E. Robinson, *Note on the Bose-Einstein Integral Functions*, Phys. Rev. **83**, 678 (1951).
- [54] C. J. Pethick und H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge Univ. Press, 2002).
- [55] M. Abramowitz und I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [56] G. 't Hooft und M. Veltman, *Regularization and Renormalization of Gauge Fields*, Nucl. Phys. B **44**, 189 (1972).
- [57] B. Klünder, *Superfluide Eigenschaften ungeordneter Bosonen*, Diplomarbeit an der Universität Duisburg-Essen (2007).
- [58] S. Grossmann und M. Holthaus, *λ -Transition to the Bose-Einstein Condensate*, Z. Naturforsch. bf 50a, 921 (1995).
- [59] W. Ketterle und N. J. van Druten, *Bose-Einstein Condensation of a Finite Number of Particles Trapped in One or Three Dimensions*, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).

- [60] S. Grossmann und M. Holthaus, *Bose-Einstein Condensation in a Cavity*, Zeit. Phys. B **97**, 319 (1995).
- [61] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [62] O. Penrose, *On the Quantum Mechanics of Helium II*, Phil. Mag. **42**, 1373 (1951); O. Penrose und L. Onsager, *Bose-Einstein Condensation in Liquid Helium*, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
- [63] P. M. Morse und H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [64] R. M. Ziff, G. F. Uhlenbeck und M. Kac, *The Ideal Bose-Einstein Gas, Revisited*, Phys. Rep. **32**, 169-248 (1977).
- [65] L. Pitaevskii und S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* (Clarendon Press, Oxford, 2003).
- [66] E. Schrödinger, *Statistical Thermodynamics* (Cambridge Univ. Press, London, 1952).
- [67] H. D. Politzer, *Condensate Fluctuations of a Trapped, Ideal Bose Gas*, Phys. Rev. A **54**, 5048 (1996).
- [68] V. I. Yukalov, *Principal Problems in Bose-Einstein Condensation of Dilute Gases*, Laser Phys. Lett. **1**, 435 (2004).
- [69] J. R. Johnston, *Coherent States in Superfluids: The Ideal Einstein-Bose Gas*, Amer. J. Phys. **38**, 516 (1970).
- [70] N. N. Bogolubov, *On Some Problems of the Theory of Superconductivity*, Physica **26**, S1 (1960).
- [71] G. Wentzel, *Thermodynamically Equivalent Hamiltonian for Some Many-Body Problems*, Phys. Rev. **120**, 1572 (1960).
- [72] R. P. Feynman, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948).
- [73] F. Brosens, J. T. Devreese und L. F. Lemmens, *Thermodynamics of Coupled Identical Oscillators within the Path-Integral Formalism*, Phys. Rev. E **55**, 227 (1997).
- [74] P. N. Vorontsov-Velyaminov, S. D. Ivanov und R. I. Gorbunov, *Quantum Gas in an External Field: Exact Grand Canonical Expressions and Numerical Treatment*, Phys. Rev. E **59**, 168 (1999).
- [75] S. Bund und A. M.J. Schakel, *String Picture of Bose-Einstein Condensation*, Mod. Phys. Lett. B **13**, 349 (1999).
- [76] V. Krishnamurthy, *Combinatorics—Theory and Applications* (J. Willey & Sons, New York, 1986).

- [77] M. Hamermesh, *Group Theory and its Application to Physical Problems* (Addison-Wesley, London, 1962).
- [78] P. T. Landsberg, *Thermodynamics: With Quantum Statistical Illustrations* (Interscience, N.Y., 1961).
- [79] H. Sato, *Nucleus as a Canonical Ensemble: Entropy and Level Density at Low Temperature*, Phys. Rev. C **36**, 785 (1987).
- [80] P. Borrmann und G. Franke, *Recursion Formulas for Quantum Statistical Partition Functions*, J. Chem. Phys. **98**, 2484 (1993).
- [81] W. Korolevski, *Bosegase in verschiedenen Gesamtheiten*, Diplomarbeit an der Freien Universität Berlin, in Vorbereitung.
- [82] D. M. Ceperley, *Path Integrals in the Theory of Condensed Helium*, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
- [83] J. Schneider und H. Wallis, *Fully Quantum Mechanical Moment of Inertia of a Mesoscopic Ideal Bose Gas*, Euro. Phys. J. B **18**, 507 (2000).
- [84] R. H. Fowler, *Statistical Mechanics* (Cambridge Univ. Press, London, 1936).
- [85] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2. Auflage (J. Willey & Sons, New York, 1987).
- [86] R. B. Dingle, *Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation* (Acad. Press, London, 1973).
- [87] M. Gajda und K. Rzazewski, *Fluctuations of Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2686 (1996).
- [88] G. Schubert, *Zur Bose-Statistik*, Z. Naturforsch. **1**, 113 (1946); Nachtrag dazu **2**, 250 (1947).
- [89] S. Grossmann und M. Holthaus, *Maxwell's Demon at Work: Two Types of Bose Condensate Fluktuationen in Power-Law Traps*, Opt. Express. **1**, 262 (1997).
- [90] C. Weiss und M. Wilkens, *Particle Number Counting Statistics in Ideal Bose Gases*, Opt. Express. **1**, 272 (1997).
- [91] C. Weiss, *Bosegase in verschiedenen Gesamtheiten*, Diplomarbeit an der Universität Konstanz (1997).
- [92] S. Grossmann und M. Holthaus, *Microcanonical Fluktuationen of a Bose System's Ground State Occupation Number*, Phys. Rev. E **54**, 3495 (1996).
- [93] P. Navez, D. Bitouk, M. Gajda, Z. Itziaszek und K. Rzazewski, *Fourth Statistical Ensemble for the Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1789 (1997).

- [94] M. Holthaus, E. Kalinowski und K. Kirsten, *Condensate Fluktuationen in Trapped Bose Gases: Canonical vs. Microcanonical Ensemble*, Annals of Physics **270**, 198 (1998).
- [95] F. J. Dyson, *The Radiation Theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman*, Phys. Rev. **75**, 486; *The S Matrix in Quantum Electrodynamics*, ebendort, 1736 (1949).
- [96] K. Glaum, *Rekursive graphische Lösung von Funktionaldifferentialgleichungen für Feynman-Diagramme in der ϕ^4 -Theorie*, Diplomarbeit an der Freien Universität Berlin (2001).
- [97] J. Schwinger, *The Theory of Quantized Fields. I*, Phys. Rev. **82**, 914 (1951).
- [98] G. C. Wick, *The Evaluation of the Collision Matrix*, Phys. Rev. **80**, 268 (1950).
- [99] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields* (Cambridge Univ. Press, 2000).
- [100] M. Bachmann, H. Kleinert und A. Pelster, *Recursive Graphical Construction of Feynman Diagrams in Quantum Electrodynamics*, Phys. Rev. D **61**, 085017 (2000).
- [101] V. V. Goldman, I. F. Silvera und A. J. Leggett, *Atomic Hydrogen in an Inhomogeneous Magnetic Field: Density Profile and Bose-Einstein Condensation*, Phys. Rev. B **24**, 2870 (1981).
- [102] R. L. Stratonovich, Dokl. Akad. Nauk SSSR **115**, 1907 (1957); *A Method for the Computation of Quantum Distribution Functions*, Englische Übersetzung in Sov. Phys. Dokl. **2**, 416 (1958).
- [103] J. Hubbard, *Calculation of Partition Functions*, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1963).
- [104] H. Kleinert, *Collective Quantum Fields*, Fortschritte der Physik **26**, 565 (1978).
- [105] P. C. Hohenberg und P.C. Martin, *Microscopic Theory of Superfluid Helium*, Ann. Phys. (New York) **34**, 291 (1965).
- [106] N. M. Hugenholtz und D. Pines, *Ground-State Energy and Excitation Spectrum of a System of Interacting Bosons*, Phys. Rev. **116**, 489 (1959).
- [107] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii und S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [108] A. J. Leggett, *Bose-Einstein Condensation in the Alkali Gases: Some Fundamental Concepts*, Rev. Mod. Phys. **73**, 307 (2001).
- [109] E. Fermi, *Ricerca Science* **7**, 13 (1936).
- [110] K. Huang und C. N. Yang, *Quantum-Mechanical Many-Body Problem with Hard-Sphere Interaction*, Phys. Rev. **105**, 767 (1957).
- [111] H. Feshbach, *A Unified Theory of Nuclear Reactions. II*, Ann. Phys. **19**, 287 (1962).
- [112] F. S. Levin und H. Feshbach, *Reaction Dynamics* (Gordon & Breach, New York, 1973).

- [113] W. C. Stwalley, *Stability of Spin-Aligned Hydrogen at Low Temperatures and High Magnetic Fields: New Field-Dependent Scattering Resonances and Predissociations*, Phys. Rev. Lett. **37**, 1628 (1976).
- [114] E. Tiesinga, B. J. Verhaar und H. T. C. Stoof, *Threshold and Resonance Phenomena in Ultracold Ground-State Collisions*, Phys. Rev. A **47**, 4114 (1993).
- [115] M. Marinescu und L. You, *Controlling Atom-Atom Interaction at Ultralow Temperatures by dc Electric Fields*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4596 (1998).
- [116] S. Yi und L. You, *Trapped Atomic Condensates with Anisotropic Interactions*, Phys. Rev. A **61**, 041604 (2000).
- [117] A. Derevianko, *Anisotropic Pseudopotential for Polarized Dilute Quantum Gases*, Phys. Rev. A **67**, 033607 (2003); errato in **72**, 039901 (2005).
- [118] S. Yi und L. You, *Calibrating Dipolar Interaction in an Atomic Condensate*, Phys. Rev. Lett. **92**, 193201 (2004).
- [119] R. de Carvalho, J. M. Doyle, B. Friedrich, T. Guillet, J. Kim, D. Patterson und J. D. Weinstein, *Buffer-Gas Loaded Magnetic Traps for Atoms and Molecules: A Primer*, Eur. Phys. J. D **7**, 289 (1999).
- [120] J. J. McClelland und J. L. Hanssen, *Laser Cooling without Repumping: A Magneto-Optical Trap for Erbium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **96**, 143005 (2006).
- [121] L. Santos, G. V. Shlyapnikov, P. Zoller und M. Lewenstein, *Bose-Einstein Condensation in Trapped Dipolar Gases*, Phys. Rev. Lett. **85**, 1791 (2000).
- [122] K. Afrousheh, P. Bohlouli-Zanjani, J. D. Carter, A. Mugford und J. D. D. Martin, *Resonant Electric Dipole-Dipole Interactions Between Cold Rydberg Atoms in a Magnetic Field*, Phys. Rev. A **73**, 063403 (2006).
- [123] S. Yi und L. You, *Trapped Condensates of Atoms with Dipole Interactions*, Phys. Rev. A **63**, 053607 (2000).
- [124] J. M. Doyle und B. Friedrich, *Molecules are Cool*, Nature **401**, 749 (1999).
- [125] H. L. Bethlem, G. Berden und G. Meijer, *Decelerating Neutral Dipolar Molecules*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1558 (1999).
- [126] S. Y. T. van de Meeracker, P. H. M. Smeets, N. Vanhaecke, R. T. Jongma und G. Meijer, *Deceleration and Electrostatic Trapping of OH Radicals*, Phys. Rev. Lett. **94**, 023004 (2005).
- [127] M. W. Mancini, G. D. Telles, A. R. L. Caires, V. S. Bagnato und L. G. Marcassa, *Observation of Ultracold Ground-State Heteronuclear Molecules*, Phys. Rev. Lett. **92**, 133203 (2004).

- [128] J. M. Sage, S. Sainis, T. Bergeman und D. DeMille, *Optical Production of Ultracold Polar Molecules*, Phys. Rev. Lett. **94**, 203001 (2005).
- [129] C. Ospelkaus, S. Ospelkaus, L. Humbert, P. Ernst, K. Sengstock und K. Bongs, *Ultracold Heteronuclear Molecules in a 3D Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **97**, 120402 (2006).
- [130] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Second Edition (John Wiley & Sons, New York, 1975).
- [131] C. Eberlein, S. Giovanazzi und D. H. J. O'Dell, *Exact Solution of the Thomas-Fermi Equation for a Trapped Bose-Einstein Condensate with Dipole-Dipole Interactions*, Phys. Rev. A **71**, 033618 (2005).
- [132] K. Góral, K. Rzazewski und T. Pfau, *Bose-Einstein Condensation with Magnetic Dipole-Dipole Forces*, Phys. Rev. A **61**, 051601 (2000).
- [133] D. C. E. Bortolotti, S. Ronen, J. L. Bohn und D. Blume, *Dipolar Bose Gases: Many-Body Versus Mean-Field Description*, Phys. Rev. Lett. **97**, 160402 (2006).
- [134] S. Ronen, D. C. E. Bortolotti, D. Blume und J. L. Bohn, *Dipolar Bose-Einstein Condensates with Dipole Dependent Scattering Length*, Phys. Rev. A **74**, 033611 (2006).
- [135] P. W. Courteille, V. S. Bagnatto und V. I. Yukalov, *Bose-Einstein Condensation of Trapped Atomic Gases*, Laser Phys. **11**, 659 (2001).
- [136] A. L. Fetter und A. A. Svidzinsky, *Vortices in a Trapped Dilute Bose-Einstein Condensate*, J. Phys. Cond. Mat. **13**, R135 (2001).
- [137] D. S. Jin, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Collective Excitations of a Bose-Einstein Condensate in a Dilute Gas*, Phys. Rev. Lett. **77**, 420 (1996).
- [138] R. Onofrio, D. S. Durfee, C. Raman, M. Kohl, C. E. Kuklewicz und W. Ketterle, *Surface Excitations of a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **84**, 810 (2000).
- [139] J. Stuhler, A. Griesmaier, T. Koch, M. Fattori, T. Pfau, S. Giovanazzi, P. Pedri und L. Santos, *Observation of Dipole-Dipole Interaction in a Degenerate Quantum Gas*, Phys. Rev. Lett. **95**, 150406 (2005).
- [140] L. Santos, G. V. Shlyapnikov und M. Lewenstein, *Roton-Maxon Spectrum and Stability of Trapped Dipolar Bose-Einstein Condensates* Phys. Rev. Lett. **90**, 250403 (2002).
- [141] K. Góral und L. Santos, *Ground State and Elementary Excitations of Single and Binary Bose-Einstein Condensates of Trapped Dipolar Gases*, Phys. Rev. A **66**, 023613 (2002).
- [142] D. H. J. O'Dell, S. Giovanazzi und C. Eberlein, *Exact Hydrodynamics of a Trapped Dipolar Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **92**, 250401 (2004).

- [143] S. Giorgini, L.P. Pitaevskii und S. Stringari, *Condensate Fraction and Critical Temperature of a Trapped Interacting Bose Gas*, Phys. Rev. A **54**, 4633 (1996).
- [144] Z. Idziaszek, M. Gajda, P. Navez, M. Wilkens und K. Rzazewski, *Fluctuations of the Weakly Interacting Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4376 (1998).
- [145] V. V. Kocharovskiy, V. V. Kocharovskiy und M. O. Scully, *Condensate Statistic in Interacting Dilute Bose Gases*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2306 (2000).
- [146] J. Tempere, F. Brosens, L. F. Lemmens und J. T. Devreese, *Condensation and Interaction Range in Harmonic Boson Traps: A Variational Approach* Phys. Rev. A **61**, 043605 (2000).
- [147] H. Xiong, S. Liu, G. Huang und Z. Xu, *Canonical Statistics of Trapped Ideal and Interacting Bose Gases*, Phys. Rev. A **65**, 033609 (2002).
- [148] P. Nozieres, in *Bose Einstein Condensation*, editiert von A. Griffin, D. W. Snoke und S. Stringari (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [149] H. Kleinert, *Five-Loop Critical Temperature Shift in Weakly Interacting Homogeneous Bose-Einstein Condensate*, Mod. Phys. Lett. B **17**, 1011 (2003).
- [150] P. Arnold, G. Moore und B. Tomasik, *T_c for Homogeneous Dilute Bose Gases: a Second Order Result*, Phys. Rev. A **65**, 013606 (2002).
- [151] B. Kastening, *Shift of BEC Temperature of Homogeneous Weakly Interacting Bose Gas*, Laser Phys. **14**, 586 (2004).
- [152] R. P. Feynman und H. Kleinert, *Effective Classical Partition Functions*, Phys. Rev. A **34**, 5080 (1986).
- [153] H. Kleinert, S. Schmidt und A. Pelster, *Reentrant Phenomenon in the Quantum Phase Transitions of a Gas of Bosons Trapped in an Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **93**, 160402 (2004).
- [154] H. Kleinert, S. Schmidt und A. Pelster, *Quantum Phase Diagram for Homogeneous Bose-Einstein Condensate*, Ann. Phys. (Leipzig) **14**, 214 (2005).
- [155] P. Arnold und B. Tomasik, *T_c for Trapped Dilute Bose Gases: a Second Order Result*, Phys. Rev. A **64**, 053609 (2001).
- [156] F. Gerbier, J. H. Thywissen, S. Richard, M. Hugbart, P. Bouyer und A. Aspect, *Critical Temperature of a Trapped, Weakly Interacting Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **92**, 030405 (2004).
- [157] O. Zobay, G. Metikas und H. Kleinert, *Nonperturbative Effects on T_c of Interacting Bose Gases in Power Traps*, Phys. Rev. A **71**, 043614 (2005).
- [158] S. Kling und A. Pelster, *Thermodynamical Properties of a Rotating Ideal Bose Gas*, Phys. Rev. A **76**, 023609 (2007).

- [159] S. Giovanazzi, P. Pedri, L. Santos, A. Griesmaier, M. Fattori, T. Koch, J. Stuhler und T. Pfau, *Expansion Dynamics of a Dipolar Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. A **74**, 013621 (2006).
- [160] S. Giovanazzi, A. Görlitz und T. Pfau, *Ballistic Expansion of a Dipolar Condensate*, J. Opt. B **5**, S208 (2003).
- [161] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists* (Acad. Press, Orland, 1985).
- [162] S. G. Krantz, *Handbook of Complex Variables* (Birkhäuser, Boston, 1999).
- [163] I. N. Bronstejn und K. A. Semendjaev, *Taschenbuch der Mathematik* (Harri Deutsch, Frankfurt/M, 1985).

Danksagung

Als Erstes möchte ich Herrn Prof. Dr. Hagen Kleinert für die wohlwollende Unterstützung meines Promotionsvorhabens danken. Seine wissenschaftlichen Einsichten führten zu so manchen Momenten der Erleuchtung. Sein geradezu unerschöpfliches Wissen gepaart mit motivierender Diskussionsbereitschaft hat wesentlich zum Gelingen der Dissertationsarbeit beigetragen. Ausserdem möchte ich sein persönliches Engagement ausserhalb der akademischen Angelegenheiten und seine vielfältigen politischen, geschichtlichen und kulturellen Interessen hervorheben, die dem sonst tristen Wissenschaftsleben ein humorvolles und vor allem menschliches Bild verliehen.

Ein besonderer Dank gilt auch meinem langjährigen Betreuer Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster, der mich in das Thema eingeführt hat und bei technischen Problemen zur Seite stand. Auch für seine gelegentlichen Richtungs-Korrekturen und konstruktive Kritik bei der Ausarbeitung der Schrift bin ich ihm zutiefst verbunden.

Vielen weiteren Kollegen möchte ich für sprachliche und inhaltliche Korrekturen der vorliegenden Schrift danken. Dazu gehören Victor Bezerra, Aristeu Lima, Sonja Overesch, insbesondere aber auch Walja Korolevski und Matthias Ohliger.

Frau Dr. Annemarie Kleinert bin ich für ihre moralische Unterstützung meiner Arbeit und ihre fürsorgliche und ausgleichende Art dankbar, mit der sie für eine menschliche Atmosphäre in der Gruppe sorgte. Als weitere Bereicherung in ausserakademischen Angelegenheiten sind ausserdem noch die kulinarischen Künste von Sonja Overesch zu erwähnen. Auch sportliche Aktivitäten mit meinen Tischtennis-Partnern Sebastian Schmidt, Sebastian Brandt und Sebastian Kling, sowie mit Parvis Soltan-Panahi, Matthias Semmelhack, Jürgen Dietel, Steffen Röthel, Hauke Studier und Prof. Dr. Vjacheslaw Yukalow werden mir in Erinnerung bleiben. Für zahlreiche fachlichen sowie ausserakademische Diskussionsrunden bin ich all den oben genannten Personen, sowie Flavio Nogueira, Petr Jizba, Sascha Chervjakow, Moritz Schütte und Andrej Zayakin zum Dank verpflichtet. Allen meinen Zimmer-Genossen (alle drei Sebastians, Alexander Hoffman, Steffen Röthel, Tim Chen und Matthias Ohliger) bin ich für ihre grosse Geduld und Gutmütigkeit ausserordentlich dankbar.

Weiterhin bedanke ich mich für die finanzielle Unterstützung vom Land Berlin in Form eines Stipendiums im Rahmen der Nachwuchsförderung (NaFöG) und für die Finanzierung seitens der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Schwerpunkt-Programms “Interactions in Ultra-Cold Atomic and Molecular Gases” (SPP 1116).

Tabellarischer Lebenslauf

Name	Konstantin Glaum
Geboren	16. Okt. 1975 in Alma-Ata/ Kasachstan
Familie	Vater: Viktor Glaum, Diplom-Mathematiker Mutter: Elena Glaum (geb. Nadysewa), Diplom-Ökonomin
Nationalität	deutsch
Familienstand	ledig
Dienststadsresse	Freie Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik, Arnimalle 14, 14195 Berlin, Tel: 030-83856129 email: glaum@physik.fu-berlin.de homepage: http://www.physik.fu-berlin.de/~glaum
Privatadresse	Sewanstr. 269, 10319 Berlin, Tel: 030-37008798

Ausbildung in Kasachstan

Schule	Mittelschule Nr. 60, Alma-Ata, 1982 – 1992
Abschluss	Juli 1992, Durchschnittsnote 1.0 (äquivalent)
Musikausbildung	Chorstudium (mit Klavierausbildung) bei der Mittelschule Nr. 60, 1982 – 1989, abgeschlossen im Mai 1989 mit der Note <i>gut</i>
Studium	Physik (Bachelor-Studiengang) an der Kasachischen Staatsuniversität in Alma-Ata, Sept. 1992 – Aug. 1993, abgebrochen wegen Umsiedlung nach Deutschland

Übersiedeln nach Deutschland	Okt. 1993 als Spätaussiedler
---	------------------------------

Ausbildung in Deutschland

Sprachkurs	Integrations Sprachkurs für Spätaussiedler bei IBH e.V. Hamburg, Dez. 1993 – Mai 1994
Fachabitur	Lehrgang am Zentralkolleg Hamburg zum Erwerb der deutschen Hoch- schulzugangsberechtigung, Okt. 1994 – Dez. 1995, Durchschnittsnote 1.7
Grundstudium	Physik (Diplom), Nebenfach Chemie, an der Freien Universität Berlin, April 1996 – März 1998

Vordiplom	März 1998, Durchschnitt <i>sehr gut</i>
Hauptstudium	Physik, Nebenfach Mathematik, an der Freien Universität Berlin, April 1998 – Januar 2002
Diplomarbeit	Bei Prof. Dr. H. Kleinert an der Freien Universität Berlin mit dem Titel “ <i>Graphische Lösung von Funktionaldifferentialgleichungen für Feynman-Diagramme in der ϕ^4-Theorie</i> ”, http://www.physik.fu-berlin.de/~glaum/diplomarbeit.ps
Studienabschluss	Feb. 2002, Durchschnitt <i>sehr gut</i>
Promotion	Ab April 2002 am Institut für Theoretische Physik an der Freien Universität Berlin unter Betreuung von Prof. Dr. H. Kleinert, Arbeitstitel der Promotionsschrift “ <i>Thermodynamische Eigenschaften der Bose-Gase</i> ”
Fremdsprachen	Russisch, Englisch

Wissenschaftlicher Werdegang

Juli 2002 – Juni 2004	Stipendiat des Landes Berlin nach dem Nachwuchsförderungsgesetz (NaFöG)
Juli 2004 – Mai 2007	Wissenschaftlicher Mitarbeiter (BAT IIa, 3/4) an der Freien Universität Berlin im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms SPP 1116 “Interactions in Ultra-Cold Atomic and Molecular Gases” (Antragsteller: Prof. Dr. H. Kleinert und Priv.-Doz. Dr. A. Pelster)