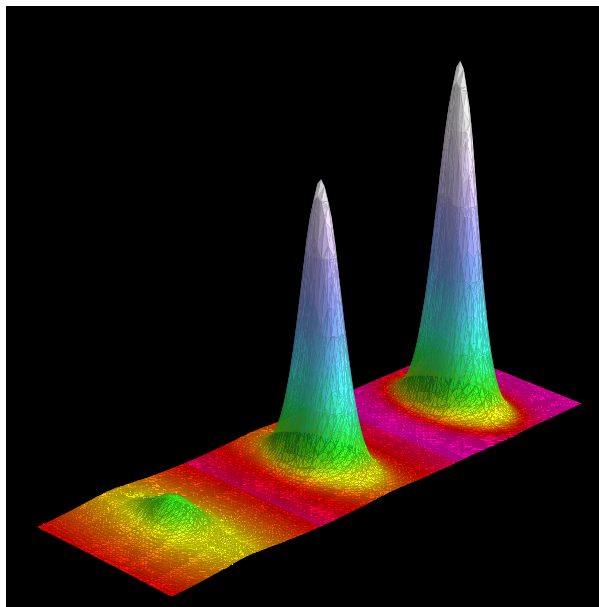


DIPLOMARBEIT

# Globale und lokale Eigenschaften von Bose-Einstein-Kondensaten mit endlicher Teilchenzahl



Institut für theoretische Physik  
Arnimallee 14 14195 Berlin

**Verfasserin:**  
W. Korolevski

**Hauptgutachter:**  
Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Hagen Kleinert

8. Mai 2009



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Bose-Einstein-Kondensation</b>	<b>1</b>
1.1	Historische Motivation . . . . .	1
1.2	Was ist BEC? . . . . .	2
1.3	Experimentelle Grundlagen . . . . .	4
1.3.1	Herstellung eines Bose-Einstein-Kondensats . . . . .	5
1.3.2	Untersuchungsmethoden . . . . .	8
1.4	Überblick über die Diplomarbeit . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Großkanonisches Ensemble</b>	<b>13</b>
2.1	Vielteilchensysteme und BEC . . . . .	14
2.2	Globale thermodynamische Eigenschaften . . . . .	16
2.2.1	Semiklassische Näherung . . . . .	17
2.2.2	Finite-Size-Korrekturen erster Ordnung . . . . .	21
2.2.3	Euler-MacLaurin-Methode . . . . .	22
2.2.4	Finite-Size-Korrekturen für die Wärmekapazität . . . . .	30
2.2.5	Höhere Finite-Size-Korrekturen . . . . .	31
2.2.6	Quantenmechanisch exakte Behandlung . . . . .	35
2.3	Lokale Eigenschaften . . . . .	40
2.3.1	Semiklassischer Ansatz für die Teilchendichte . . . . .	41
2.3.2	Feldtheoretische Beschreibung . . . . .	43
2.3.3	Finite-Size-Korrekturen zur Teilchendichte . . . . .	47
2.3.4	Exakte Berechnung der Dichten . . . . .	50
<b>3</b>	<b>Kanonisches Ensemble</b>	<b>51</b>
3.1	Pfadintegralformalismus . . . . .	52
3.1.1	Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplitude . . . . .	52
3.1.2	Teilchendichte . . . . .	56
3.1.3	Imaginärzeitamplitude für $N$ Teilchen . . . . .	56
3.2	Ein-Teilchen-Dichtematrix im $N$ -Teilchen-Ensemble . . . . .	57
3.3	Kondensatteilchenanteil . . . . .	63
3.4	Wärmekapazität . . . . .	64
3.5	Vergleich zwischen kanonischen und großkanonischen Ergebnissen . . . . .	65
<b>4</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>67</b>
<b>A</b>	<b>Polylogarithmische Funktionen</b>	<b>69</b>
A.1	Modifizierte polylogarithmische Funktionen . . . . .	69
A.2	Teilchenzahlberechnung . . . . .	72

B	Robinson-Entwicklung	75
C	Exakte Lösung für den harmonischen Oszillator	77
D	C-Programme	83
	Abbildungsverzeichnis	85
	Literaturverzeichnis	87
	Danksagung	91

# Kapitel 1

## Bose-Einstein-Kondensation

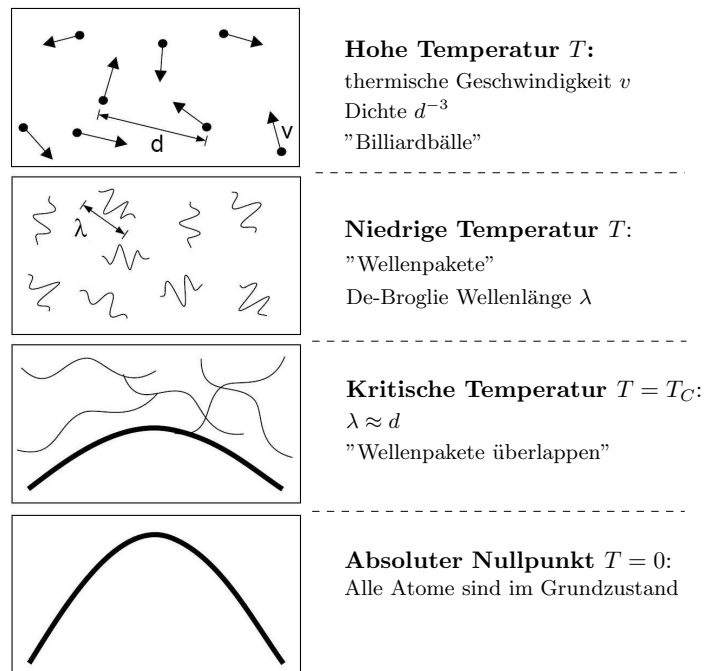
Die Bose-Einstein-Kondensation (BEC) schwach wechselwirkender atomarer Gase wurde erstmals 1995 experimentell realisiert. Den Forschergruppen von Eric Cornell und Carl Wieman am JILA war es gelungen, ein Bose-Einstein-Kondensat aus 20000 Rubidium-Atomen herzustellen [1]. Kurz danach konnte Wolfgang Ketterle am MIT dieses Phänomen in einem Experiment mit einer halben Million Natrium-Atome nachweisen [2]. Damit wurde der Wissenschaft ein einzigartiges Werkzeug zur Verfügung gestellt, mit dem Quantenphänomene auf makroskopischer Skala untersucht werden können. Besonders interessant ist, dass Bose-Einstein-Kondensate eine Quelle kohärenter Materie darstellen, die z.B. in der Atomlithographie und Atomoptik eingesetzt werden kann. Für diese Leistung wurden die drei genannten Forscher 2001 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.

### 1.1 Historische Motivation

Die Geschichte der Bose-Einstein-Kondensation geht zurück auf die 20er Jahre des zwanzigsten Jahrhunderts. 1924 schickte der indische Physiker Satyendra Nath Bose eine Abhandlung an Albert Einstein, in der er das Plancksche Strahlungsgesetz aus einem Extremalprinzip ableitete. Einstein erkannte die Tragweite dieser Arbeit, übersetzte sie ins Deutsche und verhalf ihr zur Publikation [3]. Des Weiteren verallgemeinerte Einstein Boses Theorie für ein ideales Gas identischer Atome und sagte voraus, dass bei einer hinreichend niedrigen Temperatur eine große Anzahl von Atomen in den niedrigsten Energiezustand übergehen würde. Seine eigenen Worte lauten: "Es tritt eine Scheidung ein: ein Teil kondensiert, der Rest bleibt ein gesättigtes ideales Gas" [4].

Dieser Vorhersage wurde keine besondere Beachtung geschenkt, bis Fritz London die Idee 1938 als eine mögliche Erklärung für die Suprafluidität von flüssigem Helium nutzte [5]. Diese Hypothese wurde durch Experimente von Oliver Penrose und Lars Onsager in den fünfziger Jahren untermauert, die den Zusammenhang der Suprafluidität mit einer makroskopischen Besetzung des Grundzustandes zeigten [6].

In den 1980er Jahren wurde Bose-Einstein-Kondensation ein wichtiges Ziel von Experimenten, die an kryogen gekühlten atomaren Wasserstoffgasen durchgeführt wurden. Doch erst mit der Entwicklung neuartiger Kühlmethoden mittels Laserlicht und der Verwendung von Alkali-Atomen, die mit ihren Resonanzlinien im sichtbaren und nahen infraroten Spektralbereich sehr gut mit Laserlicht ansprechbar sind, ist die erstmalige Herstellung eines Bose-Einstein-Kondensats gelungen.



**Abbildung 1.1:** Anschauliche Vorstellung der Bose-Einstein-Kondensation aus Ref. [7]. Bei hohen Temperaturen können die Atome klassisch als "Billiardkugeln" beschrieben werden. Nimmt die Temperatur ab, dann spielen ihre Welleneigenschaften eine immer größere Rolle. Bei tiefen Temperaturen können die Atome als quantenmechanische Wellenpakete mit einer Ausdehnung von der Ordnung der thermischen De-Broglie-Wellenlänge betrachtet werden. Ab einer gewissen kritischen Temperatur  $T = T_C$  überlappen die Wellenpakete. Am absoluten Nullpunkt sind alle Atome im Grundzustand und können durch eine einzige Wellenfunktion beschrieben werden.

## 1.2 Was ist BEC?

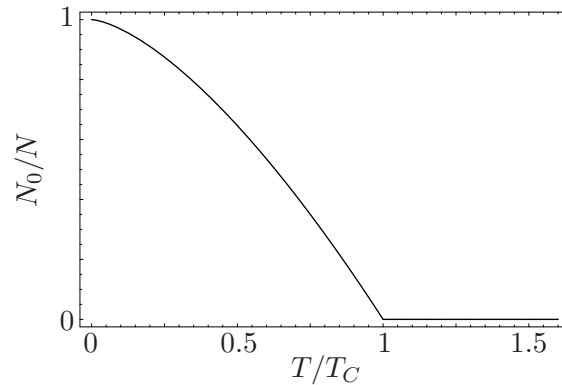
Bose-Einstein-Kondensation ist eine Folge der Ununterscheidbarkeit und der Wellennatur der Teilchen und daher ein quantenstatistisches Phänomen. Sie tritt im Fall eines Systems bosonischer Teilchen auf, welche aus einer geraden Anzahl von Elektronen, Protonen und Neutronen bestehen. Einstein betrachtete den Fall des idealen homogenen Gases und erhielt die folgende mittlere Besetzungszahl für einen Energiezustand  $E_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2M$  eines Teilchens der Masse  $M$  bei Temperatur  $T$

$$n(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(E_{\mathbf{p}} - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (1.1)$$

wobei  $k_B$  die Boltzmann-Konstante und  $\mu$  das chemische Potential bezeichnen. Da die Besetzungszahlen positiv sind, muss das chemische Potential kleiner als die Grundzustandsenergie  $E_0$  sein. Für den Fall  $\mu = E_0$  divergiert die Besetzungszahl. Dies kann so interpretiert werden, dass makroskopisch viele Teilchen den Grundzustand besetzen, was auch als Kondensation bezeichnet wird.

Im thermodynamischen Limes, d.h. wenn sowohl die Gesamtteilchenzahl

$$N = \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p}) \quad (1.2)$$



**Abbildung 1.2:** Kondensatteilchenanteil  $N_0/N$  in Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur  $T/T_C$  für ein homogenes ideales Bose Gas im thermodynamischen Limes.

als auch das Volumen unendlich werden,  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ , dabei aber die Dichte  $n = N/V$  konstant bleibt, kann die Summe über die Impulse  $\mathbf{p}$  in (1.2) durch ein Integral ersetzt werden:

$$N = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} n(\mathbf{p}). \quad (1.3)$$

Die Bedingung, dass das chemische Potential  $\mu$  gleich der Grundzustandsenergie  $E_0$  ist, liefert dann die kritische Temperatur, welche das Einsetzen der Bose-Einstein-Kondensation markiert:

$$T_C = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B M} \left[ \frac{n}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3}, \quad (1.4)$$

wobei  $\zeta$  die Riemannsche Zeta-Funktion ist mit  $\zeta(3/2) \approx 2.612$ . Diese Beziehung kann mit Hilfe der thermischen De-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B T}} \quad (1.5)$$

auch anders ausgedrückt werden:

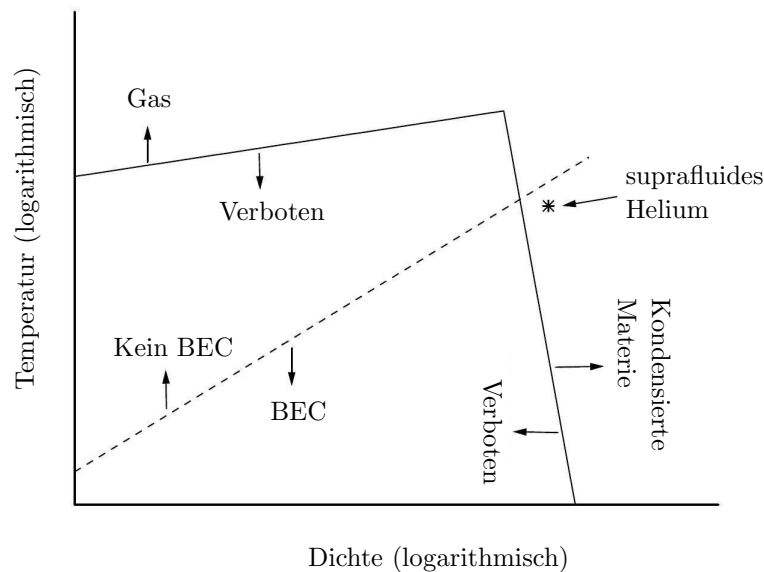
$$n\lambda^3 = \zeta(3/2). \quad (1.6)$$

Da die Dichte  $n$  umgekehrt proportional zur dritten Potenz des mittleren Teilchenabstands ist, folgt daraus, dass die Kondensation dann einsetzt, wenn die De-Broglie-Wellenlänge in die Größenordnung des mittleren Teilchenabstands kommt. Diese Überlegung wurde in Abbildung 1.1 für eine anschauliche Vorstellung der Bose-Einstein-Kondensation genutzt.

Es ist ein Effekt der Quantenstatistik, dass ab der kritischen Temperatur  $T_C$  ein mit weiter sinkender Temperatur zunehmender Anteil des Ensembles in den Grundzustand übergeht. Die Anzahl der Atome im Kondensat beträgt dabei

$$N_0 = n(\mathbf{0}) = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_C} \right)^{2/3} \right]. \quad (1.7)$$

Der Verlauf des Kondensatteilchenanteils  $N_0/N$  ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Die Funktion ist stetig, hat jedoch einen Knick bei  $T = T_C$ , deshalb besitzt das ideale Gas an dieser Stelle einen Phasenübergang. Die Tatsache, dass im idealen Gas ein Phasenübergang existiert und ein endlicher Bruchteil aller Teilchen für den Fall  $T < T_C$  in den Grundzustand übergeht, wird als



**Abbildung 1.3:** Allgemeines Phasendiagramm aus Ref. [8]. BEC kann sich unterhalb der gestrichelten Linie ausbilden. Die durchgezogene Linie zeigt die Grenze zwischen den thermodynamisch erlaubten und verbotenen Gebieten; d.h. es ist nicht möglich ein BEC zu erzeugen, das sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet.

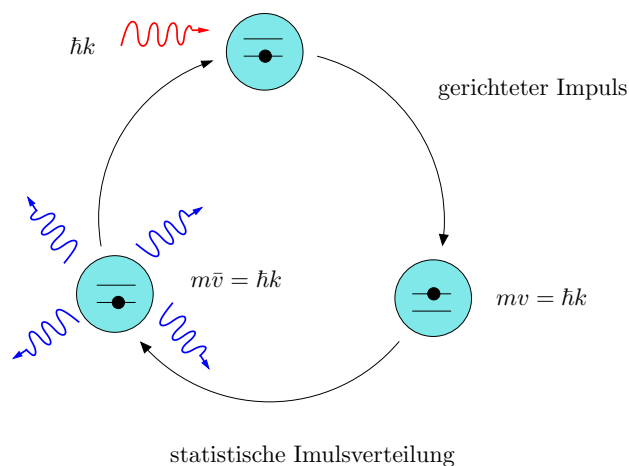
Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet. Die Bezeichnung Kondensation rührt daher, dass ebenso wie beim Phasenübergang gasförmig-flüssig, bei dem die kondensierten Atome nicht mehr zum Gasdruck beitragen, die in den Grundzustand kondensierten Bosonen von der Thermodynamik entkoppeln.

### 1.3 Experimentelle Grundlagen

Warum war es so schwierig, BEC in atomaren Gasen zu realisieren? In Abbildung 1.3 ist zur Veranschaulichung der Problematik das qualitative Phasendiagramm eines atomaren Systems dargestellt. Das Gebiet im Phasendiagramm, in dem Bose-Einstein-Kondensate existieren können, befindet sich unterhalb der gestrichelten Linie, welche die kritische Temperatur markiert. Bei niedrigen Dichten ist das Gebiet jedoch thermodynamisch instabil. Bei hohen Dichten existieren zwar thermodynamisch stabile Zustände für BEC, das Kondensat kann sich dort aber dennoch nicht ausbilden, da bei diesen hohen Dichten die Gleichgewichtskonfiguration von fast allen bekannten Atomen bzw. Molekülen eine kristalline Struktur hat.

Daher ist es nicht möglich, ein BEC in atomaren Gasen zu schaffen, das sich im thermodynamischen und chemischen Gleichgewicht befindet. Man kann jedoch Metastabilität benutzen, um für eine gewisse Zeit im verbotenen Bereich zu bleiben. Dies wird bei solchen Temperaturen und Dichten erreicht, bei denen elastische Stöße schnell genug sind, um das Bose-Einstein-Kondensat im thermischen Gleichgewicht zu halten, aber inelastische Prozesse langsam genug sind, so dass die Bildung von Molekülen und Clustern eine Zeit lang unterdrückt wird. Die Notwendigkeit, Metastabilität zu erhalten, ist daher die eigentliche Ursache für die Begrenzung der möglichen





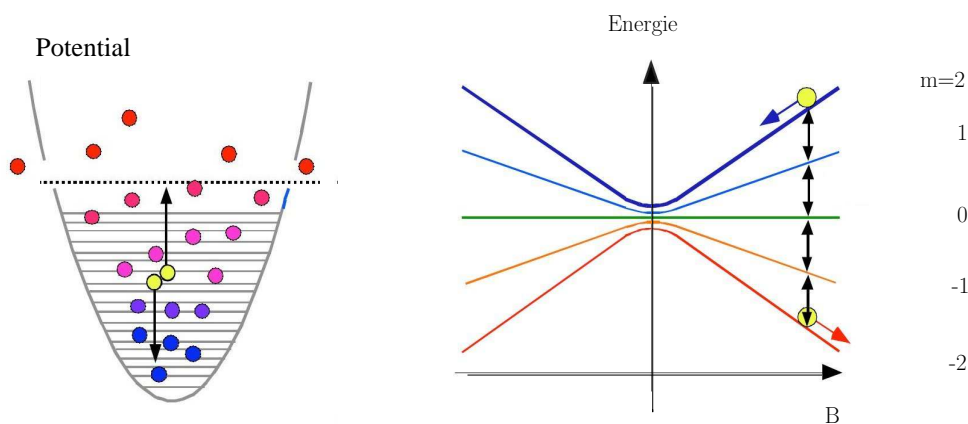
**Abbildung 1.4:** Prinzip der Laserkühlung am Beispiel eines Zwei-Niveau-Atoms: Photonen passender Energie werden vom Atom absorbiert und das Atom erhält einen Impuls vom selben Betrag wie das Photon und in Richtung der ursprünglichen Ausbreitungsrichtung des Photons. Nach einer gewissen Zeit, der Lebensdauer des angeregten Zustands, geht das Atom unter Aussendung eines Photons wieder in seinen Grundzustand zurück. Diese spontane Emission ist allerdings ein ungerichteter Prozess, so dass das Atom im Mittel keine Geschwindigkeitsveränderung erfährt.

Dichte. Dichten von z.B.  $10^{17} \text{cm}^{-3}$  haben eine Metastabilitätszeit von nur wenigen ms, was für experimentelle Beobachtungen nicht besonders geeignet ist. Die geringen Dichten erfordern aber auf der anderen Seite geringere Kondensationstemperaturen, deren Erzeugung erst seit Kurzem möglich ist.

### 1.3.1 Herstellung eines Bose-Einstein-Kondensats

Zur Erzeugung eines Bose-Einstein-Kondensats wird generell ein zweistufiges Kühlverfahren verwendet. Zuerst werden Methoden der Laserkühlung eingesetzt, bei denen eine ultrakalte Atomwolke mit typischerweise  $10^9$  Teilchen in einem Volumen von einigen Kubikmillimetern bei Temperaturen in der Größenordnung von  $10 \mu\text{K}$  bereitgestellt wird. Dieses Ensemble wird dann in eine magnetische Falle transferiert, wo mit dem nachfolgenden Abdampfen von Atomen höherer Energien die zweite Stufe der Kühlung stattfindet. Im Folgenden werden diese Kühlmethoden genauer beschrieben.

Die Laserkühlung beruht auf dem Strahlungsdruck, den Licht auf Materie ausüben kann. Dieser Effekt lässt sich auf die Energie- und Impulserhaltung bei der Absorption und Emission von Photonen zurückführen (siehe Abbildung 1.4). Um die Atome zu kühlen, sollte jedoch die vom Strahlungsdruck verursachte Kraft auf Atome von deren Geschwindigkeit abhängen, da nur schnelle Atome abgebremst werden sollen, nicht aber langsame Atome wieder beschleunigt werden. Dies kann mit Hilfe des Doppler-Effekts erreicht werden. Stellt man die Frequenz des Lasers etwas unterhalb der Resonanzfrequenz der Atome ein, dann sind aufgrund des Doppler-Effekts nur solche Atome, die sich mit einer bestimmten Geschwindigkeit  $v$  auf den Laserstrahl zubewegen, genau in Resonanz mit dem Laser. Verwendet man in einer Raumdimension zwei gegenläufige, rotverstimmte Laserstrahlen, so ergibt sich eine geschwindigkeitsabhängige Kraft, die auf alle Atome mit Geschwindigkeit größer als Null wirkt und diese abbremst. Um die Atome auch in allen drei Raumdimensionen zu kühlen, setzt man sechs paarweise gegenläufige



**Abbildung 1.5:** (a) Verdampfungskühlung in einer magnetischen Falle. Das Fallenpotential wird so eingestellt, dass die heißesten Atome die Falle verlassen können. (b) Erzwungene Verdampfungskühlung. Durch die Einstrahlung einer Mikrowelle werden Zeeman-Übergänge induziert. Die Atome mit positivem  $m$  werden von der Falle gehalten. Für Atome mit negativem  $m$  wirkt das Feld abstossend.

Laserstrahlen ein, welche senkrecht aufeinander stehen. Diese Konfiguration der Laser wird als optische Melasse<sup>1</sup> bezeichnet, da sie wie eine zähe Flüssigkeit wirkt und so die Atome abbremst.

Reale Atome haben normalerweise mehrere Zustände, in die das angeregte Atom zerfallen kann, die aber nicht alle mit dem Kühllicht wechselwirken. Um zu verhindern, dass die Atome durch solche Zerfälle aus der Falle entweichen, werden ein oder mehrere Rückpump Laser benutzt, die diese konkurrierenden Zustände wieder in den Kühlprozess zurücktransferieren.

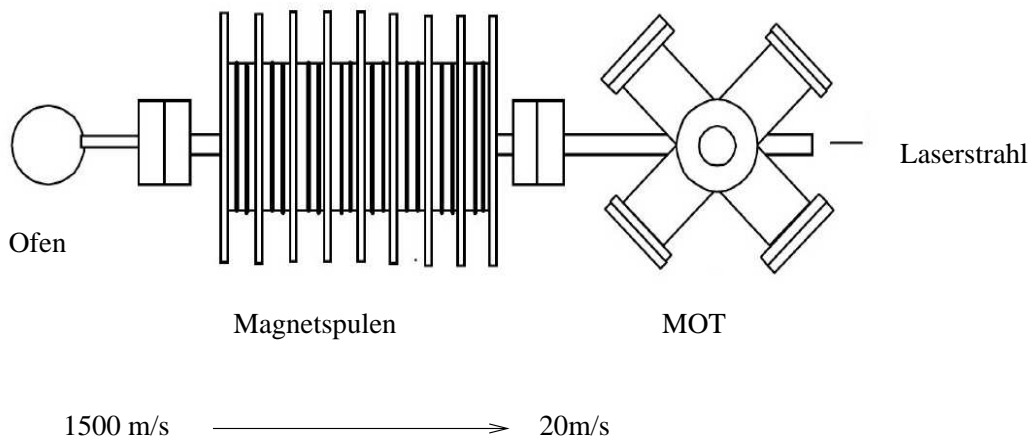
Die Grenzen der Doppler-Kühlung sind zum einen durch die endliche Lebensdauer und zum anderen durch die Zufallsbewegung der Atome gegeben. Die Lebensdauer darf nicht sehr groß sein, denn je länger sich die Atome im angeregten Zustand befinden, desto länger dauert es, bis sie durch ein anderes Photon angeregt werden können und der Zyklus von vorne beginnen kann. Die Zufallsbewegung der Atome, die Ähnlichkeit mit der Brownschen Molekularbewegung besitzt, ist auf die zufällige Impulsverteilung bei der spontanen Emission zurückzuführen. Sie lässt sich durch eine Diffusionsrate beschreiben, welche der Kühlrate entgegenwirkt. Im Gleichgewicht halten sich diese beiden Raten gerade die Waage und es ergibt sich eine theoretische Grenze, die so genannte Doppler-Grenze, welche für ein Zwei-Niveau-Atom

$$k_B T_D = \frac{\hbar \Gamma}{2} \quad (1.8)$$

lautet [10,11]. Hierbei ist  $\Gamma$  die natürliche Linienbreite der Resonanzlinie des entsprechenden Atoms. Es ergibt sich beispielsweise eine Doppler-Grenze für Natrium von  $240 \mu\text{K}$ . Bei der Betrachtung von Atomen mit mehr als zwei Niveaus in einer stehenden Lichtwelle können zusätzliche Kühlmechanismen auftreten, die allgemein als Sub-Doppler-Kühlung bezeichnet werden und die dazu führen, dass die Atome mit dieser Methode auf eine weitaus geringere Temperatur gekühlt werden können als mit (1.8) berechnet wurde. [12].

Die oben beschriebene dreidimensionale Melasse eignet sich zur Kühlung von Atomen, aber sie ist kein Medium, in dem Atome für längere Zeit gefangen gehalten werden können. Die

<sup>1</sup>Melasse (engl. molasses) ist ein honigartiger Zuckersirup. Dieser Begriff wurde zuerst wohl von Chu et. al. 1985 eingeführt [9,10].



**Abbildung 1.6:** System aus einem Zeeman-Slower und einer MOT. Die Atome treten aus der Quelle links in der Zeichnung in einem gerichteten Strahl mit einer Geschwindigkeit von ca. 1500 m/s. Von rechts kommt ihnen ein Laserstrahl entgegen. Dazwischen befindet sich eine Magnetspule, die entlang der Strahlachse einen Magnetfeldgradienten erzeugt. Das Magnetfeld verschiebt die Energieniveaus der Atome aufgrund des Zeeman-Effekts. Das Magnetfeld ist so eingestellt, daß die Zeeman-Verschiebung die Doppler-Verschiebung gerade kompensiert.

gekühlten Atome können mit Hilfe der Brownschen Molekularbewegung jederzeit aus der Melasse diffundieren. Um sie für eine gewisse Zeit einschließen zu können, bedient man sich elektromagnetischer Felder, die einen Potentialtopf für die Atome erzeugen, aus dem sie unterhalb einer gewissen Schwellentemperatur nicht mehr entweichen können. Das Einfangen von Atomen in Magnetfeldern beruht darauf, dass Atome mit einem nicht verschwindenden magnetischen Moment ein vom Magnetfeld abhängiges Potential erfahren. Üblicherweise kann das Potential sehr gut durch das harmonische Potential

$$V(\mathbf{x}) = \frac{M}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (1.9)$$

genähert werden. Die Fallenfrequenzen  $\omega_x, \omega_y, \omega_z$  sind dabei Funktionen des äußeren Magnetfelds. Wenn das magnetische Moment positiv ist, dann erfährt das Atom eine Kraft in Richtung der größeren Feldstärke. Wenn das magnetische Moment negativ ist, erfährt das Atom eine Kraft in Richtung der niedrigeren Feldstärke. Aus diesem Grund werden die Zustände mit positivem magnetischen Moment als high-field seekers und Zustände mit negativem magnetischen Moment als low-field seekers bezeichnet. Die experimentelle Anordnung aus einer optischen Melasse und einem Magnetfeld wird als magneto-optische Falle bezeichnet (MOT). Sie besteht aus drei Laserstrahlpaaren, die jeweils entgegengesetzt zirkular polarisiert sind, und einem Paar Anti-Helmholtz-Spulen, die ein räumlich variierendes Magnetfeld erzeugen.

Die Temperatur in der MOT ist jedoch noch nicht niedrig genug, um ein Bose-Einstein-Kondensat zu erzeugen. Daher wird die Atomwolke in eine stärkere Magnetfalle umgeladen, wo sie mittels Verdampfungskühlung weiter abgekühlt werden kann. Das Prinzip der Verdampfungskühlung ist in Abbildung 1.5(a) veranschaulicht. In der Praxis wird die Verdampfungskühlung auf eine etwas andere Art erreicht: Sie wird durch Einstrahlen von Hochfrequenzstrahlung erzwungen, welche die Spin-Zustände umdreht (siehe Abb. 1.5(b)). In einem magnetischen Feld zeigen die Atome eine Energieaufspaltung in  $2j + 1$  Energieniveaus. Zwischen den einzelnen Niveaus herrscht am gleichen Ort die Energiedifferenz  $\Delta E = h \nu_{RF}$ . Mit Hilfe eines Hochfrequenz-Pulses der Energie  $E = h \nu_{RF}$  ist es nun möglich, Übergänge zwischen den verschiedenen Zeeman-

Unterkontingen der gefangenen Atome zu induzieren. Dadurch werden Atome in Zustände mit  $m < 0$  überführt und so zum Verlassen der Falle gezwungen, da für diese Atome das Magnetfeld abstoßend wirkt. Die Hochfrequenzeinstrahlung wirkt auf der gesamten Äquipotentialfläche der passenden Energie. Mittels der Variation der Strahlungsfrequenz lässt sich die Atomwolke so von Aussen nach innen "abschälen". Zwar ist der Teilchenverlust insgesamt hoch und beträgt mehr als 90%, dafür erreicht man weit tiefere Temperaturen bei gleichzeitig hohen Dichten, so dass die Phasenraumdichte um mehrere Ordnungen ansteigt und ein Bose-Einstein-Kondensat entstehen kann.

Aufgrund des hohen Verlustes an Atomen bei der Verdampfungskühlung ist eine der Hauptsorgen bei der Konstruktion einer BEC-Apparatur die Notwendigkeit, eine große Anzahl von Atomen in der optischen Melasse einzufangen. Andererseits ist eine geringe Dichte erforderlich, um eine lange Lebensdauer des Bose-Einstein-Kondensats zu erreichen. Diese zwei Bedingungen erfordern Gasdrücke, die sich um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Es gibt zwei konventionelle Arten, dieses Problem zu lösen: 1) mit einem System aus einem Zeeman-Slower und einer MOT und 2) mit einem System aus zwei MOTs.

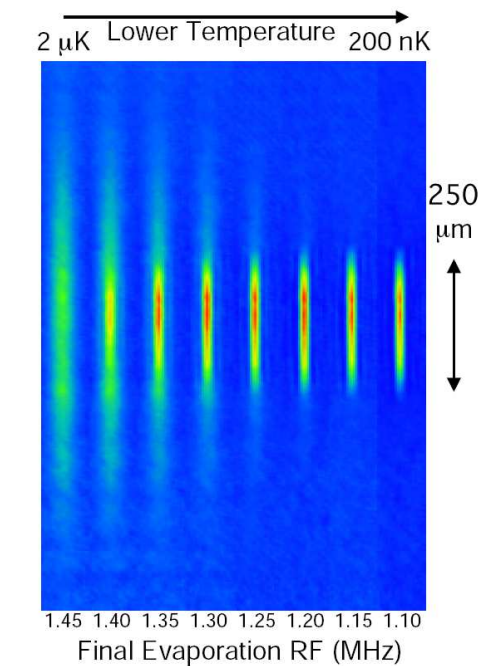
Der Aufbau des Systems aus einem Zeeman-Slower und einer MOT ist in Abbildung 1.6 gezeigt. Die Atome werden von einer Atomstrahlquelle abgestrahlt und passieren durch eine Spule, deren Magnetfeldstärke entgegengesetzt zur Abstrahlrichtung abnimmt. Eine solche Spulenkonfiguration wird als Zeeman-Slower bezeichnet. Dem Atomstrahl entgegen wird das Laserlicht eingestrahlt, dessen Frequenz so eingestellt ist, dass es mit Atomen der Geschwindigkeit  $v_0$  in Resonanz ist, welche gerade in den Zeeman-Slower eintreten. Diese Atome absorbieren das Licht und werden allmählich verlangsamt. Da sich ihre Geschwindigkeit ändert, verändert sich auch die Doppler-Verschiebung. Dieser Effekt wird durch die Veränderung der Zeeman-Aufspaltung mit Hilfe des schwächer werdenden Magnetfelds kompensiert. Die Atome mit einer Geschwindigkeit geringer als  $v_0$  bleiben in Resonanz und ihre Geschwindigkeit wird weiter reduziert. Auf diese Weise ist es möglich, eine Vielzahl von Atomen ohne großen Aufwand zu verlangsamen.

Bei der zweiten Lösung mit zwei MOTs wird eine MOT dazu genutzt, Atome aus dem Dampf bei Raumtemperatur einzufangen: Nach der Maxwell-Boltzmann-Verteilung existieren im Dampf einige Atome, deren Geschwindigkeit unterhalb der Einfanggeschwindigkeit von ca. 30 m/s liegt. Allerdings steht dieser Art von Befüllung das für moderne BEC-Apparaturen notwendige Ultrahochvakuum im Wege, so dass mit einer zweiten Kammer gearbeitet wird: Die erste MOT gewinnt ihre Atome aus dem Dampf und kühlt diese bereits vor. Danach werden die Atome mit Hilfe eines Laserstrahls in eine zweite MOT geschoben, welche im Ultrahochvakuum betrieben wird.

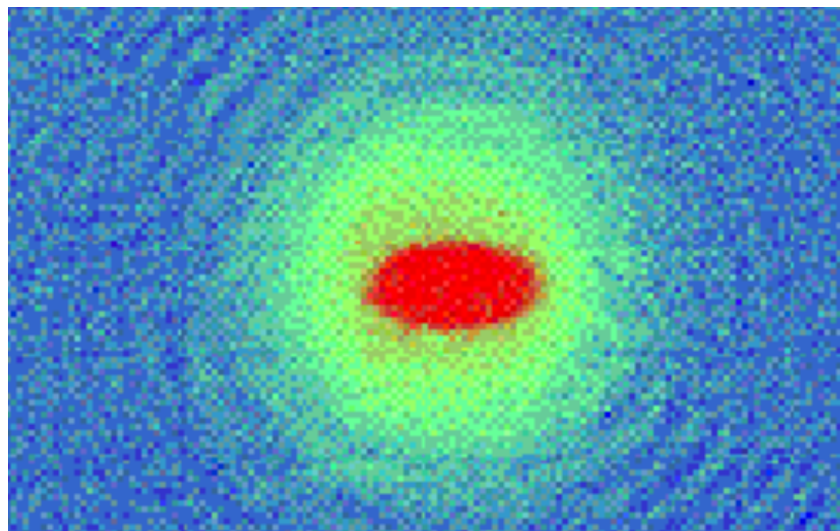
### 1.3.2 Untersuchungsmethoden

Optische Messungen physikalischer Größen sind bei einem Bose-Einstein-Kondensat wegen der hohen Dichte nicht ohne weiteres möglich. Was gemessen werden kann, ist jedoch die Dichteverteilung in der Atomwolke. Dazu werden entweder Dispersionsverfahren oder Absorptionsverfahren verwendet.

Dispersionsverfahren nutzen Laserlicht fernab der Resonanz. Mittels einer Photodiode oder eines CCD (Charge Coupled Device)-Chips werden Photonen detektiert, die elastisch in die Vorwärtsrichtung gestreut wurden. Die Information über die Dichteverteilung kann dann anschließend beispielsweise über die Phasenverschiebung, die das Licht im Kondensat erfährt, gewonnen werden. Um aus dieser Phasenmodulation wieder eine von einer CCD-Kamera aufnehmbare Amplitudenmodulation zu machen, lässt man das Licht, das vom Kondensat gestreut wurde, mit ungestreutem Licht interferieren. Da die Dispersionsverfahren das Kondensat nicht zerstören, werden sie für so genannte "in situ" Aufnahmen verwendet, bei denen das BEC in



**Abbildung 1.7:** Phasenkontrastaufnahme bei der Bildung eines Bose-Einstein-Kondensats aus Ref. [13]. Die Intensität des gestreuten Lichts ist ein Maß für die Dichte der Atome. Das Bild zeigt Aufnahmen einer Atomwolke kurz nach Überschreiten der kritischen Temperatur (ganz links) sowie bei immer niedrigeren Temperaturen (immer weiter rechts). Wenn die Temperatur erniedrigt wird, bildet sich das BEC im Zentrum der Wolke. Weitere Kühlung vergrößert den Kondensatteilchenanteil der Atomwolke auf fast 100%.



**Abbildung 1.8:** Time-of-flight-Aufnahme aus Ref. [13]. Die thermische Komponente breitet sich isotrop aus, während das Kondensat anisotrop ist. Die Time-of-flight-Aufnahmen repräsentieren die Geschwindigkeitsverteilung der expandierenden Wolke.



der Falle bleibt. Dadurch ist es möglich, die Dynamik des Kondensats zu beobachten (siehe Abbildung 1.7).

Bei einer Absorptionsmessung wird das Bose-Einstein-Kondensat dagegen mit resonantem Laser-Licht bestrahlt. Durch resonante Anregung werden Photonen absorbiert und fehlen im Strahl. Ihr Fehlen äußert sich in einem "Schatten" auf einer Photodiode oder einem CCD-Chip. Um eine bessere Auflösung zu erhalten, wird die Absorptionsmessung erst gemacht, nachdem die Falle abrupt ausgeschaltet worden ist und die Atomwolke expandiert ist. Man spricht in diesem Fall von "time-of-flight" Aufnahmen. Da sich alle Atome vor der Expansion fast am selben Ort befanden, entspricht die Dichteverteilung nach der Expansion der Geschwindigkeitsverteilung vor der Expansion (siehe Abbildung 1.8).

## 1.4 Überblick über die Diplomarbeit

In der vorliegenden Arbeit werden die globalen und die lokalen Eigenschaften von Bose-Einstein-Kondensaten im großkanonischen und kanonischen Ensemble untersucht. Gewöhnlich wird zur theoretischen Beschreibung von BEC das großkanonische Ensemble genutzt, das ein System bei einer vorgegebenen Temperatur und einem vorgegebenem chemischem Potential beschreibt. Der Grund dafür ist, dass es im Rahmen der semiklassischen Näherung die Möglichkeit bietet, analytische Ergebnisse zu erhalten. Die semiklassische Näherung ist jedoch nur im thermodynamischen Limes, d.h. im Grenzfall  $N \rightarrow \infty$ , exakt und muss daher für endliche Teilchenzahlen entsprechend korrigiert werden. Die experimentellen Randbedingungen werden besser durch das kanonische Ensemble wiedergegeben, das ein System bei einer vorgegebenen Teilchenzahl und Temperatur beschreibt. Der Nachteil besteht hier darin, dass die kanonischen Rechnungen nur numerisch ausgeführt werden können.

Kapitel 2 behandelt das großkanonische Ensemble. Nach einer Einleitung in Abschnitt 2.1 werden in Abschnitt 2.2 globale thermodynamische Größen wie zum Beispiel die kritische Temperatur, der Kondensatteilchenanteil und die Wärmekapazität untersucht. Als Ausgangspunkt dient dabei die semiklassische Näherung, bei der das Energiespektrum als kontinuierlich angenommen wird. Dies bedeutet, dass der Abstand zwischen zwei benachbarten Energieniveaus als klein gegenüber der thermischen Energie angenommen wird, d.h. es ist  $\hbar\beta\omega \ll 1$ . In Unterabschnitt 2.2.2 wenden wir uns dann der Untersuchung von Finite-Size-Korrekturen zu, welche die endliche Teilchenzahl der realen Bose-Einstein-Kondensate berücksichtigen. Dabei stellt sich heraus, dass eine naive  $\hbar\beta\omega$ -Entwicklung der thermodynamischen Größen unbefriedigende Resultate liefert, da sie nicht nach einer bestimmten Ordnung abgebrochen werden darf. Unterhalb der kritischen Temperatur tragen nämlich alle Entwicklungsterme zum Beitrag zweiter Ordnung bei, so dass bei einem Abbruch der Entwicklung die zweite Ordnung nicht vollständig ist. Der vorgestellte systematische Ansatz ist dennoch nützlich, da er einen einfachen Zugang zur Berechnung der Finite-Size-Korrekturen bietet, der auch für die anisotrope Falle angewendet werden kann.

Daher wird in Unterabschnitt 2.2.5 ein alternatives Verfahren zur Berechnung der Finite-Size-Korrekturen betrachtet, bei dem die Energiezustände exakt behandelt werden. Dieser Ansatz ermöglicht es insbesondere, die Korrekturen 2. Ordnung der Teilchengleichung für die isotrope Falle zu bestimmen. Die Schwierigkeit dieses Verfahrens liegt darin, dass es eine exakte Ausführung komplizierter Integrale erfordert. Schließlich wird in Unterabschnitt 2.2.6 eine exakte Berechnung der thermodynamischen Größen im großkanonischen Ensemble durchgeführt, um den Erfolg der semiklassischen Näherungen einschätzen zu können.

In Abschnitt 2.3 wird die Teilchendichte untersucht. Nach der Vorstellung des einfachen semiklassischen Ansatzes in Unterabschnitt 2.3.1 wenden wir uns wieder der Berechnung der Finite-Size-Korrekturen zu. Hierzu wird zunächst in Unterabschnitt 2.3.2 eine kurze feldtheoretische

Einführung gegeben, da wir einen exakten Ausdruck für die Teilchendichte benötigten. Ausgehend von der exakten Teilchendichte werden in Unterabschnitt 2.3.3 die Finite-Size-Korrekturen ausgerechnet. Eine naive  $\hbar\beta\omega$ -Entwicklung der Teilchendichte hat sich auch in diesem Fall als unbrauchbar erwiesen, da bereits in der ersten Ordnung unphysikalische Divergenzen auftauchen. Daher wird die Dichteverteilung zunächst Fourier transformiert und erst anschließend entwickelt. Dies liefert ein konvergentes Ergebnis. Zum Vergleich der semiklassischen Ergebnisse werden schließlich in Unterabschnitt 2.3.4 die exakten Ergebnisse diskutiert. Ein 3D-Plot der numerisch berechneten exakten Dichteverteilung für die anisotrope Falle mit Frequenzen  $\omega_1 = \omega_2 = \sqrt{8} \omega_3$  wie im Experiment in [1] ist auf dem Titelblatt wiedergegeben. Es zeigt die Dichte für 1000 Teilchen bei Temperaturen  $T/T_C^0 = 0.9, 0.5, 0$  im Ortsraum.

In Kapitel 3 wird das kanonischen Ensemble betrachtet. Dazu wird zunächst in Abschnitt 3.1 der Pfadintegral-Formalismus in der Imaginärzeit beschrieben, mit dessen Hilfe die Imaginärzeitamplitude für ein Teilchen und für  $N$  Teilchen eingeführt werden. In Abschnitt 3.2 wird dann die Rekursionsformel für die Ein-Teilchen-Dichtematrix in einem  $N$ -Teilchen Ensemble hergeleitet sowie ihre numerische Berechnung diskutiert. Davon ausgehend wird in Abschnitt 3.3 eine Rekursionsformel für den Kondensatteilchenanteil abgeleitet. Danach wird in Abschnitt 3.4 kurz das bekannte Ergebnis für die Rekursion der Wärmekapazität beschrieben. Der Vergleich von kanonischen und großkanonischen Ergebnissen für die kritische Temperatur und die Dichteverteilungen schließt das Kapitel ab.





## Kapitel 2

# Großkanonisches Ensemble

Im großkanonischen Ensemble wird ein offenes System beschrieben, das Wärme und Teilchen mit der Umgebung austauschen kann. Dadurch fluktuieren die Energie und die Teilchenzahl der Mikrozustände im Ensemble. Die Wahrscheinlichkeit für die einzelnen Mikrozustände  $\nu$  lautet:

$$p_\nu = \frac{e^{-\beta(E_\nu - \mu N_\nu)}}{Z_G}. \quad (2.1)$$

Dabei ist  $\beta = 1/k_B T$  die reduzierte Temperatur und  $Z_G$  die großkanonische Zustandssumme

$$Z_G = \sum_\nu e^{-\beta(E_\nu - \mu N_\nu)}. \quad (2.2)$$

Die großkanonische freie Energie  $F_G$  ist mit der großkanonischen Zustandssumme durch die Relation

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \ln Z_G \quad (2.3)$$

verknüpft. Zur Bestimmung des Zusammenhangs der großkanonischen freien Energie mit den thermodynamischen Größen Entropie, Druck und Teilchenzahl wird die Grundrelation der Thermodynamik für reversible Prozesse benötigt, bei der das Differential der inneren Energie  $U$  eingeführt wird [14, 3.6.1]:

$$dU = TdS - pdV + \mu dN. \quad (2.4)$$

Dieses geht durch die doppelte Legendre-Transformation

$$F_G = U - TS - \mu N \quad (2.5)$$

in das totale Differential der großkanonischen freien Energie über:

$$dF_G = -SdT - pdV - Nd\mu. \quad (2.6)$$

Aus dieser Relation können sofort die folgenden Identitäten abgeleitet werden:

$$S(T, V, \mu) = -\left. \frac{\partial F_G(T, V, \mu)}{\partial T} \right|_{V, \mu}, \quad (2.7)$$

$$p(T, V, \mu) = -\left. \frac{\partial F_G(T, V, \mu)}{\partial V} \right|_{T, \mu}, \quad (2.8)$$

$$N(T, V, \mu) = -\left. \frac{\partial F_G(T, V, \mu)}{\partial \mu} \right|_{T, V}. \quad (2.9)$$

## 2.1 Vielteilchensysteme und BEC

Im Folgenden wird ein System aus  $N$  identischen nichtwechselwirkenden Teilchen betrachtet. Die Basis eines  $N$ -Teilchen-Systems kann besonders einfach konstruiert werden ausgehend von einem Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , der sich additiv aus Einteilchenoperatoren  $\hat{H}_i$  zusammensetzt, welche im jeweiligen Zustandsraum eines Teilchens wirken:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i. \quad (2.10)$$

Aus der Lösung der Eigenwertprobleme der Operatoren  $\hat{H}_i$

$$\hat{H}_i |\psi_{\mathbf{k}_i}\rangle = E_{\mathbf{k}_i} |\psi_{\mathbf{k}_i}\rangle \quad (2.11)$$

ergibt sich dann der Gesamtzustand des Systems als das direkte Produkt der Einteilchenzustandsvektoren

$$|\psi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_N}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}_1}\rangle |\psi_{\mathbf{k}_2}\rangle \cdots |\psi_{\mathbf{k}_N}\rangle. \quad (2.12)$$

Dabei befindet sich das Teilchen 1 im Quantenzustand  $|\psi_{\mathbf{k}_1}\rangle$ , das Teilchen 2 im Quantenzustand  $|\psi_{\mathbf{k}_2}\rangle$  usw. Die oben durchgeführte Markierung der Teilchen mittels Nummern ist nur ein rechen-technisches Hilfsmittel. Da die Observablen  $\hat{F}$  nicht von der Nummerierung abhängen dürfen, müssen sie mit allen Permutationsoperatoren kommutieren:

$$[\hat{F}, \hat{P}] = 0. \quad (2.13)$$

Die Permutationsgruppe bestehend aus allen Permutationen von  $N$  Objekten hat  $N!$  Elemente. Jede Permutation  $\hat{P}$  kann als Produkt von Transpositionen  $\hat{P}_{ij}$  dargestellt werden, welche auf einen beliebigen  $N$ -Teilchen-Zustand die Wirkung

$$\hat{P}_{ij} |\psi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_i, \dots, \mathbf{k}_j, \dots}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_j, \dots, \mathbf{k}_i, \dots}\rangle \quad (2.14)$$

haben, d.h. die Teilchen  $i \leftrightarrow j$  vertauschen. Die Zerlegung einer Permutation in Transpositionen ist nicht eindeutig. Für eine gegebene Permutation bleibt jedoch die Parität der Anzahl der Transpositionen immer gleich. Man kann deshalb einer Permutation eine Parität  $p(P)$  zuweisen. Eine Permutation heißt gerade, wenn die Anzahl der Transpositionen, in die sie sich zerlegen lässt, gerade ist. Andernfalls heißt sie ungerade. Da die Permutationsoperatoren für  $N > 2$  nicht vertauschen, ist es nicht möglich, eine Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren dieser Operatoren zu konstruieren. Es gibt aber Zustände, die gemeinsame Eigenvektoren aller Permutationsoperatoren sind. Ein Vektor  $|\psi_S\rangle$ , für den bei jeder beliebigen Permutation  $\hat{P}$

$$\hat{P} |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \quad (2.15)$$

gilt, heißt total symmetrisch. Gilt bei jeder beliebigen Permutation dagegen

$$\hat{P} |\psi_A\rangle = (-1)^{p(P)} |\psi_A\rangle, \quad (2.16)$$

dann heißt der Vektor  $|\psi_A\rangle$  total antisymmetrisch. In mehr als zwei Dimensionen werden die physikalische Zustände entweder durch total symmetrische Vektoren für die Bosonen oder durch total antisymmetrische Vektoren für die Fermionen repräsentiert. Man erhält die total symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zustände durch die Anwendung des Symmetrisierungsoperators

$$\hat{S} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\hat{P}} \hat{P} \quad (2.17)$$

bzw. Antisymmetrisierungsoperators

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\hat{P}} (-1)^{p(P)} \hat{P} \quad (2.18)$$

auf einen  $N$ -Teilchenzustand (2.12):

$$|\psi_S\rangle = \hat{S} |\psi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_i, \dots, \mathbf{k}_j, \dots}\rangle \quad (2.19)$$

und

$$|\psi_A\rangle = \hat{A} |\psi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_i, \dots, \mathbf{k}_j, \dots}\rangle. \quad (2.20)$$

Wenn im Zustand (2.12) Einteilchenzustände mehrfach auftreten, dann ist der total symmetrische Zustand  $|\psi_S\rangle$  nicht auf 1 normiert. Tritt der erste Zustand  $n_1$  mal auf, der zweite  $n_2$  usw., dann sind in (2.19) von den  $N!$  Termen nur  $N!/(n_1!n_2!\dots)$  Terme verschieden, d.h. die normierten Bose-Basis-Zustände sind:

$$|\psi_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\dots}} |\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\dots}} \sum_{\hat{P}} \hat{P} |\psi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_i, \dots, \mathbf{k}_j, \dots}\rangle. \quad (2.21)$$

Der Zustand (2.21) ist vollkommen charakterisiert durch Angabe der Besetzungszahlen

$$|\psi_B\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (2.22)$$

Im Fall von Fermionen verschwindet der antisymmetrische Zustand  $|\psi_A\rangle$  entsprechend dem Pauli-Prinzip, wenn Einteilchenzustände mehrfach auftreten. Bei Bosonen können die Besetzungszahlen alle möglichen Werte annehmen. Für die Energie und die Teilchenzahl des Mikrozustands  $\nu$  gilt dabei:

$$N_\nu = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}, \quad (2.23)$$

$$E_\nu = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}. \quad (2.24)$$

Der Index  $\mathbf{k}$  läuft über alle Einteilchenzustände. In Besetzungszahldarstellung lautet die großkanonischen Zustandssumme (2.2)

$$Z_G = \prod_{\mathbf{k}} \left[ \sum_{n_{\mathbf{k}}} e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)n_{\mathbf{k}}} \right], \quad (2.25)$$

wobei  $\beta = 1/k_B T$  ist. Im Folgenden beschränken wir uns auf Bosonen, welche die Ein-Teilchen-Zustände  $\mathbf{k}$  mit beliebig vielen Teilchen besetzen:  $n_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots$ . Für  $\mu \leq E_{\mathbf{k}}$  führt dies für jedes  $\mathbf{k}$  auf eine geometrische Reihe in (2.25), die sich unmittelbar auswerten lässt:

$$Z_G = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)}}. \quad (2.26)$$

Damit ergibt sich die großkanonische freie Energie (2.3) zu

$$F_G = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[ 1 - e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)} \right]. \quad (2.27)$$

Mit deren Hilfe kann die Teilchenzahl nach (2.9) berechnet werden

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1}. \quad (2.28)$$

Die Teilchenzahl  $N$  ergibt sich demnach dadurch, dass die Bose-Einstein-Verteilung als mittlere Besetzung über alle Ein-Teilchen-Zustände aufzusummieren ist. Die Besetzungszahl des Grundzustands entspricht dem ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ )-Term in (2.28)

$$N_{\mathbf{0}} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{0}}-\mu)} - 1}. \quad (2.29)$$

Wenn das chemische Potential genügend nahe bei  $E_{\mathbf{0}}$  ist, wird diese Anzahl dominierend. Das interessante dabei ist, dass dies bei einer Temperatur ungleich null passiert. Darauf lässt sich letztlich das makroskopische Quantenphänomen der Bose-Einstein-Kondensation zurückführen. Für weitere Berechnungen wird die Gesamtteilchenzahl (2.28) in einen Kondensatteilchenanteil (2.29) und einen thermischen Anteil aufgeteilt

$$N = N_{\mathbf{0}} + N_T, \quad (2.30)$$

wobei  $N_T$  durch

$$N_T = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}}-\mu)} - 1} \quad (2.31)$$

gegeben ist. Betrachtet man das Verhalten der Gesamtteilchenzahl (2.30) in Abhängigkeit von der Temperatur, so lassen sich zwei Phasen ausmachen: Die obere Phase, bei der  $\mu$  viel kleiner als  $E_{\mathbf{0}}$  ist, ist dadurch gekennzeichnet, dass die Anzahl der Teilchen im Grundzustand verschwindend gering ist. Die untere Phase, bei der  $\mu$  sehr nahe bei  $E_{\mathbf{0}}$  ist, ist durch den dominierenden Grundzustandsanteil ausgezeichnet. Im thermodynamischen Limes lassen sich die Bedingungen  $\mu < E_{\mathbf{0}}$  und  $N_{\mathbf{0}} = 0$  für die obere Phase sowie  $\mu = E_{\mathbf{0}}$  für die untere Phase angeben. In diesem Fall gibt es eine wohldefinierte kritische Temperatur  $T_C$ , welche die beiden Phasen voneinander trennt.

## 2.2 Globale thermodynamische Eigenschaften

Im vorliegenden Abschnitt diskutieren wir die thermodynamischen Eigenschaften eines nicht-wechselwirkenden Bose-Gases in einem harmonischen Potential

$$V(\mathbf{x}) = \frac{M}{2} (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2), \quad (2.32)$$

wodurch die experimentelle Situation gut genähert werden kann [1]. Dabei bezeichnen  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  und  $\omega_3$  die Oszillator-Frequenzen in den drei Raumrichtungen. Da dieses Potential additiv in den einzelnen Raumkomponenten ist, setzen sich die Eigenfunktionen des Einteilchen-Hamilton-Operators  $\hat{H}$  multiplikativ aus den Lösungen für das eindimensionale Problem zusammen:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \exp \left\{ -\frac{M(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2)}{2\hbar} \right\} \prod_{i=1}^3 \sqrt{\frac{1}{2^{k_i} k_i!}} \left( \frac{M\omega_i}{\pi\hbar} \right)^{1/4} H_{k_i} \left( \sqrt{\frac{M\omega_i}{\hbar}} x_i \right). \quad (2.33)$$

Dabei bezeichnen  $H_{k_i}(x)$  die Hermite-Polynome. Die Grundzustandsfunktion mit  $k_i = 0$  für  $i = 1, 2, 3$  lautet explizit:

$$\psi_{\mathbf{0}}(\mathbf{x}) = \left( -\frac{M\tilde{\omega}}{\pi\hbar} \right)^{3/4} \exp \left\{ -\frac{M(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2)}{2\hbar} \right\}, \quad (2.34)$$

wobei hier das geometrische Mittel

$$\tilde{\omega} = (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/3} \quad (2.35)$$

verwendet wurde. Die Energie-Eigenwerte setzen sich additiv aus den Eigenwerten des eindimensionalen Problems zusammen:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= \left(k_1 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_1 + \left(k_2 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_2 + \left(k_3 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_3 \\ &= E_0 + \hbar(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3) \end{aligned} \quad (2.36)$$

mit Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar\bar{\omega} \quad (2.37)$$

und dem algebraischen Mittelwert der Frequenzen

$$\bar{\omega} = \frac{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3}{3}. \quad (2.38)$$

Für das großkanonische Potential (2.27) erhält man mit den obigen Energiewerten den folgenden Ausdruck

$$F_G = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[ 1 - e^{-\beta \hbar(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3) + \beta \hat{\mu}} \right]. \quad (2.39)$$

Dabei ist das reduzierte chemische Potential unter Verwendung der Grundzustandsenergie (2.37) wie folgt definiert:

$$\hat{\mu} = \mu - E_0. \quad (2.40)$$

Daraus ergibt sich die Teilchenzahl nach (2.9) zu:

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{-\beta \hbar(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3) + \beta \hat{\mu}} - 1}. \quad (2.41)$$

### 2.2.1 Semiklassische Näherung

Im Folgenden werden die Berechnungen mittels semiklassischer Näherung durchgeführt [15–17]. Dabei wird angenommen, dass der Abstand zwischen zwei benachbarten quantenmechanischen Energieniveaus klein gegenüber der thermischen Energie  $1/\beta$  ist, d.h. dass die Bedingung

$$\beta \hbar \omega_i \ll 1 \quad (2.42)$$

erfüllt ist. Dies gilt für nicht sehr große Werte von  $\beta$  und  $\omega_i$  aufgrund der Kleinheit von  $\hbar$ , was auch im Grenzfall der klassischen Mechanik der Fall ist. Aus der Abhängigkeit der mittleren Breite des Grundzustands der harmonischen Falle

$$L_{\omega_i} = \left( \frac{\hbar}{M\omega_i} \right)^{1/2} \quad (2.43)$$

von der Frequenz folgt, dass harmonische Fallen mit kleineren Frequenzen effektiv größere Volumina ausfüllen. Soll das Bose-Gas eine bestimmte Dichte haben, so muss mit einem größer werdenden Volumen auch die Teilchenzahl  $N$  ansteigen. Daraus folgt, dass die semiklassische Näherung (2.42) in führender Ordnung, also für  $\beta \hbar \omega_i \rightarrow 0$ , den thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  ergibt.

Als erstes Ziel wollen wir die Teilchenzahl berechnen. Dabei betrachten wir die Besetzung des Grundzustands (2.29) separat und setzen  $\tilde{E} = E - E_0$ . Bei der thermischen Anzahl  $N_T$  ersetzen wir die Summe über verschiedene  $\mathbf{k}$ -Zustände (2.31) durch ein Integral über die Energiezustände:

$$N = N_0 + N_T = \frac{1}{e^{-\beta \hat{\mu}} - 1} + \int_0^\infty d\tilde{E} \frac{\rho(\tilde{E})}{e^{\beta(\tilde{E} - \hat{\mu})} - 1}. \quad (2.44)$$

Durch die Energiezustandsdichte  $\rho(\tilde{E})$  wird dabei die Entartung der Energiezustände berücksichtigt. Zur Bestimmung der Energiezustandsdichte wird die Anzahl der Zustände  $G(\tilde{E})$  berechnet, für welche  $\hbar(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3)$  kleiner oder gleich einer gegebenen Energie  $\tilde{E}$  ist. Für Energien, die groß gegenüber  $\hbar\omega_i$  sind, kann man  $k_i$  als kontinuierliche Variablen betrachten. Wechselt man zu einem Koordinatensystem mit den Achsen  $\tilde{E}_i = \hbar\omega_i k_i$ , dann ist die Oberfläche konstanter Energie die Ebene  $\tilde{E} = \tilde{E}_1 + \tilde{E}_2 + \tilde{E}_3$  und  $G(\tilde{E})$  ist proportional zum Volumen im ersten Oktanten. Unter Beachtung der Funktionaldeterminante  $d\tilde{E}_i/dk_i = 1/\hbar\omega_i$  erhält man folgenden Ausdruck für die Anzahl der Zustände in der harmonischen Falle

$$G(\tilde{E}) = \frac{1}{\hbar^3 \tilde{\omega}^3} \int_0^{\tilde{E}} d\tilde{E}_1 \int_0^{\tilde{E}-\tilde{E}_1} d\tilde{E}_2 \int_0^{\tilde{E}-\tilde{E}_1-\tilde{E}_2} d\tilde{E}_3 = \frac{\tilde{E}^3}{6(\hbar\tilde{\omega})^3} \quad (2.45)$$

mit  $\tilde{\omega}$  aus (2.35). Die Zustandsdichte ergibt sich daraus entsprechend der Beziehung  $\rho(E) = dG/dE$ :

$$\rho(\tilde{E}) = \frac{\tilde{E}^2}{2(\hbar\tilde{\omega})^3}. \quad (2.46)$$

Die thermische Teilchenzahl aus (2.44) beträgt somit

$$N_T = \frac{1}{2(\hbar\tilde{\omega})^3} \int_0^\infty d\tilde{E} \frac{\tilde{E}^2}{e^{\beta(\tilde{E}-\hat{\mu})} - 1}. \quad (2.47)$$

Dieses Integral lässt sich durch Einführung der Fugazität

$$\hat{z} = e^{\beta\hat{\mu}} \quad (2.48)$$

sowie die Substitution  $x = \beta\tilde{E}$  auf die allgemeine Klasse polylogarithmischer Funktionen zurückführen

$$\zeta_\nu(\hat{z}) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{\hat{z}^{-1}e^x - 1}. \quad (2.49)$$

Diese werden im Anhang A ausführlich vorgestellt. Die thermische Teilchenzahl lautet somit

$$N_T = \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta_3(\hat{z}). \quad (2.50)$$

Oberhalb der kritischen Temperatur liefert (2.50) eine implizite Gleichung, aus der numerisch das chemische Potential  $\hat{\mu}$  berechnet werden kann. Des Weiteren lässt sich aus (2.50) die kritische Temperatur  $T_C^0$  im thermodynamischen Limes ableiten, die durch gleichzeitige Erfüllung der Bedingungen  $N_0/N = 0$  für die obere Phase und  $\mu = E_0 = 0$  bzw.  $\hat{z} = 1$  für die untere Phase gekennzeichnet ist. Unter Verwendung der Relation  $\zeta_3(1) = \zeta(3)$  erhält man den folgenden Ausdruck für die kritische Temperatur

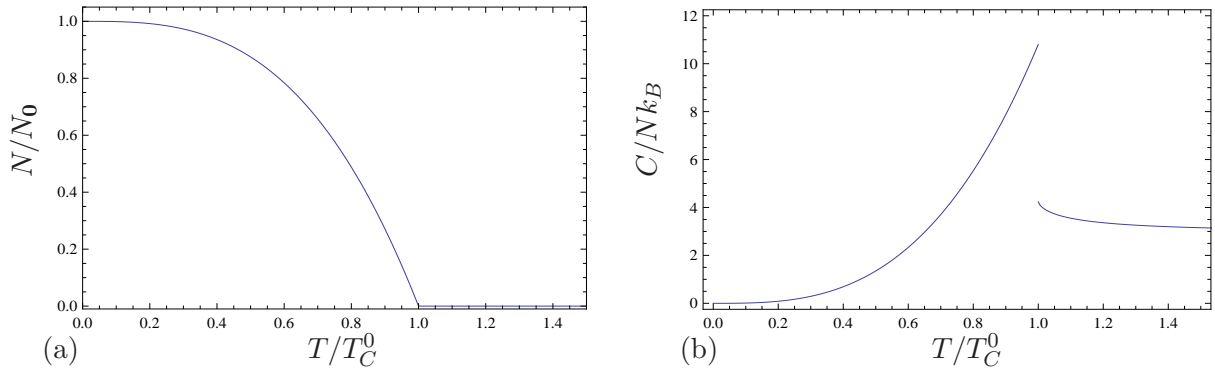
$$T_C^0 = \frac{\hbar\tilde{\omega}}{k_B} \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}. \quad (2.51)$$

Für  $T < T_C^0$  lautet die Gesamtteilchenzahl

$$N = N_0 + \frac{1}{(\hbar\beta\tilde{\omega})^3} \zeta(3), \quad (2.52)$$

was mit Hilfe der kritischen Temperatur (2.51) die Teilchenanzahl im Kondensat liefert:

$$N_0 = N \left\{ 1 - \left( \frac{T}{T_C^0} \right)^3 \right\}. \quad (2.53)$$



**Abbildung 2.1:** (a) Kondensatteilchenanteil entsprechend (2.53) und (b) Wärmekapazität entsprechend (2.64) für  $T > T_C^0$  bzw. (2.68) für  $T < T_C^0$ .

Der Verlauf des Kondensatteilchenanteils  $N/N_0$  ist in Abbildung 2.1(a) dargestellt. Während der Kondensatteilchenanteil für  $T > T_C^0$  verschwindet, wächst er für  $T < T_C^0$  schnell an. Die Funktion ist stetig, hat aber einen Knick bei  $T = T_C^0$ , was auf einen Phasenübergang hinweist.

Wir berechnen nun die Wärmekapazität, die sich als die Ableitung der inneren Energie  $U$  nach der Temperatur bei konstanter Teilchenzahl ergibt:

$$C = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{V,N}. \quad (2.54)$$

Die innere Energie erhält man durch Umformung von (2.5):

$$U = F_G + TS + \mu N. \quad (2.55)$$

Die großkanonische freie Energie (2.27) wird wieder semiklassisch mit einem Integral über die Energiezustände mit der Zustandsdichte  $\rho(\tilde{E})$  gemäß (2.46) genähert:

$$F_G = \frac{1}{\beta} \ln [1 - e^{\beta\hat{\mu}}] + \frac{1}{\beta} \int_0^\infty d\tilde{E} \rho(\tilde{E}) \ln [1 - e^{-\beta(\tilde{E}-\hat{\mu})}]. \quad (2.56)$$

Für  $T > T_C^0$  nimmt das chemische Potential rasch große negative Werte an, so dass der erste Summand vernachlässigt werden kann. Partielle Integration führt zu

$$F_G = -\frac{1}{6(\hbar\tilde{\omega})^3} \int_0^\infty d\tilde{E} \frac{\tilde{E}^3}{e^{\beta(\tilde{E}-\hat{\mu})} - 1}, \quad (2.57)$$

was mit Substitution  $x = \beta\tilde{E}$  durch polylogarithmische Funktionen (2.49) ausgedrückt werden kann

$$F_G = -\frac{1}{\beta(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \zeta_4(\hat{z}). \quad (2.58)$$

Die Entropie ergibt sich daraus gemäß (2.7) zu

$$S = \frac{k_B}{(\beta\hbar\tilde{\omega})^3} [4\zeta_4(\hat{z}) - \beta\mu\zeta_3(\hat{z})]. \quad (2.59)$$

Mit diesen Ergebnissen sowie der Teilchenzahl (2.50) lautet die innere Energie (2.55)

$$U = \frac{3\zeta_4(\hat{z})}{\beta(\hbar\beta\tilde{\omega})^3}, \quad (2.60)$$

was sich mit Hilfe von (2.50) als Funktion der Teilchenzahl ausdrücken lässt

$$U = 3Nk_B T \frac{\zeta_4(\hat{z})}{\zeta_3(\hat{z})}. \quad (2.61)$$

Für die Wärmekapazität  $C_>$  bei  $T > T_C^0$  erhält man zunächst:

$$C_> = Nk_B \frac{3\zeta_4(\hat{z})}{\zeta_3(\hat{z})} + 3Nk_B T \frac{1}{\hat{z}} \frac{\partial \hat{z}}{\partial T} \left[ 1 - \frac{\zeta_4(\hat{z})\zeta_2(\hat{z})}{\zeta_3^2(\hat{z})} \right]. \quad (2.62)$$

Die dabei auftretende innere Ableitung wird durch Differentiation von (2.50) bestimmt:

$$\left. \frac{1}{\hat{z}} \frac{\partial \hat{z}}{\partial T} \right|_{V,N} = -\frac{3}{T} \frac{\zeta_3(\hat{z})}{\zeta_2(\hat{z})}. \quad (2.63)$$

Dabei wurde benutzt, dass die Wärmekapazität bei festgehaltener Teilchenzahl berechnet wird, so dass  $\partial N/\partial T = 0$  ist. Damit erhält man für die Wärmekapazität bei Temperaturen  $T > T_C^0$

$$\frac{C_>}{Nk_B} = 12 \frac{\zeta_4(\hat{z})}{\zeta_3(\hat{z})} - 9 \frac{\zeta_3(\hat{z})}{\zeta_2(\hat{z})}. \quad (2.64)$$

Im Hochtemperaturlimes geht (2.64) in das Dulong-Petit-Gesetz des 3-dimensionalen harmonischen Oszillators über:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} C_> = 3k_B N. \quad (2.65)$$

Am kritischen Punkt ist  $\hat{z} = 1$  und wir erhalten

$$\lim_{T \downarrow T_C^0} C_> = k_B N \left[ \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)} - \frac{9\zeta(3)}{\zeta(2)} \right]. \quad (2.66)$$

Bei der Tieftemperaturphase  $T < T_C^0$  wird angenommen, dass die in den Grundzustand kondensierten Bosonen nicht zur Energie beitragen. Daher wird die innere Energie ausgehend von der Gleichung (2.60) bei  $\hat{z} = 1$

$$U = \frac{3\zeta(4)}{(\hbar\tilde{\omega})^3} k_B^4 T^4 \quad (2.67)$$

berechnet. Unter Ausnutzung der kritischen Temperatur (2.51) ergibt sich daraus die Wärmekapazität für  $T < T_C^0$  nach (2.54):

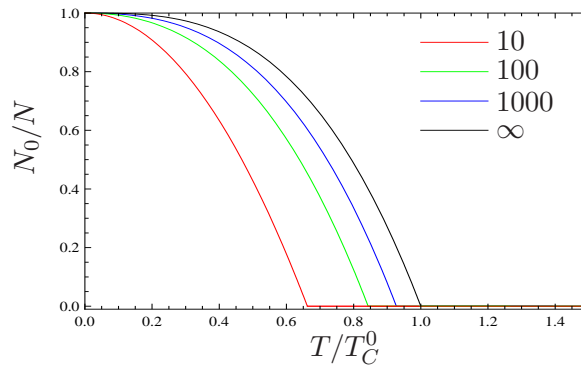
$$\frac{C_<}{k_B N} = 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \left( \frac{T}{T_C^0} \right)^3. \quad (2.68)$$

Am absoluten Nullpunkt ist die Wärmekapazität gemäß dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik null und beim kritischen Punkt nimmt die Wärmekapazität den Wert

$$\lim_{T \uparrow T_C^0} C_< = k_B N \frac{12\zeta(4)}{\zeta(3)}. \quad (2.69)$$

an. Der Vergleich von (2.66) und (2.69) zeigt, dass die Wärmekapazität am kritischen Punkt unstetig ist (siehe auch Abbildung 2.1(b)). Demnach handelt es sich bei der Bose-Einstein-Kondensation eines Gases in einer harmonischen Falle um einen Phasenübergang zweiter Ordnung nach Ehrenfest.





**Abbildung 2.2:** Vergleich der Kondensatanteile (2.78) für verschiedene Teilchenzahlen. Zusätzlich ist das im thermodynamischen Limes gültige Ergebnis (2.53) dargestellt.

### 2.2.2 Finite-Size-Korrekturen erster Ordnung

Bei den experimentellen Realisierungen der Bose-Einstein-Kondensate variiert die Anzahl der Teilchen von wenigen Tausend [1] bis zu einigen Millionen [2]. Dies führt zu der Fragestellung, inwieweit die Ergebnisse des thermodynamischen Limes auf die experimentelle Situation zutreffen bzw. wie die endliche Teilchenzahl in den Experimenten bei der theoretischen Beschreibung berücksichtigt werden kann. Während bei der exakten Auswertung der Teilchengleichung (siehe Abschnitt 2.2.6) die Auswirkungen aufgrund der endlichen Teilchenzahl durch entsprechende Bestimmung des chemischen Potentials  $\mu$  als Funktion von  $N$  und  $T$  von vornherein enthalten sind, werden diese Auswirkungen beim semiklassischen Zugang durch so genannte Finite-Size-Korrekturen berücksichtigt.

Dazu haben Grossmann und Holthaus in [18] vorgeschlagen, die Zustandsdichte (2.46) mit einem zusätzlichen Korrekturterm zu ergänzen. Die Autoren führen in [18] nicht explizit aus, wie sie den Korrekturterm abgeleitet haben, eine Möglichkeit für den isotropen harmonischen Oszillator ist zum Beispiel die exakte Umwandlung der dreifachen Summation in (2.41) in eine einfache Summation. Dabei sind die Energieniveaus eines Teilchens durch  $\tilde{E}_{\mathbf{k}} = \hbar\omega(k_1 + k_2 + k_3)$  gegeben, wobei  $k_i$  die Werte  $k_i = 0, 1, 2, \dots$  annehmen. Setzt man zunächst  $k' = k_1 + k_2$ , so kann wie folgt vereinfacht werden:

$$\sum_{k_1, k_2, k_3=0}^{\infty} f(k_1 + k_2 + k_3) = \sum_{k', k_3=0}^{\infty} \sum_{k_1=0}^{k'} f(k' + k_3) = \sum_{k', k_3=0}^{\infty} f(k' + k_3)(k' + 1). \quad (2.70)$$

In einem weiteren Schritt setzt man  $k = k' + k_3$  und erhält

$$\sum_{k', k_3=0}^{\infty} f(k' + k_3)(k' + 1) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{k'=0}^k f(k)(k' + 1) = \sum_{k=0}^{\infty} f(k) \frac{(k+2)(k+1)}{2}. \quad (2.71)$$

Es gilt also die folgende Beziehung:

$$\sum_{k_1, k_2, k_3=0}^{\infty} f(k_1 + k_2 + k_3) = \sum_{k=0}^{\infty} f(k) (k^2/2 + 3k/2 + 1). \quad (2.72)$$

Die Teilchenzahl (2.41) lässt sich daher im isotropen Fall auf die einfache Reihe

$$N = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(E_k - \hat{\mu})} - 1} (k^2/2 + 3k/2 + 1) \quad (2.73)$$

zurückführen. Die Energiezustandsdichte kann nun mit den ersten beiden Termen in (2.73) konstruiert werden:

$$\rho(\tilde{E}) = \frac{1}{2} \frac{\tilde{E}^2}{(\hbar\omega)^3} + \frac{3}{2} \frac{\tilde{E}}{(\hbar\omega)^2}. \quad (2.74)$$

Damit lässt sich der semiklassische Ausdruck für die Teilchenzahl (2.44) als Summe zweier Integrale schreiben und man erhält anstatt (2.50) den Ausdruck:

$$N = N_0 + \frac{1}{(\hbar\beta\omega)^3} \zeta_3(\hat{z}) + \frac{3}{2} \frac{1}{(\hbar\beta\omega)^2} \zeta_2(\hat{z}). \quad (2.75)$$

Die kritische Temperatur ergibt sich daraus wieder durch Einhaltung der Bedingungen für die obere und untere Phasen  $\hat{z} = 1$  und  $N_0/N = 0$

$$T_C^1 = \frac{\hbar\omega}{k_B} \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} \left\{ 1 - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{\zeta(2)}{2 \zeta(3)} \right\}. \quad (2.76)$$

Der Korrekturterm verringert die ursprüngliche kritische Temperatur (2.51) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl: Je kleiner die Teilchenzahl, desto größer fällt diese Korrektur aus. Unterhalb dieser kritischen Temperatur ergibt sich für den Kondensatteilchenanteil  $N_0/N$  mit Hilfe von (2.75) und (2.76):

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left( \frac{T}{T_C^0} \right)^3 - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{3 \zeta(2)}{2 \zeta(3)} \left( \frac{T}{T_C^0} \right)^2 + \mathcal{O}(N^{-2/3}) \quad (2.77)$$

Man kann die Teilchenzahlgleichung aber auch als Funktion von  $T/T_C$  mit kritischer Temperatur (2.76) schreiben:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left( \frac{T}{T_C} \right)^3 - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{3 \zeta(2)}{2 \zeta(3)} \left[ \left( \frac{T}{T_C} \right)^2 - \left( \frac{T}{T_C} \right)^3 \right] + \mathcal{O}(N^{-2/3}). \quad (2.78)$$

Das Resultat (2.78) ist gegenüber (2.77) vorzuziehen, denn es liefert am kritischen Punkt  $T/T_C = 1$  sofort einen verschwindenden Wert, während sich nach (2.77) noch störungstheoretisch bedingte Rest-Terme ergeben. Bei der graphischen Darstellung wird zunächst eine Umparametrisierung der Temperaturwerte gemäß  $T/T_C = (T/T_C^0)(T_C^0/T_C)$  vorgenommen, damit die Verschiebung der kritischen Temperatur aufgrund der endlichen Systemgröße sichtbar wird. Abbildung 2.2 zeigt die Auswirkung geringer Teilchenzahlen auf den Kondensatteilchenanteil, nämlich dass die Kondensation für kleinere Teilchenzahlen bei niedrigeren Temperaturen einsetzt. Für  $N \rightarrow \infty$  geht der Kondensatteilchenanteil in das Ergebnis (2.53) über, das durch die schwarze Kurve dargestellt ist.

### 2.2.3 Euler-MacLaurin-Methode

Einen anderen Ansatz zur Berechnung von Finite-Size-Korrekturen verfolgen Haugset et. al in [19]; sie verändern den semiklassischen Zugang insofern, dass sie bei der Ersetzung von exakten Summen durch Integrale die Euler-MacLaurin-Summationsmethode anwenden, bei der die Summe durch ein Integral plus eine unendliche Reihe von Korrekturtermen ersetzt wird [20, 23.1.30]:

$$\sum_{k=a}^b f(k) = \int_a^b dx f(x) + \frac{1}{2} [f(b) + f(a)] + \frac{1}{12} [f'(b) - f'(a)] + \dots \quad (2.79)$$

Dieser Ansatz wird im Folgenden in etwas veränderter Form zunächst als Ausgangspunkt für die Finite-Size-Untersuchungen genommen. Das Ergebnis ist jedoch insofern unbefriedigend, als bei der Auswertung von Kondensatteilchenanteilen und der kritischen Temperatur der Term 2. Ordnung nicht vollständig ist.

Daher werden wir anschließend einem neuen Ansatz von Kleinert folgen [21, Appendix 7A]<sup>1</sup>, in dem die Teilchenzahl durch Resummation bestimmt wird (siehe Abschnitt 2.2.5).

### Teilchenzahlgleichung für den isotropen Oszillator

Als Ausgangspunkt dient uns die freie Energie (2.39), welche durch Entwicklung des Logarithmus und Vertauschung der beiden Summationen zunächst auf die Form

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \sum_{\mathbf{k}} e^{-n\beta\hbar\omega(k_1+k_2+k_3)} \quad (2.80)$$

gebracht wird. Mit Hilfe der Beziehung (2.72) kann das großkanonische Potential auf eine einfache Summation über  $k$  zurückgeführt werden:

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) e^{-n\beta\hbar\omega k}. \quad (2.81)$$

Für die weiteren Berechnungen wird zunächst der Grundzustand abgespalten

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \sum_{k=1}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) e^{-n\beta\hbar\omega k}. \quad (2.82)$$

In einem weiteren Schritt wird nun die Summe über die Energieeigenwerte  $k$  mit Hilfe der Euler-MacLaurin Näherung (2.79) durch ein Integral plus Korrekturterme ersetzt. Mit den Grenzen  $a = 1$ ,  $b = \infty$  erhält man:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) e^{-n\beta\hbar\omega k} &= \frac{1}{(n\beta\hbar\omega)^3} \left[ e^{-n\beta\hbar\omega} + \frac{5}{2} n\beta\hbar\omega e^{-n\beta\hbar\omega} + 3(n\beta\hbar\omega)^2 e^{-n\beta\hbar\omega} \right. \\ &\quad \left. + \frac{31}{24} (n\beta\hbar\omega)^3 e^{-n\beta\hbar\omega} + \frac{1}{4} (n\beta\hbar\omega)^4 e^{-n\beta\hbar\omega} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.83)$$

Der gesamte Ausdruck für die freie Energie kann mit Hilfe polylogarithmischer Funktionen dann dargestellt werden als:

$$\begin{aligned} F_G &= -\frac{1}{\beta} \zeta_1(\hat{z}) - \frac{1}{\beta(\beta\hbar\omega)^3} \left\{ \zeta_4(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{5}{2} \beta\hbar\omega \zeta_3(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + 3(\beta\hbar\omega)^2 \zeta_2(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{31}{24} (\beta\hbar\omega)^3 \zeta_1(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{1}{4} (\beta\hbar\omega)^4 \zeta_0(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Die Teilchenzahl ergibt sich daraus nach (2.9):

$$\begin{aligned} N &= N_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^3} \left\{ \zeta_3(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{5}{2} \beta\hbar\omega \zeta_2(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + 3(\beta\hbar\omega)^2 \zeta_1(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{31}{24} (\beta\hbar\omega)^3 \zeta_0(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{1}{4} (\beta\hbar\omega)^4 \zeta_{-1}(\hat{z}e^{-\beta\hbar\omega}) + \dots \right\} \end{aligned} \quad (2.85)$$

<sup>1</sup>In der Online-Version der vierten Auflage enthalten.

mit  $N_0 = \zeta_0(\hat{z}) = 1/(\hat{z} - 1)$ . Weiterhin ist anzumerken, dass die obige Berechnung (2.85) der Finite-Size-Korrekturen äquivalent zu Berechnungen von Haugset et. al. [19] ist, die bei ihrer Rechnung modifizierte polylogarithmischen Funktionen mit einer verschobenen unteren Grenze verwenden (siehe dazu auch Anhang A.2).

An der kritischen Temperatur  $\beta_c = 1/k_B T_C$  ist  $N_0 = 0$  und  $\hat{z} = 1$ . Die polylogarithmischen Funktionen  $\zeta_\nu(e^{-\beta\hbar\omega})$  können mit Hilfe der Robinson-Formeln (B.14–B.19) entwickelt werden und man erhält

$$N = \frac{1}{(\beta_c \hbar \omega)^3} \left\{ \zeta(3) + \frac{3}{2} \beta_c \hbar \omega \zeta(2) - (\beta_c \hbar \omega)^2 \left[ \ln(\beta_c \hbar \omega) + \frac{5}{24} \right] + \frac{5}{16} (\beta_c \hbar \omega)^3 + \dots \right\}. \quad (2.86)$$

Bei der Berechnung von  $N$  fällt jedoch auf, dass der Term der Ordnung  $(\hbar\beta\omega)^2$  in der eckigen Klammer nicht vollständig ist, da jede weitere Ordnung in (2.85) nach dem Einsetzen der entsprechenden Robinson-Formel einen  $(\hbar\beta\omega)^2$ -Term enthält. Zum Vergleich mit den Finite-Size-Korrekturen erster Ordnung werden im Folgenden dennoch die kritische Temperatur und die Kondensatteilchenzahl berechnet. Für die kritische Temperatur wird Gleichung (2.86) zunächst nach Potenzen von  $T$  geordnet, was mit den Abkürzungen

$$A = \frac{3}{2} \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)}, \quad B(T_C) = \frac{1}{\zeta(3)} \left[ \ln \frac{k_B T_C}{\hbar \omega} - \frac{5}{24} \right], \quad C = \frac{5}{16 \zeta(3)} \quad (2.87)$$

die folgende Bestimmungsgleichung liefert

$$\frac{N}{\zeta(3)} \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^3 = T_C^3 + \frac{\hbar \omega}{k_B} A T_C^2 + \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^2 B(T) T_C + \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^3 C. \quad (2.88)$$

Mit Hilfe des formalen Ansatzes

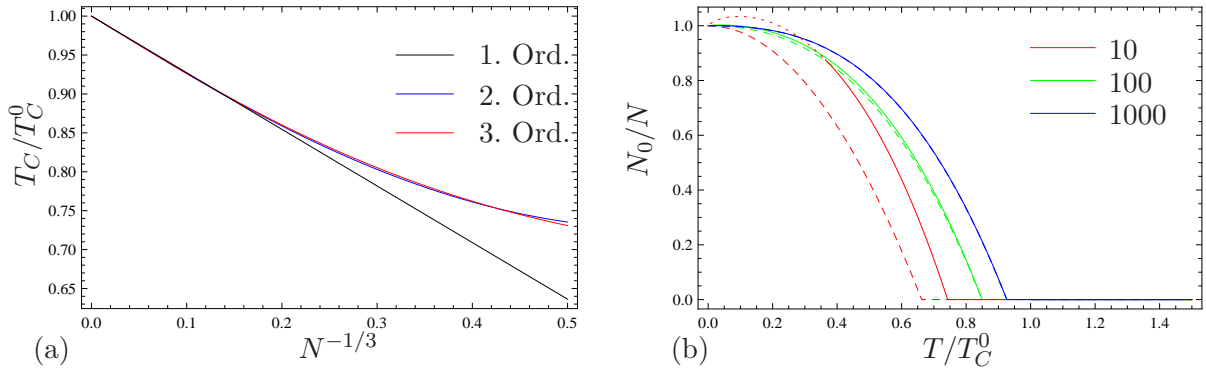
$$T_C = T_C^0 \left( 1 + \frac{T_C - T_C^0}{T_C^0} \right) = T_C^0 \left( 1 + \frac{\hbar \omega}{k_B} x_1 + \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^2 x_2 + \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^2 x_3 + \dots \right) \quad (2.89)$$

erhält man daraus die folgende  $\hbar\omega/k_B$ -Entwicklung

$$\begin{aligned} 0 &= \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^0 \left\{ (T_C^0)^3 - \frac{N}{\zeta(3)} \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^3 \right\} \\ &+ \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^1 \left\{ 3 (T_C^0)^3 x_1 + A (T_C^0)^2 \right\} \\ &+ \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^2 \left\{ (3x_1 + 3x_2) (T_C^0)^3 + 2x_1 A (T_C^0)^2 + B(T_C^0) T_C^0 \right\} \\ &+ \left( \frac{\hbar \omega}{k_B} \right)^3 \left\{ (x_1^3 + 6x_1 x_2 + 3x_3) (T_C^0)^3 + (x_1^2 + 2x_2) A (T_C^0)^2 + B(T_C^0) T_C^0 x_1 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\zeta(3)} x_1 T_C^0 + C \right\} + \mathcal{O}(\hbar^4). \end{aligned} \quad (2.90)$$

Dabei wurde benutzt, dass der temperaturabhängige Koeffizient  $B(T)$  die Entwicklung

$$B(T_C) = B(T_C^0) + \frac{x_1}{\zeta(3)} \frac{\hbar \omega}{k_B} + \dots \quad (2.91)$$



**Abbildung 2.3:** (a) Kritische Temperatur nach (2.94) erster, zweiter und dritter Ordnung und (b) Kondensatteilchenanteil nach (2.96) erster (gestrichelte Linie) und zweiter (durchgezogene Linie) Ordnung für verschiedene Teilchenzahlen (siehe Legende).

hat. Damit die Äquivalenz (2.90) gilt, muss jede geschweifte Klammer null ergeben. Die Temperatur  $T_C^0$  ergibt sich aus der ersten Zeile in Übereinstimmung mit (2.51):

$$T_C^0 = \frac{\hbar\omega}{k_B} \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}. \quad (2.92)$$

Für die Koeffizienten  $x_1, x_2, x_3$  erhält man:

$$\begin{aligned} x_1 &= -\frac{A}{3T_C^0}, \\ x_2 &= \frac{1}{3(T_C^0)^2} \left[ \frac{1}{3}A^2 - B(T_C^0) \right], \\ x_3 &= \frac{1}{9(T_C^0)^3} \left[ -\frac{2}{9}A^3 + AB(T_C^0) + \frac{1}{\zeta(3)}A - 3C \right]. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Mit den Abkürzungen (2.87) ergibt sich die folgende Finite-Size-Entwicklung für die kritische Temperatur (2.89) bis zur dritten Ordnung:

$$\begin{aligned} T_C = T_C^0 \left\{ 1 - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)} + \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{2/3} \frac{1}{3\zeta(3)} \left[ \frac{3\zeta(2)^2}{4\zeta(3)} - \frac{1}{3} \ln \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right) + \frac{5}{24} \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{6N} \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \left[ -\frac{\zeta(2)^2}{2\zeta(3)} - \frac{5\zeta(3)}{8\zeta(2)} + \frac{1}{3} \ln \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right) + \frac{19}{24} \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.94)$$

In der ersten Ordnung stimmt diese Entwicklung mit bisherigem Ergebnis erster Ordnung (2.76) überein. In Abbildung 2.3(a) ist die kritische Temperatur in Abhängigkeit von  $N^{-1/3}$  dargestellt. Zu sehen ist, dass die Korrektur zweiter Ordnung das Ergebnis insbesondere für kleinere Teilchenzahlen noch wesentlich verändert, während die Korrekturen dritter Ordnung nur sehr klein ausfallen.

Unterhalb der kritischen Temperatur ist die Gesamtteilchenzahl durch (2.86) zuzüglich der Kondensatteilchenzahl gegeben:

$$N = N_0 + \frac{1}{(\beta_c \hbar \omega)^3} \left\{ \zeta(3) + \frac{3}{2} \beta_c \hbar \omega \zeta(2) - (\beta_c \hbar \omega)^2 \left[ \ln(\beta_c \hbar \omega) + \frac{5}{24} \right] + \frac{5}{16} (\beta_c \hbar \omega)^3 + \dots \right\}. \quad (2.95)$$

Daraus folgt der Kondensatteilchenanteil  $N_0/N$  in Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur  $T/T_C$  mit  $T_C$  nach (2.94)

$$\begin{aligned} \frac{N_0}{N} = & 1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^3 - \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{1/3} \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)} \left[ \left(\frac{T}{T_C}\right)^2 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^3 \right] \\ & - \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{2/3} \frac{1}{\zeta(3)} \left\{ -\frac{3\zeta(2)^2}{2\zeta(3)} \left[ \left(\frac{T}{T_C}\right)^2 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^3 \right] \right. \\ & \left. + \left[ -\frac{5}{24} + \frac{1}{3} \ln\left(\frac{N}{\zeta(3)}\right) \right] \left[ \frac{T}{T_C} - \left(\frac{T}{T_C}\right)^3 \right] + \frac{T}{T_C} \ln\left(\frac{T}{T_C}\right) \right\} + \mathcal{O}(N^{-1}). \end{aligned} \quad (2.96)$$

Auch der Kondensatteilchenanteil stimmt in der ersten Ordnung mit dem bisherigen Ergebnis (2.78) überein. Der Vergleich der Kondensatteilchenanteile erster und zweiter Ordnung ist in Abbildung 2.3(b) dargestellt. Es fällt auf, dass sich für 100 und 1000 Teilchen keine sichtbare Verbesserung durch die Korrektur zweiter Ordnung ergibt. Für 10 Teilchen dagegen ist eine deutliche Verschiebung der Kondensatteilchenkurve zu höheren Temperaturen zu sehen. Des Weiteren taucht hier auch das Problem auf, dass die Werte des Kondensatteilchenanteils für kleine Temperaturen größer als 1 werden, was unphysikalisch ist. Die Erklärung dafür ist, dass in diesem Bereich die Bedingung für die semiklassische Näherung,  $\hbar\beta\omega < 1$ , verletzt ist. Setzt man die kritische Temperatur (2.51) in diese Bedingung ein und wertet sie für 10 Teilchen aus, so folgt daraus der Gültigkeitsbereich für 10 Teilchen:  $T/T_C^0 > 0.49$ . Daher ist die Kurve unterhalb dieses Wertes gepunktet dargestellt. Für größere Teilchenzahlen wandert der Gültigkeitsbereich immer weiter zur Temperatur null und die Korrekturen fallen immer kleiner aus, so dass keine Abweichungen mehr zu sehen sind.

### Teilchenzahlentwicklung für den anisotropen Oszillators

Um den anisotropen Oszillator zu untersuchen, kehren wir zurück zu der freien Energie (2.80). Hier separieren wir wieder den Anteil der Teilchen im Grundzustand. Dies ist der Zustand, bei dem  $k_i = 0$  für alle  $i$ . Zu beachten ist, dass bei angeregten Zuständen die Fälle  $k_{i_1} = 1, k_{i_2} = 0, k_{i_3} = 0$  sowie  $k_{i_1} = 1, k_{i_2} = 1, k_{i_3} = 0$  extra berücksichtigt werden müssen. Somit erhalten wir den folgenden Ausdruck für die freie Energie mit dem separaten Anteil des Grundzustandes:

$$\begin{aligned} F_G = & -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\tilde{\mu}}}{n} - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\tilde{\mu}}}{n} \left\{ \sum_{k_1=1}^{\infty} e^{-n\beta\omega_1 k_1} + \sum_{k_2=1}^{\infty} e^{-n\beta\omega_2 k_2} + \sum_{k_3=1}^{\infty} e^{-n\beta\omega_3 k_3} \right. \\ & + \sum_{k_1, k_2=1}^{\infty} e^{-n\beta(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2)} + \sum_{k_1, k_3=1}^{\infty} e^{-n\beta(\omega_1 k_1 + \omega_3 k_3)} + \sum_{k_2, k_3=1}^{\infty} e^{-n\beta(\omega_2 k_2 + \omega_3 k_3)} \\ & \left. + \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^{\infty} e^{-n\beta(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3)} \right\}. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Jede Summe ersetzen wir nun gemäß Euler-MacLaurin (2.79) und erhalten so:

$$\sum_{k_1=1}^{\infty} e^{-n\beta\omega_1 k_1} = \int_1^{\infty} dk_1 e^{-n\beta\hbar\omega_1 k_1} + \frac{1}{2} e^{-n\beta\hbar\omega_1} + \frac{1}{12} n\hbar\omega_1 e^{-n\beta\hbar\omega_1} + \dots \quad (2.98)$$

Unter Verwendung des geometrischen Mittelwerts  $\tilde{\omega}$  gemäß (2.35) lässt sich dieser Ausdruck zunächst auf die Form:

$$\sum_{k_1=1}^{\infty} e^{-n\beta\omega_1 k_1} = \frac{e^{-n\beta\hbar\omega_1}}{(n\beta\hbar\tilde{\omega})^3} \left[ (n\beta\hbar)^2 \omega_2 \omega_3 + \frac{1}{2} (n\beta\hbar)^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3 + \dots \right] \quad (2.99)$$

bringen. In einem weiteren Schritt wird die Exponentialfunktion so erweitert, dass sie das algebraische Mittel  $\bar{\omega}$  gemäß (2.38) im Exponenten enthält. Die verbleibenden Exponentialfunktionen werden entwickelt:

$$e^{-n\beta\hbar\omega_1} = e^{-n\beta\hbar(\omega_1+\omega_2+\omega_3)} e^{n\beta\hbar\omega_2} e^{-n\beta\hbar\omega_3} = e^{-3n\beta\hbar\bar{\omega}} (1 + n\hbar\beta\omega_2 + n\hbar\beta\omega_3 + \dots). \quad (2.100)$$

Damit berechnet sich die Summe über  $k_1$  zu

$$\begin{aligned} \sum_{k_1=1}^{\infty} e^{-n\beta\omega_1 k_1} &= \frac{e^{-3n\beta\hbar\bar{\omega}}}{(n\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ (n\beta\hbar)^2 \omega_2 \omega_3 + (n\beta\hbar)^3 \left[ \omega_2^2 \omega_3 + \omega_2 \omega_3^2 + \frac{1}{2} \omega_1 \omega_2 \omega_3 \right] \right. \\ &\left. + (n\beta\hbar)^4 \left[ \frac{1}{2} \omega_2^3 \omega_3 + \frac{1}{2} \omega_2 \omega_3^3 + \omega_2^2 \omega_3^2 + \frac{1}{2} \omega_1 \omega_2 \omega_3^2 + \frac{1}{2} \omega_1 \omega_2^2 \omega_3 + \frac{1}{12} \omega_1^2 \omega_2 \omega_3 \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Für die Doppelsumme über  $k_1, k_2$  erhält man nach der gleichen Vorgehensweise den Ausdruck

$$\begin{aligned} \sum_{k_1, k_2=1}^{\infty} e^{-n\beta(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2)} &= \frac{e^{-3n\beta\hbar\bar{\omega}}}{(n\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ n\beta\hbar\omega_3 + (n\beta\hbar)^2 \left[ \omega_2^2 + \frac{1}{2} \omega_2 \omega_3 + \frac{1}{2} \omega_1 \omega_3 \right] \right. \\ &+ (n\beta\hbar)^3 \left[ \frac{1}{2} \omega_3^3 + \frac{1}{2} \omega_2 \omega_3^2 + \frac{1}{2} \omega_1 \omega_3^2 + \frac{1}{4} \omega_1 \omega_2 \omega_3 + \frac{1}{12} \omega_1^2 \omega_3 + \frac{1}{12} \omega_2^2 \omega_3 \right] \\ &\left. + (n\beta\hbar)^4 \left[ \frac{1}{24} \omega_1 \omega_2^2 \omega_3 + \frac{1}{24} \omega_1^2 \omega_2 \omega_3 + \frac{1}{12} \omega_2^2 \omega_3^2 + \frac{1}{4} \omega_1 \omega_2 \omega_3^2 + \frac{1}{4} \omega_2 \omega_3^3 + \frac{1}{4} \omega_1 \omega_3^3 + \frac{1}{6} \omega_3^4 \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Für die dreifache Summe erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned} \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^{\infty} e^{-n\beta(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3)} &= \frac{e^{-3n\beta\hbar\bar{\omega}}}{(n\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ 1 + \frac{3}{2} n\beta\hbar\bar{\omega} + (n\beta\hbar)^2 \left[ \frac{9}{8} \bar{\omega}^2 - \frac{1}{8} \bar{\omega}^2 \right] \right. \\ &\left. + (n\beta\hbar)^3 \left[ \frac{9}{16} \bar{\omega}^3 - \frac{3}{16} \bar{\omega} \bar{\omega}^2 \right] + (n\beta\hbar)^4 \left[ \frac{3}{16} \bar{\omega}^4 - \frac{3}{32} \bar{\omega}^2 \bar{\omega}^2 - \frac{1}{48} \bar{\omega} \bar{\omega}^3 + \frac{1}{96} \bar{\omega}^4 \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Dabei ist das Mittel einer Funktion  $f(\omega)$  wie folgt definiert:

$$\overline{f(\omega)} = \frac{f(\omega_1) + f(\omega_2) + f(\omega_3)}{3}. \quad (2.104)$$

Die freie Energie (2.97) ergibt sich durch Addition der Beiträge (2.101)–(2.103) zuzüglich der nicht explizit aufgeführten zwei Einfachsummen über  $k_2$  und  $k_3$ , die man durch Indexvertauschung von (2.101) erhält, und zwei Doppelsummen über  $k_2, k_3$  und  $k_1, k_3$ , die man durch Indexvertauschung von (2.102) erhält:

$$\begin{aligned} F_G &= -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \frac{e^{3n\beta\hbar\bar{\omega}}}{(n\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ 1 + \frac{9}{2} n\beta\hbar\bar{\omega} + (n\beta\hbar)^2 \left[ \frac{81}{8} \bar{\omega}^2 - \frac{1}{8} \bar{\omega}^2 \right] \right. \\ &\left. + (n\beta\hbar)^3 \left[ \frac{171}{16} \bar{\omega}^3 - \frac{63}{16} \bar{\omega} \bar{\omega}^2 - \bar{\omega}^3 \right] + (n\beta\hbar)^4 \left[ \frac{57}{16} \bar{\omega}^4 + \frac{399}{32} \bar{\omega}^2 \bar{\omega}^2 - \frac{145}{48} \bar{\omega} \bar{\omega}^3 + \frac{1}{96} \bar{\omega}^4 \right] + \dots \right\} \end{aligned} \quad (2.105)$$

In einem letzten Schritt formen wir noch die Exponentialfunktion um:

$$e^{-3n\beta\hbar\bar{\omega}} = e^{-n\beta\hbar\bar{\omega}} [1 - 2n\beta\hbar\bar{\omega} + 2(n\beta\hbar\bar{\omega})^2 + \dots] \quad (2.106)$$

und erhalten so den endgültigen Ausdruck für die freie Energie

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} - \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{n\beta\hat{\mu}}}{n} \frac{e^{n\beta\hbar\bar{\omega}}}{(n\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ 1 + \frac{5}{2}n\beta\hbar\bar{\omega} + (n\beta\hbar)^2 \left[ \frac{25}{8}\bar{\omega}^2 - \frac{1}{8}\bar{\omega}^2 \right] \right. \\ \left. + (n\beta\hbar)^3 \left[ -\frac{91}{48}\bar{\omega}^3 + \frac{67}{16}\bar{\omega}\bar{\omega}^2 - \bar{\omega}^3 \right] + (n\beta\hbar)^4 \left[ -\frac{139}{48}\bar{\omega}^4 - \frac{49}{48}\bar{\omega}\bar{\omega}^3 + \frac{133}{32}\bar{\omega}^2\bar{\omega}^2 + \frac{1}{96}\bar{\omega}^4 \right] + \dots \right\}. \quad (2.107)$$

Mit Hilfe polylogarithmischer Funktionen lässt sich dieses Ergebnis auch schreiben als

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \zeta_1(\hat{z}) - \frac{1}{\beta(\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ \zeta_4(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) + \frac{5}{2}\beta\hbar\bar{\omega} \zeta_3(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) + (\beta\hbar\bar{\omega})^2 \left[ \frac{25}{8} - \frac{1}{8}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} \right] \zeta_2(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) \right. \\ \left. + (\beta\hbar\bar{\omega})^3 \left[ -\frac{91}{48} + \frac{67}{16}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} - \frac{\bar{\omega}^3}{\bar{\omega}^3} \right] \zeta_1(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) \right. \\ \left. + (\beta\hbar\bar{\omega})^4 \left[ -\frac{139}{48} + \frac{133}{32}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} - \frac{49}{48}\frac{\bar{\omega}^3}{\bar{\omega}^3} + \frac{1}{96}\frac{\bar{\omega}^4}{\bar{\omega}^4} \right] \zeta_0(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) + \dots \right\}. \quad (2.108)$$

Die Teilchenzahl ergibt sich daraus nach (2.9):

$$N = N_0 + \frac{1}{(\beta\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ \zeta_3(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) + \frac{5}{2}\beta\hbar\bar{\omega} \zeta_2(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) + (\beta\hbar\bar{\omega})^2 \left[ \frac{25}{8} - \frac{1}{8}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} \right] \zeta_1(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) \right. \\ \left. + (\beta\hbar\bar{\omega})^3 \left[ -\frac{91}{48} + \frac{67}{16}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} - \frac{\bar{\omega}^3}{\bar{\omega}^3} \right] \zeta_0(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) \right. \\ \left. + (\beta\hbar\bar{\omega})^4 \left[ -\frac{139}{48} + \frac{133}{32}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} - \frac{49}{48}\frac{\bar{\omega}^3}{\bar{\omega}^3} + \frac{1}{96}\frac{\bar{\omega}^4}{\bar{\omega}^4} \right] \zeta_{-1}(\hat{z}e^{-\beta\hbar\bar{\omega}}) + \dots \right\}. \quad (2.109)$$

Im Fall des isotropen harmonischen Oszillators gilt  $\bar{\omega} = \omega$  und  $\bar{\omega}^3 = \omega^3$ , so dass man die zu jeweiligen Ordnung gehörigen Brüche aufaddieren kann und somit wieder die Gleichung (2.85) bekommt. Diesen Test besteht das in Referenz [19] bestimmte Ergebnis für die anisotrope Falle nicht. Der Grund dafür ist, dass dort bei der Berechnung der Teilchenzahlgleichung die Terme  $k_{i_1} = 1, k_{i_2} = k_{i_3} = 0$ , sowie  $k_{i_1} = k_{i_2} = 1, k_{i_3} = 0$ , vergessen wurden.

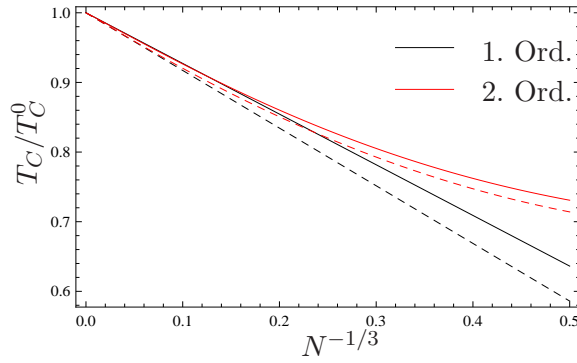
An der kritischen Temperatur, die durch die Bedingungen  $N_0 = 0$  und  $\hat{z} = 1$  gekennzeichnet ist, kann man die polylogarithmischen Funktionen  $\zeta_\nu(e^{-\beta\hbar\bar{\omega}})$  mit Hilfe der Robinson-Formeln (B.14)–(B.19) entwickeln und erhält:

$$N = \frac{1}{(\beta_c\hbar\bar{\omega})^3} \left\{ \zeta(3) + \frac{3}{2}\beta_c\hbar\bar{\omega}\zeta(2) \right. \\ \left. + (\beta_c\hbar\bar{\omega})^2 \left[ -\frac{157}{24} + \frac{267}{32}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} - \frac{97}{48}\frac{\bar{\omega}^3}{\bar{\omega}^3} + \frac{1}{96}\frac{\bar{\omega}^4}{\bar{\omega}^4} - \left( \frac{9}{8} - \frac{1}{8}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} \right) \ln(\beta_c\hbar\bar{\omega}) \right] \right. \\ \left. + (\beta_c\hbar\bar{\omega})^3 \left[ \frac{63}{32} - \frac{69}{32}\frac{\bar{\omega}^2}{\bar{\omega}^2} + \frac{1}{2}\frac{\bar{\omega}^3}{\bar{\omega}^3} \right] + \dots \right\}. \quad (2.110)$$

Die Korrektur erster Ordnung stimmt dabei mit den Resultaten in [22,23] überein. Zur Berechnung der kritischen Temperatur wird die Gleichung (2.110) in Analogie zu (2.88) nach Potenzen von  $T$  geordnet:

$$\frac{N}{\zeta(3)} \left( \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B} \right)^3 = T_C^3 + \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B} AT_C^2 + \left( \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B} \right)^2 B(T_C)T_C + \left( \frac{\hbar\bar{\omega}}{k_B} \right)^3 C \quad (2.111)$$





**Abbildung 2.4:** Vergleich der kritischen Temperaturen für die isotrope Falle (durchgezogene Linie) und die zylindrische anisotrope Falle (gestrichelte Linie) mit Frequenzen  $\omega_1 = \omega_2 = \sqrt{8}\omega_3 = \sqrt{2}\tilde{\omega}$  entsprechend der experimentellen Anordnung in [1], die durch Gleichungen (2.94) und (2.113) gegeben sind.

mit den Abkürzungen

$$A = \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)},$$

$$B(T_C) = \frac{1}{\zeta(3)} \left[ -\frac{157}{24} + \frac{267\bar{\omega}^2}{32\bar{\omega}^2} - \frac{97\bar{\omega}^3}{48\bar{\omega}^3} + \frac{1\bar{\omega}^4}{96\bar{\omega}^4} - \left( \frac{9}{8} - \frac{1\bar{\omega}^2}{8\bar{\omega}^2} \right) \ln(\beta_c \hbar \bar{\omega}) \right], \quad (2.112)$$

$$C = \frac{1}{\zeta(3)} \left[ \frac{63}{32} - \frac{69\bar{\omega}^2}{32\bar{\omega}^2} + \frac{1\bar{\omega}^3}{2\bar{\omega}^3} \right].$$

Die kritische Temperatur ergibt sich wieder mit dem Ansatz (2.89), mit  $\omega$  ersetzt durch  $\bar{\omega}$ , so dass die Koeffizienten  $x_1, x_2, x_3$  entsprechend den Gleichungen (2.93) berechnet werden können und  $T_C^0$  der Gleichung (2.51) entspricht. Dies führt auf den folgenden Ausdruck für die kritische Temperatur für die anisotrope Falle:

$$T_C = T_C^0 \left\{ 1 - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{\zeta(2)\bar{\omega}}{2\zeta(3)\tilde{\omega}} - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{2/3} \frac{1\bar{\omega}^2}{3\zeta(3)\tilde{\omega}^2} \left[ -\frac{3\zeta(2)^2}{4\zeta(3)} - \frac{157}{24} + \frac{267\bar{\omega}^2}{32\bar{\omega}^2} - \frac{97\bar{\omega}^3}{48\bar{\omega}^3} + \frac{1\bar{\omega}^4}{96\bar{\omega}^4} - \left( \frac{9}{8} + \frac{1\bar{\omega}^2}{8\bar{\omega}^2} \right) \frac{1}{3} \ln \left( \frac{N\bar{\omega}}{\zeta(3)\tilde{\omega}} \right) \right] + \dots \right\}. \quad (2.113)$$

Auf die dritte Ordnung wurde hier verzichtet, da aus dem isotropen Ergebnis (siehe Abbildung 2.3(a)) zu sehen ist, dass sie keine weiteren Verbesserungen mehr bewirkt. In Abbildung 2.4 ist die kritische Temperatur in Abhängigkeit von  $N^{-1/3}$  dargestellt. Zum Vergleich ist auch die kritische Temperatur der isotropen Falle aus (2.94) zu sehen. Um die Konstanz der Dichte zu gewährleisten, wurde bei der Darstellung  $\omega = \tilde{\omega}$  gewählt. Man erkennt, dass die Anisotropie das Einsetzen der Kondensation für kleine Teilchenzahlen unterdrückt. Die Ursache hierfür ist, dass sich bei Anisotropie die Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand, die aus (2.36) mit Frequenzen (2.155) berechnet werden kann, im Vergleich zum isotropen Fall verkleinert, so dass die angeregten Zustände durch die thermische Anregung energetisch leichter zu erreichen sind [24]. Im thermodynamischen Limes gleichen sich die Ergebnisse im isotropen und anisotropen Fall an, da in beiden Fällen die Energiezustände immer näher zusammenrücken.

### 2.2.4 Finite-Size-Korrekturen für die Wärmekapazität

Für die Berechnung der Wärmekapazität, die im Folgenden für die isotrope Falle erfolgt, muss zunächst die innere Energie (2.55) berechnet werden. Dabei ist die freie Energie durch (2.84) und die Teilchenzahl durch (2.85) gegeben. Die Entropie ergibt sich durch Ableitung nach Temperatur von (2.55) zu:

$$S = \frac{1}{T} \left[ \frac{4}{\beta b^3} \zeta_4(\hat{z}e^{-b}) - \frac{1}{b^3} \zeta_3(\hat{z}e^{-b})(\hat{\mu} - \hbar\omega) + \frac{15}{2} \frac{1}{\beta b^2} \zeta_3(\hat{z}e^{-b}) - \frac{5}{2} \frac{1}{b^2} \zeta_2(\hat{z}e^{-b})(\hat{\mu} - \hbar\omega) + \dots \right] \quad (2.114)$$

mit der Abkürzung

$$b = \hbar\beta\omega. \quad (2.115)$$

Damit lautet die innere Energie:

$$U = 3 \frac{1}{\beta b^3} \zeta_4(\hat{z}e^{-b}) + \frac{15}{2} \frac{1}{\beta b^2} \zeta_3(\hat{z}e^{-b}) + \dots \quad (2.116)$$

Für  $T > T_C$  kann noch die aus der Teilchenzahlgleichung (2.85) abgeleitete Relation

$$\frac{1}{b^3} = \frac{N}{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})} \left[ 1 - b \frac{5}{2} \frac{\zeta_2(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})} + \dots \right] \quad (2.117)$$

in (2.116) eingesetzt werden, da die Wärmekapazität bei einer festen Teilchenzahl definiert ist. Dies führt auf

$$\frac{U_{>}}{N} = \frac{1}{\beta} \left\{ 3 \frac{\zeta_4(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})} + b \frac{15}{2} \left[ 1 - \frac{\zeta_4(\hat{z}e^{-b})\zeta_2(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3^2(\hat{z}e^{-b})} \right] + \dots \right\}. \quad (2.118)$$

Die Temperaturableitung der inneren Energie liefert dann nach (2.54) die Wärmekapazität

$$\begin{aligned} \frac{C_{>}}{k_B N} = & 3 \frac{\zeta_4(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})} + \frac{T}{\hat{z}} \frac{\partial \hat{z}}{\partial T} \left\{ 3 - 3 \frac{\zeta_4(\hat{z}e^{-b})\zeta_2(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3^2(\hat{z}e^{-b})} - b \frac{15}{2} \left[ \frac{\zeta_2(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})} + \frac{\zeta_1(\hat{z}e^{-b})\zeta_4(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3^2(\hat{z}e^{-b})} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2\zeta_2^2(\hat{z}e^{-b})\zeta_4(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3^3(\hat{z}e^{-b})} \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (2.119)$$

Die in der obigen Gleichung vorkommende Temperaturableitung erhält man wieder aus der Teilchenzahlgleichung (2.85) durch Ausnutzen der Konstanz der Teilchenzahl  $dN/dT = 0$ :

$$\frac{T}{\hat{z}} \frac{\partial \hat{z}}{\partial T} = -3 \frac{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_2(\hat{z}e^{-b})} - 5b \left[ 1 - \frac{\zeta_1(\hat{z}e^{-b})\zeta_3(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_2^2(\hat{z}e^{-b})} + \dots \right]. \quad (2.120)$$

Einsetzen dieses Ausdrucks in (2.119) ergibt schließlich die Wärmekapazität bis zur ersten Ordnung für Temperaturen  $T > T_C$ :

$$\frac{C_{>}}{k_B N} = 12 \frac{\zeta_4(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})} - 9 \frac{\zeta_3(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_2(\hat{z}e^{-b})} + b \left[ 1 - 4 \frac{\zeta_2(\hat{z}e^{-b})\zeta_4(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_3^2(\hat{z}e^{-b})} + 3 \frac{\zeta_1(\hat{z}e^{-b})\zeta_3(\hat{z}e^{-b})}{\zeta_2^2(\hat{z}e^{-b})} \right]. \quad (2.121)$$

Für Temperaturen  $T < T_C$  wird die Wärmekapazität ausgehend von der Gleichung (2.116) berechnet. Da in diesem Fall  $\hat{\mu} = 0$  gilt, können die polylogarithmischen Funktionen entsprechend der Robinson-Entwicklungen (B.17, B.16) entwickelt werden, so dass man den Ausdruck

$$U = 3 \frac{1}{\beta b^3} \zeta(4) + \frac{9}{2} \frac{1}{\beta b^2} \zeta(3) + \dots \quad (2.122)$$

erhält. Für die Wärmekapazität folgt daraus mit der kritischen Temperatur (2.94)

$$\frac{C_{<}}{k_B N} = 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \left( \frac{T}{T_C} \right)^3 + \frac{3}{2} \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \left[ 9 \left( \frac{T}{T_C} \right)^2 - \frac{\zeta(2)\zeta(4)}{\zeta(3)^2} \left( \frac{T}{T_C} \right)^3 \right] + \dots \quad (2.123)$$

Die semiklassischen Ergebnisse für die Wärmekapazität sind zusammen mit der exakten Auswertung in Abbildung 2.10 wiedergegeben.

### 2.2.5 Höhere Finite-Size-Korrekturen

Anstatt die Summe (2.28) durch Integrale über die Zustandsdichte anzunähern, ist eine andere Berechnung der Teilchenzahl durch Resummation möglich. Diese Methode wird in der Referenz [21, Appendix 7A] für den Fall  $\hat{z} = 1$  angewendet und in der Referenz [25] auf beliebige  $\hat{z}$ -Werte erweitert.

Da wir im Verlauf der Rechnung auf die Methode der dimensional Regularisierung zurückgreifen, wird die Teilchenzahl zunächst auf  $D$  Dimensionen verallgemeinert. Für die isotrope harmonische Falle lauten die Energieeigenwerte in  $D$  Dimensionen

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 + \hbar\omega(k_1 + k_2 + \dots + k_D) \quad (2.124)$$

mit  $E_0 = D\hbar\omega/2$ . Die Teilchenzahl (2.28) lässt sich daher auf die Form

$$N = \sum_{\{k_1, \dots, k_D\}=0}^{\infty} \frac{1}{e^{b(k_1+k_2+\dots+k_D)-b\mu'} - 1} \quad (2.125)$$

bringen mit den Abkürzungen  $b$  nach (2.115)

$$\mu' = \hat{\mu}/\hbar\omega. \quad (2.126)$$

Die Bose-Einstein-Verteilung in (2.125) wird zunächst mit Hilfe der geometrischen Reihe umgeformt

$$N = \sum_{\{k_1, \dots, k_D\}=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nb(k_1+k_2+\dots+k_D)+nb\mu'} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-nb})^D} e^{nb\mu'}. \quad (2.127)$$

Die bewährte Vorgehensweise besteht wieder darin, die Anzahl der kondensierten Teilchen (2.29) und die Anzahl der angeregten Teilchen (2.31) separat zu behandeln:

$$N = N_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{(1 - e^{-nb})^D} - 1 \right\} e^{nb\mu'}. \quad (2.128)$$

Der Ausdruck in geschweiften Klammern wird nun auf den gleichen Nenner gebracht und im Zähler mit Hilfe des Binomischen Satzes ausgeschrieben

$$N = N_0 + \sum_{j=1}^D (-1)^{j+1} \binom{D}{j} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nb(j-\mu')}}{(1 - e^{-nb})^D}. \quad (2.129)$$

### Resummation

Wir nehmen an, dass die mittlere thermische Energie viel größer ist als der Abstand der Energieniveaus und nähern die Summe über  $n$  mit einem Integral, wobei die Differenz zwischen der Reihe und dem Integral als Korrekturterm hinzuaddiert wird:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nb(j-\mu')}}{(1-e^{-nb})^D} = \int_0^{\infty} dn \frac{e^{-nb(j-\mu')}}{(1-e^{-nb})^D} + \left( \sum_{n=1}^{\infty} - \int_0^{\infty} dn \right) \frac{e^{-nb(j-\mu')}}{(1-e^{-nb})^D}. \quad (2.130)$$

Nun wird der Nenner im zweiten Summanden auf der rechten Seite für kleine  $b$  entwickelt:

$$(1-e^{-nb})^{-D} = \sum_{i=0}^D \frac{c_i(D)}{(nb)^{D-i}} + \mathcal{O}(b^1) \quad (2.131)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten

$$c_0(D) = 1, \quad c_1(D) = \frac{D}{2}, \quad c_2(D) = \frac{D(3D-1)}{24}, \quad c_3(D) = \frac{D^2(D-1)}{48}, \dots \quad (2.132)$$

Wir erhalten also den folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nb(j-\mu')}}{(1-e^{-nb})^D} &= \int_0^{\infty} dn \frac{e^{-nb(j-\mu')}}{(1-e^{-nb})^D} - \int_0^{\infty} dn \sum_{i=0}^D \frac{c_i(D) e^{-nb(j-\mu')}}{(nb)^{D-i}} \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=0}^D \frac{c_i(D) e^{-nb(j-\mu')}}{(nb)^{D-i}} + \mathcal{O}(b^1). \end{aligned} \quad (2.133)$$

Das erste Integral lässt sich mit Hilfe der Substitution  $t = e^{-nb}$  als Beta-Funktion darstellen

$$B(x, y) = \int_0^1 dt t^{x-1} (1-t)^{y-1} = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}. \quad (2.134)$$

Aus der Substitution folgt auch direkt, dass der Beitrag des Integrals von der Ordnung  $\mathcal{O}(b^{-1})$  ist. Das zweite Integral lässt sich auf die Gamma-Funktion zurückführen.

$$\int_0^{\infty} dt t^{x-1} e^{-at} = \frac{\Gamma(x)}{a^x}. \quad (2.135)$$

Der dritte Summand in (2.133) kann mit Hilfe polylogarithmischer Funktionen (A.3) ausgedrückt werden. Dies ergibt schließlich

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nbA}}{(1-e^{-nb})^D} &= \frac{1}{b} \left[ \frac{\Gamma(1-D)\Gamma(A)}{\Gamma(1+A-D)} - \sum_{i=0}^D c_i(D) \Gamma(1+i-D) A^{D-i-1} \right] \\ &+ \sum_{i=0}^D \frac{c_i(D)}{b^{D-i}} \zeta_{D-i}(e^{-bA}) + \mathcal{O}(b^1) \end{aligned} \quad (2.136)$$

mit  $A = j - \mu'$ .

### Dimensionale Regularisierung

Der Ausdruck (2.136) besteht für  $D - i = 1$  aus divergenten Termen. Zu seiner Berechnung greift man daher auf die Methode der dimensional Regularisierung zurück, bei der man zunächst  $D = d - \varepsilon$  mit ganzzahligem  $d$  setzt und anschließend den Grenzwert  $\varepsilon \rightarrow 0$  bildet. Dies führt zunächst auf

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nbA}}{(1 - e^{-nb})^D} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{b} \left[ \frac{\Gamma(1 - d + \varepsilon)\Gamma(A)}{\Gamma(1 + A - d + \varepsilon)} - \sum_{i=0}^d c_i(d - \varepsilon)\Gamma(1 + i - d + \varepsilon)A^{d-i-1-\varepsilon} \right] + \sum_{i=0}^d \frac{c_i(d)}{b^{d-i}} \zeta_{d-i}(e^{-bA}) + \mathcal{O}(b^0). \quad (2.137)$$

Nach [26, (8D.24)] lautet die  $\varepsilon$ -Entwicklung der Gamma-Funktion für beliebiges  $n$

$$\Gamma(-n + \varepsilon) = \frac{(-1)^n}{n!} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} + \psi_0(n + 1) + \frac{\varepsilon}{2} \left[ \frac{\pi^2}{3} + \psi_0(n + 1)^2 - \psi_0'(n + 1) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right\}. \quad (2.138)$$

Dabei bezeichnet  $\psi_0(z)$  die Eulersche Digamma-Funktion

$$\psi_0(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}, \quad (2.139)$$

welche die Rekursions-Beziehung

$$\psi_0(z) = \frac{1}{z - 1} + \psi_0(z - 1) \quad (2.140)$$

erfüllt und an der Stelle  $z = 1$  gleich der negativen Euler-Mascheroni-Konstanten  $\gamma$  ist:

$$\psi_0(1) = -\gamma = -0.5772156649 \dots \quad (2.141)$$

Außerdem findet die Näherung

$$x^\varepsilon = 1 + \varepsilon \ln x \quad (2.142)$$

für kleine  $\varepsilon$  Verwendung. Bei der Entwicklung der Koeffizienten  $c_i(d - \varepsilon)$  aus (2.132) gemäß

$$c_i(d - \varepsilon) = c_i(d) - c_i'(d)\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (2.143)$$

treten die Entwicklungskoeffizienten  $c_i'(d) = \partial c_i(d)/\partial d$  auf, welche explizit

$$c_0'(d) = 0, \quad c_1'(d) = \frac{1}{2}, \quad c_2'(d) = \frac{6d - 1}{24}, \quad c_3'(d) = \frac{d(3d - 2)}{48}, \dots \quad (2.144)$$

lauten. Insgesamt erhält man damit aus (2.137)

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nbA}}{(1 - e^{-nb})^D} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(-1)^{d-1}}{b} \left\{ \frac{1}{(d-1)!} \left[ \prod_{i=1}^{d-1} (A - i) \right] \left[ \frac{1}{\varepsilon - \psi_0(1 + A - d)} + \psi_0(d) \right] - \sum_{i=0}^d \frac{(-1)^i c_i(d)}{(d-i-1)!} \left[ \frac{1}{\varepsilon} + \psi_0(d-i) - \frac{c_i'(d)}{c_i(d)} - \ln(A) \right] A^{d-i-1} \right\} + \sum_{i=0}^d \frac{c_i(d)}{b^{d-i}} \zeta_{d-i}(e^{-bA}) + \mathcal{O}(b^0). \quad (2.145)$$

Benutzt man die Identität

$$\frac{1}{(d-1)!} \prod_{i=1}^{d-1} (A-i) = \sum_{i=0}^{d-1} \frac{(-1)^i c_i(d)}{(d-i-1)!} A^{d-i-1}, \quad (2.146)$$

die in der Referenz [27, Anhang A] hergeleitet wurde, so heben sich die Terme proportional zu  $1/\varepsilon$  in (2.145) gerade auf, so dass der Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  ausgeführt werden kann. Mit der Rekursionsbeziehung für die Digammafunktionen (2.140) erhält man schließlich das Ergebnis

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nbA}}{(1-e^{-nb})^D} &= \frac{1}{b} \sum_{i=0}^d \frac{(-1)^{d-i-1} c_i(d)}{(d-i-1)!} A^{d-i-1} \left[ -\psi_0(1+A-d) + \frac{c'_i(d)}{c_i(d)} + \ln(A) + \sum_{m=d-i}^{d-1} \frac{1}{m} \right] \\ &+ \sum_{i=0}^d \frac{c_i(d)}{b^{d-i}} \zeta_{d-i}(e^{-bA}) + \mathcal{O}(b^0). \end{aligned} \quad (2.147)$$

Für  $d=3$  ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nbA}}{(1-e^{-nb})^3} &= \frac{1}{b^3} \zeta_3(e^{-Ab}) + \frac{3}{2b^2} \zeta_2(e^{-Ab}) + \frac{1}{b} \left\{ \frac{1}{2}(A-1)(A-2) [\ln(A) - \psi_0(A-2)] \right. \\ &\left. - \frac{5}{2}A + \frac{53}{24} + \zeta_1(e^{-Ab}) \right\} + \frac{3}{8} \zeta_0(e^{-Ab}). \end{aligned} \quad (2.148)$$

Für die Teilchenzahl (2.129) erhält man somit den Ausdruck

$$\begin{aligned} N &= N_0 + \frac{1}{b^3} \left[ 3\zeta_3(e^{-b(1-\mu')}) - 3\zeta_3(e^{-b(2-\mu')}) + \zeta_3(e^{-b(3-\mu')}) \right] \\ &+ \frac{1}{b^2} \left[ \frac{9}{2}\zeta_2(e^{-b(1-\mu')}) - \frac{9}{2}\zeta_2(e^{-b(2-\mu')}) + \frac{3}{2}\zeta_2(e^{-b(3-\mu')}) \right] \\ &+ \frac{1}{b} \left\{ 3\zeta_1(e^{-b(1-\mu')}) - 3\zeta_1(e^{-b(2-\mu')}) + \zeta_1(e^{-b(3-\mu')}) + \frac{53}{24} + \frac{5}{4}\mu' \right. \\ &+ \frac{1}{2}(1-\mu')(\mu'-2)\psi_0(1-\mu') + \frac{1}{2}(1-\mu')(2-\mu')\ln(3-\mu') \\ &+ \frac{3}{2}\mu'(\mu'+1)\ln(1-\mu') + \frac{3}{2}\mu'(1-\mu')\ln(2-\mu') \\ &\left. + \frac{3}{2} [\mu'(-1-\mu')\psi_0(-1-\mu') - \mu'(1-\mu')\psi_0(-\mu')] \right\} \\ &+ \frac{9}{8}\zeta_0(e^{-b(1-\mu')}) - \frac{9}{8}\zeta_0(e^{-b(2-\mu')}) + \frac{3}{8}\zeta_0(e^{-b(3-\mu')}) + \mathcal{O}(b^1). \end{aligned} \quad (2.149)$$

Die Teilchenzahl unterhalb der kritischen Temperatur  $T < T_C$  ergibt sich für  $\mu' \rightarrow 0$ . Unter Benutzung von (2.140) erhält man

$$\begin{aligned} N &= N_0 + \frac{1}{b^3} \left[ 3\zeta_3(e^{-b}) - 3\zeta_3(e^{-2b}) + \zeta_3(e^{-3b}) \right] \\ &+ \frac{1}{b^2} \left[ \frac{9}{2}\zeta_2(e^{-b}) - \frac{9}{2}\zeta_2(e^{-2b}) + \frac{3}{2}\zeta_2(e^{-3b}) \right] \\ &+ \frac{1}{b} \left[ 3\zeta_1(e^{-b}) - 3\zeta_1(e^{-2b}) + \zeta_1(e^{-3b}) + \frac{53}{24} + \gamma + \ln 3 - 3 \right] \\ &+ \frac{9}{8}\zeta_0(e^{-b}) - \frac{9}{8}\zeta_0(e^{-2b}) + \frac{3}{8}\zeta_0(e^{-3b}) + \mathcal{O}(b^1). \end{aligned} \quad (2.150)$$

Aus (2.150) erhält man durch  $N_0 = 0$  und  $b = b_c$  einen Ausdruck zur Bestimmung der kritischen Temperatur. Für kleine  $b_c$  lassen sich die polylogarithmischen Funktionen mit Hilfe der Robinson-Entwicklung berechnen (siehe Anhang B). Ersetzt man sie durch die entsprechenden Ausdrücke (B.14–B.18), so erhält man mit  $b_c = \hbar\beta_c\omega$  die folgende  $\beta_c$ -Entwicklung bis zur dritten Ordnung in  $\beta_c$ . Die Teilchenzahl bei der kritischen Temperatur ergibt sich zu:

$$N = \frac{1}{(\hbar\beta_c\omega)^3} \left[ \zeta(3) + \frac{3\hbar\beta_c\omega}{2}\zeta(2) - (\hbar\beta_c\omega)^2 \left[ \ln(\hbar\beta_c\omega) - \gamma + \frac{19}{24} \right] + (\hbar\beta_c\omega)^3 \frac{5}{16} \right] + \mathcal{O}(\hbar\beta_c\omega). \quad (2.151)$$

Vergleicht man die obige Gleichung (2.150) mit dem Resultat aus der Euler-MacLaurin-Methode (2.86), so stellt man fest, dass sich die beiden Ergebnisse nur beim Term zweiter Ordnung  $(\hbar\beta_c\omega)^2 [\ln(\hbar\beta_c\omega) + X]$  unterscheiden, wobei bei der Euler-MacLaurin-Methode  $X_M = 5/24 \approx 0.208$  und bei der Resummationsmethode  $X_R = -\gamma + 19/24 \approx 0.214$  lauten. Dieser Unterschied rührt daher, dass der Term zweiter Ordnung bei Euler-MacLaurin-Methode unvollständig ist. Bei Berücksichtigung der Entwicklungsterme höherer Ordnung in (2.85) nähert sich der Wert von  $X_M$  immer weiter dem Wert von  $X_R$  an.

Mit Hilfe des formalen Ansatzes (2.89) und im Abschnitt 2.2.3 vorgestellten Methode erhält man die folgende Finite-Size-Entwicklung für die kritische Temperatur

$$T_C = T_C^0 \left\{ 1 - \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)} + \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{2/3} \frac{1}{3\zeta(3)} \left[ \frac{3\zeta(2)^2}{4\zeta(3)} - \frac{1}{3} \ln \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right) - \gamma + \frac{19}{24} \right] + \frac{1}{6N} \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \left[ -\frac{\zeta(2)^2}{2\zeta(3)} - \frac{5\zeta(3)}{8\zeta(2)} + \frac{1}{3} \ln \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right) + \gamma + \frac{5}{24} \right] + \mathcal{O} \left[ \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{4/3} \right] \right\}. \quad (2.152)$$

Die kritische Temperatur (2.152) ist zusammen mit den exakten Ergebnissen in Abbildung 2.9(a) dargestellt und entspricht im Übrigen der Abbildung 2.3(a), da die numerischen Unterschiede zu der Gleichung (2.93) zu klein sind, um graphisch erkennbar zu sein.

Im dreidimensionalen Fall ist die Korrektur 2. oder sogar 3. Ordnung zwar aus akademischen Gründen interessant, experimentell sind die Korrekturen jedoch zu klein, um gemessen zu werden. Die vorgestellte Methode bietet aber die Möglichkeit, die kritische Temperatur für Dimensionen  $D < 3$  auszurechnen, wie in [25] getan wurde. Dabei taucht die transzendente Euler-Mascheroni-Konstante  $\gamma$  bei  $D = 2$  in der ersten Ordnung und bei  $D = 1$  sogar im thermodynamischen Limes auf, so dass diese Ergebnisse auch experimentell überprüft werden können.

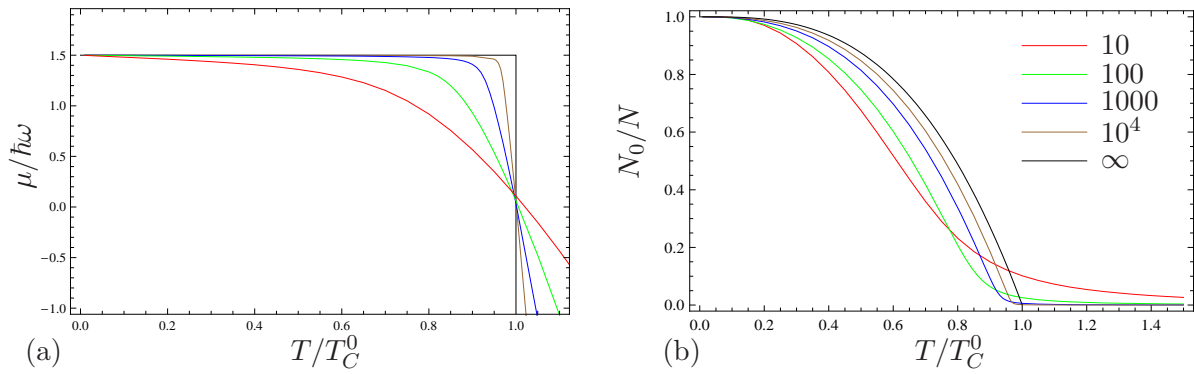
### 2.2.6 Quantenmechanisch exakte Behandlung

In diesem Abschnitt wird eine exakte Berechnung der Teilchenzahl durchgeführt und daraus die Anzahl der Teilchen im Kondensat sowie die kritische Temperatur bestimmt (siehe dazu auch [24]).

Zunächst betrachten wir den Fall der isotropen harmonischen Falle mit  $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ . Die Teilchenzahl lautet in diesem Fall:

$$N = \sum_{\mathbf{k}=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\hbar\beta\omega(k_1+k_2+k_3)-\beta\mu} - 1}. \quad (2.153)$$

Da der Summand im Exponenten nur von der Summe  $k = k_1 + k_2 + k_3$  abhängt, kann die dreifache Summation gemäß (2.72) auf eine einfache reduziert werden. Damit lautet die Teilchenzahl für



**Abbildung 2.5:** Chemische Potentiale (a) und Kondensatteilchenanteile (b) aus der exakten Berechnung für die isotrope harmonische Falle für verschiedene Teilchenzahlen.

die isotrope Falle

$$N = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega k - \beta \hat{\mu}} - 1}. \quad (2.154)$$

Als zweites Beispiel betrachten wir den Fall der zylindrischen harmonischen Falle, wie sie näherungsweise in experimentellen Anordnungen vorkommt [1]. Sie ist durch folgende typische Bedingungen gekennzeichnet:

$$\omega_1 = \omega_2 = \gamma \omega_3, \quad (2.155)$$

Ausgedrückt durch das geometrische Mittel der Frequenzen (2.35), das zweckmässigerweise bei den Rechnungen verwendet wird, lauten die Frequenzen:

$$\omega_1 = \omega_2 = \gamma^{1/3} \tilde{\omega}, \quad \omega_3 = \gamma^{-2/3} \tilde{\omega} \quad (2.156)$$

Unter Ausnutzung der Beziehung (2.70) lässt sich die Teilchenzahl (2.28) in diesem Fall auf eine zweifache Summation zurückführen:

$$N = \sum_{k'=0}^{\infty} \sum_{k_3=0}^{\infty} (k' + 1) \frac{1}{e^{\beta \hbar \tilde{\omega} \gamma^{1/3} (k' + k_3/\gamma) - \beta \hat{\mu}} - 1}. \quad (2.157)$$

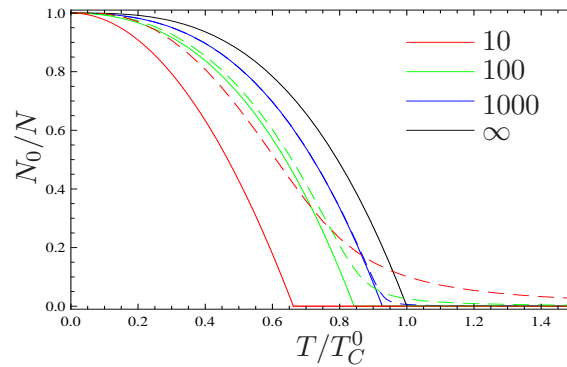
### Kondensatteilchenanteile

Für die konkrete Berechnung der Teilchenzahlen ist die Kenntnis des chemischen Potentials in Abhängigkeit von der Temperatur notwendig. Dazu hält man die mittlere Teilchenzahl  $N$  für die isotrope Falle (2.154) bzw. anisotrope Falle (2.157) fest und berechnet daraus die Fugazität  $\hat{z} = e^{\beta \hat{\mu}}$  zu einer vorgegebenen Temperatur  $T$ . Dies geschieht durch Ersetzung der Reihen (2.154) bzw. (2.157) durch entsprechende Polynome bis zu einer ausreichend hohen Potenz sowie einer numerischen Auffindung der Lösungen für  $\hat{z}$ . Sind die Fugazitätswerte für verschiedene Temperaturen bekannt, dann ergibt sich das chemische Potential durch Umformung der Definitionsgleichung (2.48). Unter Verwendung des reduzierten chemischen Potentials (2.40) und der semiklassischen kritischen Temperatur (2.51) erhält man das folgende Ergebnis:

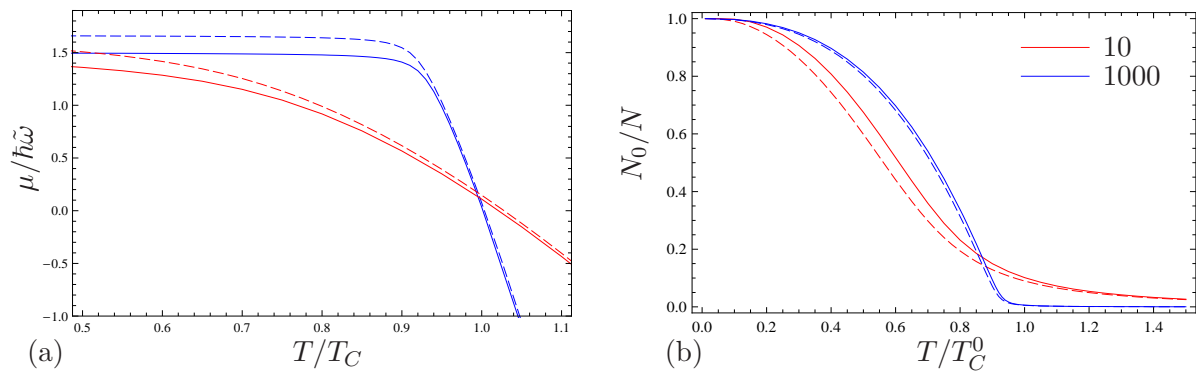
$$\mu(T) = \hbar \tilde{\omega} \left[ \frac{T}{T_C^0} \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} \ln z(T) + \frac{3}{2} \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\omega}} \right]. \quad (2.158)$$

Der Verlauf des chemischen Potentials für die isotrope harmonische Falle mit der Frequenz  $\omega$  für verschiedene Teilchenzahlen ist in Abbildung 2.5(a) dargestellt. Für  $T/T_C^0 \rightarrow 0$  nähert sich





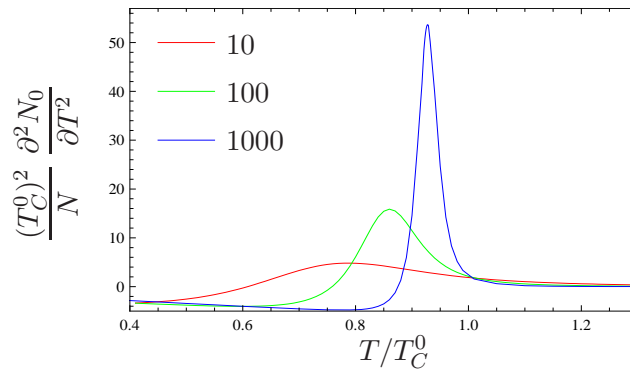
**Abbildung 2.6:** Vergleich der Kondensatteilchenanteile aus der exakten Berechnung (gestrichelt) sowie aus der semiklassischen Näherung 1. Ordnung (durchgezogene Linie) und dem semiklassischen thermodynamischen Limes (2.53).



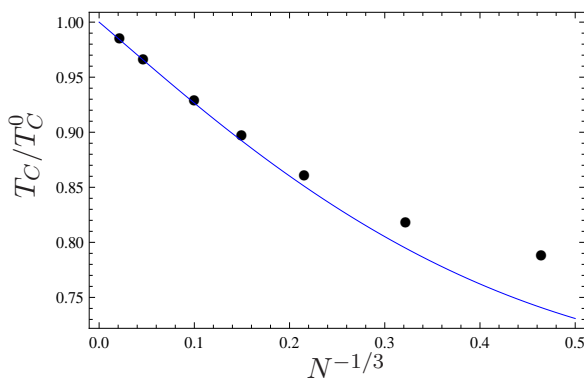
**Abbildung 2.7:** Vergleich des chemischen Potentials (a) und der Kondensatteilchenanteile (b) für die isotrope (durchgezogene Linie) und die anisotrope (gestrichelte Linie) Fälle ausgewertet für  $\gamma = \sqrt{8}$  aus (2.155) entsprechend der experimentellen Anordnung [1] für  $N = 10$  und  $N = 1000$ .

der Wert des chemischen Potentials der Grundzustandsenergie, die im Fall der harmonischen Falle  $3\hbar\omega/2$  beträgt. Nur im Punkt  $T/T_C^0 = 0$  gilt, dass  $\mu = E_0$ . Für große Temperaturen wird das chemische Potential negativ. Je größer die Teilchenzahl ist, desto später kommt der Bereich, wo sich das chemische Potential stark ändert. Nur im thermodynamischen Limes entspricht das chemische Potential für Temperaturen kleiner als die kritische Temperatur exakt der Grundzustandsenergie. Nachdem wir uns die Werte des chemischen Potentials beschafft haben, sind wir in der Lage, die Kondensatteilchenzahl (2.29) zu berechnen. Abbildung 2.5(b) zeigt die daraus berechneten Kondensatteilchenanteile. Man sieht, dass die Kondensation für kleinere Teilchenzahlen bei immer kleineren Temperaturen einsetzt. Ein Vergleich der Kondensatteilchenanteile aus der exakten Berechnung mit den semiklassischen Ergebnissen in 1. Ordnung nach (2.77) ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Die semiklassischen Ergebnisse weisen im Gegensatz zu exakten Berechnungen immer einen Knick auf, der die kritische Temperatur markiert. Sieht man von diesem Unterschied ab, ergeben die semiklassischen Ergebnisse eine gute Näherung für größere Teilchenzahlen und werden zunehmend ungenauer bei kleineren Teilchenzahlen.

Der Vergleich des chemischen Potentials für die isotrope und zylindrische anisotrope harmonische Falle mit den Frequenzen (2.155) ist in Abbildung 2.7(a) dargestellt. Das chemische Potential der anisotropen Falle ist etwas größer als das der isotropen Falle. Es strebt ebenfalls



**Abbildung 2.8:** Krümmung der Kurven für die Kondensateilchenanteile aus Abbildung 2.5(b) für  $N = 10, 100, 1000$  Teilchen. Die Maxima der Krümmungen bestimmen die quasikritische Temperatur.



$N$	$T_C/T_C^0$
10	0.787
30	0.817
100	0.860
300	0.896
1000	0.927
$10^4$	0.965
$10^5$	0.984

**Abbildung 2.9:** Quasikritische Temperatur für verschiedene Teilchenzahlen, welche numerisch aus quantenmechanisch exakten großkanonischen Ergebnissen für die Kondensateilchenanteile entsprechend der Abbildung 2.8 bestimmt wird.

gegen die Grundzustandsenergie (2.37). Ein Vergleich der Kondensateilchenanteile für die isotrope Falle und anisotrope Falle kann anhand der Abbildung 2.7(b) vorgenommen werden. Man erkennt, dass die Anisotropie das Einsetzen der Kondensation unterdrückt, wobei dieser Effekt mit steigender Teilchenzahl abnimmt. Dies wurde bereits bei der Berechnung der kritischen Temperatur im anisotropen Fall (2.113) festgestellt.

### Kritische Temperatur

Da endliche Systeme keinen Phasenübergang haben, erhält man für großkanonisch quantenmechanisch exakte Rechnungen glatte Kurven, wie aus Abbildungen 2.5(b) und 2.7(b) zu sehen ist. Man möchte daraus dennoch eine zur kritischen Temperatur vergleichbare Größe erhalten, um die vorliegenden Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der semiklassischen Rechnung zu vergleichen. Eine geeignete Bestimmung ergibt sich beispielsweise für denjenigen Temperaturwert, welcher der stärksten Krümmung der Kondensateilchenzahl entspricht. Diese Temperatur interpretieren wir als das Analogon der kritischen Temperatur in einem endlichen System und nennen sie quasikritische Temperatur [24]. In der Abbildung 2.5(b) ist zu sehen, dass der Bereich, in dem sich die Krümmung der Kurven stark ändert, für kleinere Teilchenzahlen immer weiter nach links wandert und zunehmend breiter wird. Der Verlauf der Krümmungen für verschiedene Teilchenzahlen ist in Abbildung 2.8 dargestellt. Man erkennt, dass sich mit steigender Teilchenzahl

ein immer schmallerer Peak ausbildet, so dass die quasikritische Temperatur immer genauer bestimmt werden kann. Die obige Definition für die quasikritische Temperatur ist nicht die einzig mögliche. Andere Möglichkeiten sind z.B. die Wendepunkte der Kurven aus Abbildung 2.5(b) zu nehmen oder die Maxima der Wärmekapazität. Abbildung 2.9(a) stellt die quasikritische Temperatur in Abhängigkeit von  $N^{-1/3}$  dar. Zum Vergleich ist die semiklassische Näherung dritter Ordnung aus (2.152) zu sehen. Für große Teilchenzahlen stellt das semiklassische Ergebnis eine gute Näherung da, während es für kleiner werdende Teilchenzahlen zunehmend schlechter wird. Dies liegt zum einen wohl in der Natur der semiklassischen Näherung begründet, welche eine Entwicklung für große Teilchenzahlen darstellt, und zum anderen in den diskutierten Definitionsschwierigkeiten für die quasikritische Temperatur, welche bei kleinen Teilchenzahlen besonders hervortreten.

### Wärmekapazität

Zur exakten Berechnung der Wärmekapazität für die isotrope harmonische Falle wird Gleichung (2.81) als Ausgangspunkt genommen und zunächst mit Hilfe polylogarithmischer Funktionen dargestellt als:

$$F_G = -\frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \zeta_1 \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right). \quad (2.159)$$

Ausgehend von dieser Gleichung wird nun zunächst die Teilchenzahl gemäß (2.9)

$$N = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \zeta_0 \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) \quad (2.160)$$

und die Entropie gemäß (2.7)

$$S = -k_B \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \left[ \beta(\hat{\mu} - k\hbar\omega) \zeta_0 \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) - \zeta_1 \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) \right] \quad (2.161)$$

bestimmt. Daraus folgt für die innere Energie (2.55)

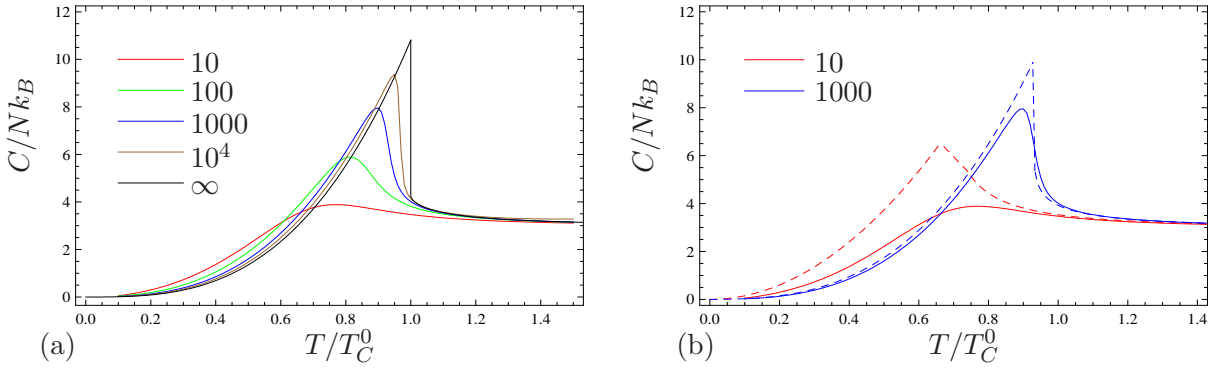
$$U = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) (E_0 + k\hbar\omega) \zeta_0 \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) \quad (2.162)$$

und damit nach (2.54) für die Wärmekapazität zunächst

$$C = -\beta \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) (E_0 + k\hbar\omega) \times \left[ \frac{\mu - E_0 - k\hbar\omega}{T} \zeta_{-1} \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) + \zeta_{-1} \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) \frac{\partial \mu}{\partial T} \Big|_{V,N} \right]. \quad (2.163)$$

Die dabei auftretende innere Ableitung  $\partial \mu / \partial T$  entnimmt man wieder der Teilchenzahlgleichung (2.160), indem diese bei festem  $N$  nach  $T$  differenziert wird:

$$0 = \frac{\partial N}{\partial T} \Big|_{V,N} = \beta \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \zeta_{-1} \left( e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)} \right) \left[ -\frac{1}{T} (\mu - E_0 - k\hbar\omega) + \frac{\partial \mu}{\partial T} \Big|_{V,N} \right]. \quad (2.164)$$



**Abbildung 2.10:** (a) Vergleich der quantenmechanisch exakt berechneten Wärmekapazitäten (2.166) für verschiedene Teilchenzahlen. Zusätzlich ist das im thermodynamischen Limes gültige Ergebnis dargestellt, das den Gleichungen (2.62) und (2.68) ohne den Finite-Size-Korrekturterm entspricht. (b) Vergleich der Waermekapazitäten aus der semiklassischen (gestrichelte Linie) und der quantenmechanisch exakten (durchgezogene Linie) Rechnung.

Hieraus erhält man folgenden Ausdruck für die zeitliche Ableitung des chemischen Potentials:

$$\left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_{V,N} = \frac{1}{T} \frac{\sum_{k'=0}^{\infty} (k'^2/2 + 3k'/2 + 1) (\mu - E_0 - k\hbar\omega) \zeta_{-1} (e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k')})}{\sum_{k''=0}^{\infty} (k''^2/2 + 3k''/2 + 1) \zeta_{-1} (e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k'')})}. \quad (2.165)$$

Durch Einsetzen dieses Ergebnisses in Gleichung (2.163) ergibt sich schließlich der folgende Ausdruck für die Wärmekapazität.

$$C = k_B (\beta \hbar \omega)^2 \left[ \sum_{k''=0}^{\infty} (k''^2/2 + 3k''/2 + 1) \zeta_{-1} (e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k'')}) \right]^{-1} \times \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^4}{2} + \frac{3k^3}{2} + k^2 \right) \zeta_{-1} (e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k)}) - \left[ \sum_{k'=0}^{\infty} (k'^3/2 + 3k'^2/2 + k') \zeta_{-1} (e^{\beta(\hat{\mu} - \hbar\omega k')}) \right]^2 \right\} \quad (2.166)$$

Die Auswertung der Wärmekapazität erfolgt analog zur Auswertung der Kondensatteilchenzahlen in (2.2.6). Nach der Bestimmung des chemischen Potentials  $\mu(T)$  wird die Wärmekapazität für verschiedene Temperaturwerte berechnet, indem die unendliche Reihe durch ein Polynom bis zu einer ausreichend hohen Potenz ersetzt wird. Die auf diese Weise gewonnenen Resultate sind in Abbildung 2.10(a) in Abhängigkeit der reduzierten Temperatur  $T/T_C^0$  dargestellt.

Die Kurven der exakt berechneten Wärmekapazität sind für alle Teilchenzahlen glatt und weisen weder Sprünge noch Knickstellen auf. Die Lagen der Maxima sind dabei zu niedrigen Temperaturen hin verschoben. Der Unterschied zwischen der semiklassischen Rechnung gemäß (2.121) und (2.123) und der exakten Rechnung ist in Abbildung 2.10(b) zu sehen. Für größere Teilchenzahlen stimmen die beiden Ergebnisse in weitem Bereich gut überein. Der wesentliche Unterschied tritt am kritischen Punkt zu Tage, wo das semiklassische Ergebnis einen Sprung aufweist, während bei der exakten Rechnung die Kurven glatt bleiben. Für kleine Teilchenzahlen sind jedoch deutliche Abweichungen für  $T < T_C$  zu erkennen.

## 2.3 Lokale Eigenschaften

Informationen über Bose-Einstein-Kondensate werden aus in-situ und time-of-flight-Aufnahmen gewonnen, welche die Dichteverteilung der Atome in der Falle bzw. während der ballistischen

Expansion wiedergeben. Alle Eigenschaften des Kondensats und der thermischen Wolke werden ausgehend von experimentellen Messungen dieser Dichteverteilungen abgeleitet, indem die gemessenen Verteilungen mit theoretischen Ergebnissen verglichen werden. Im Folgenden wird die Beschreibung der Dichteverteilung in semiklassischer Näherung sowie durch exakte numerische Berechnung vorgestellt.

### 2.3.1 Semiklassischer Ansatz für die Teilchendichte

Die Dichte wird für  $T \leq T_C$  als Summe der Kondensatdichte und der thermischen Dichte dargestellt.

$$n(\mathbf{x}) = n_0(\mathbf{x}) + n_T(\mathbf{x}). \quad (2.167)$$

Die Kondensatdichte wird dabei durch die Wellenfunktion des Grundzustandes bestimmt:

$$n_0(\mathbf{x}) = N_0 |\psi_0(\mathbf{x})|^2, \quad (2.168)$$

mit  $\psi_0(\mathbf{x})$  aus (2.34). Die thermische Dichte ist durch die Summe

$$n_T(\mathbf{x}) = \sum_{k \neq 0} f_k |\psi_k(\mathbf{x})|^2 \quad (2.169)$$

aller übrigen Wellenfunktionen  $\psi_k(\mathbf{x})$  gemäß (2.33) mit der Besetzungszahl  $f_k$  gegeben. Bei der semiklassischen Näherung nimmt man an, dass die De-Broglie-Wellenlänge  $\lambda$  nach (1.5) klein ist gegenüber der Längeskala, auf der sich das Potential signifikant ändert, und nähert die Summe (2.169) mit Hilfe der semiklassischen Verteilungsfunktion

$$f_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{e^{\beta(H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - \hat{\mu})} - 1}. \quad (2.170)$$

wieder mit einem Integral

$$n_T(\mathbf{x}) = \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} f_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}). \quad (2.171)$$

Mit  $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  wird nun die klassische Energie eines Teilchens bezeichnet:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + V(\mathbf{x}), \quad (2.172)$$

wobei wir das harmonische Potential (2.32) betrachten. Führt man das Impulsintegral aus, so kann man die thermische Dichte mit Hilfe der polylogarithmischen Funktion auf die folgende Form bringen

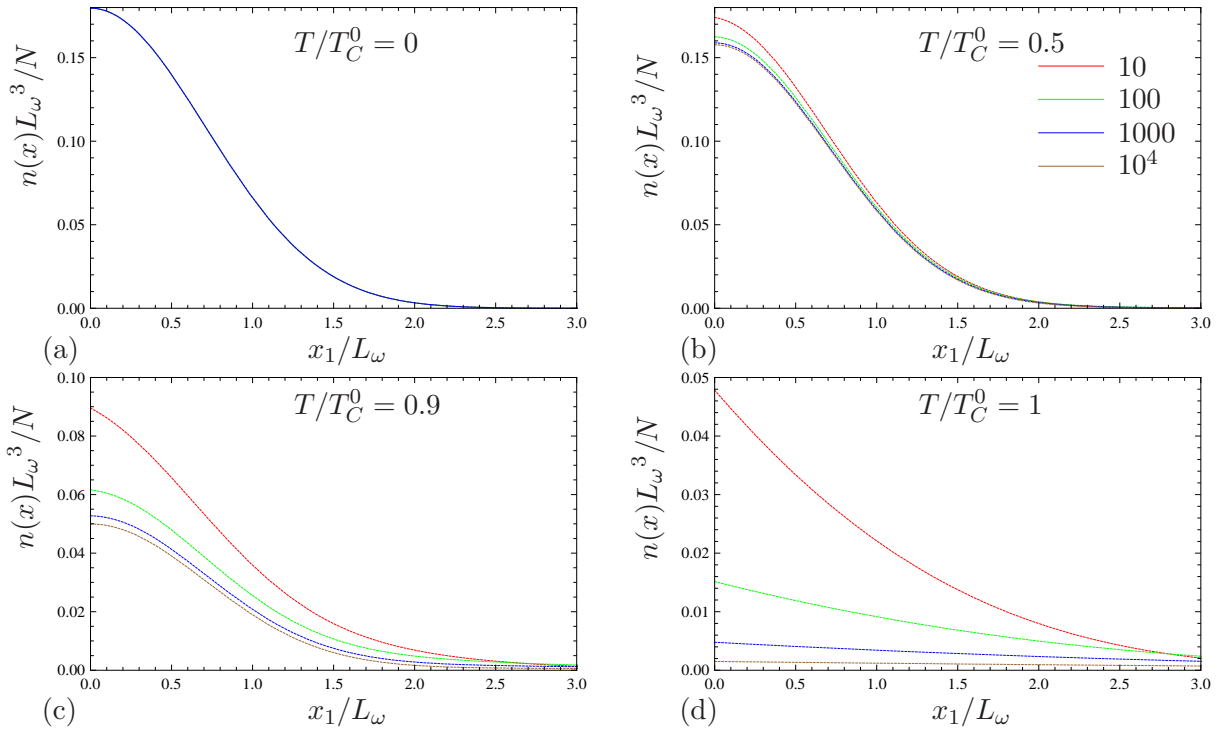
$$n_T(\mathbf{x}) = \left( \frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \zeta_{3/2} \left( e^{\beta(\hat{\mu} - V(\mathbf{x}))} \right). \quad (2.173)$$

Die Gesamtteilchendichte lautet daher nach (2.167) mit der Grundzustandsfunktion  $\psi_0(\mathbf{x})$  aus (2.34)

$$n(\mathbf{x}) = N_0 \left( \frac{M\tilde{\omega}}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-M(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2)/\hbar} + \left( \frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \zeta_{3/2} \left( e^{\beta(\hat{\mu} - V(\mathbf{x}))} \right). \quad (2.174)$$

Als Funktion der Temperatur  $T_C^0$  gemäß (2.51) und mit der Kondensatteilchenzahl (2.53) lautet die Dichte:

$$n(\mathbf{x}) = \frac{N}{\tilde{L}_\omega^3} \frac{1}{\pi^{3/2}} \left\{ \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_C^0} \right)^3 \right] \exp \left\{ - \sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \right\} + \frac{1}{\sqrt{8N\zeta(3)}} \left( \frac{T}{T_C^0} \right)^{3/2} \zeta_{3/2} \left( e^A \right) \right\} \quad (2.175)$$

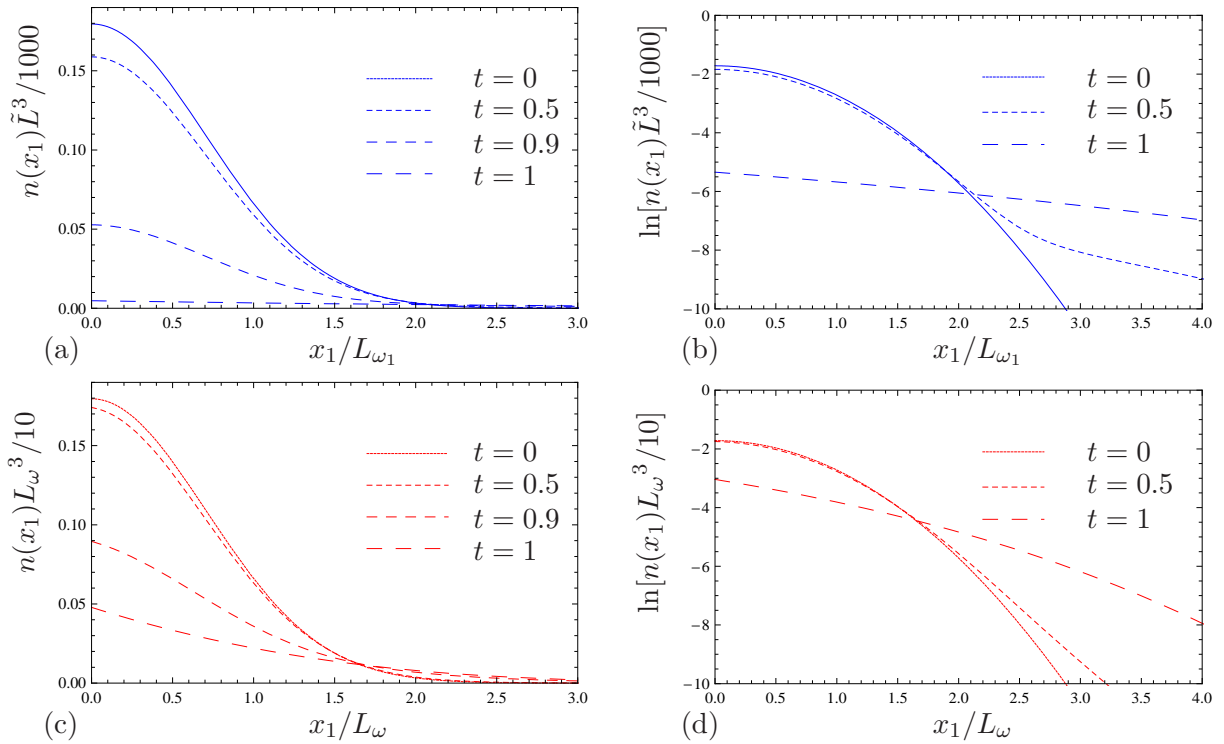


**Abbildung 2.11:** Teilchenzahlabhängige semiklassische Dichten im thermodynamischen Limes nach (2.175) für verschiedene Temperaturen.

mit der Abkürzung

$$A = \left( \frac{\zeta(3)}{N} \right)^{1/3} \frac{T_C}{T} \left[ \frac{\hat{\mu}}{\hbar\tilde{\omega}} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{L_{\omega_j}^2} \right]. \quad (2.176)$$

Dabei bezeichnet  $\tilde{L}_\omega = \sqrt{\hbar/M\tilde{\omega}}$  mit  $\tilde{\omega}$  gemäß (2.35) die effektive mittlere Breite des Grundzustandes der harmonischen Falle und  $L_{\omega_j} = \sqrt{\hbar/M\omega_j}$  die Breite in die  $j$ -te Raumrichtung. Für  $T < T_C$  setzt man bei der Berechnung der Dichte das chemische Potential gleich null:  $\hat{\mu} = 0$ . Für  $T > T_C$  wird das chemische Potential numerisch aus der Teilchenzahlgleichung (2.50) abgeleitet. Die Dichten für verschiedene Teilchenzahlen und Temperaturen sind in Abbildung 2.11 zu sehen. Bei der Temperatur  $T/T_C^0 = 0$  sind die Dichten für alle Teilchenzahlen gleich, da sie durch die Grundzustandfunktion gegeben sind und mit  $1/N$  normiert aufgetragen sind. Für die anderen Temperaturen ist die Dichte im Zentrum der Falle umso größer, je kleiner die Teilchenzahl ist. Die Tendenz verstärkt sich für größere Temperaturen. Dies liegt daran, dass für kleine Teilchenzahlen der Kondensationseffekt unterhalb der kritischen Temperatur weniger stark in Erscheinung tritt, so dass die Dichte hinsichtlich der Höhe unterhalb und oberhalb der kritischen Temperatur eine weniger große Veränderung erfährt. Die spitze Form der Dichtekurve für  $T/T_C^0 = 1$  liegt an dem dominierend werdenden thermischen Dichteanteil, der durch die polylogarithmische Funktion bestimmt wird. Dies ist ein Artefakt des thermodynamischen Limes, der mit höheren semiklassischen Korrekturen verschwindet. Die Veränderung der Dichten mit der Temperatur für 1000 und 10 Teilchen ist in Abbildungen 2.12(a) bzw. 2.12(c) gut zu sehen. Eine genauere Analyse ist anhand von Abbildungen 2.12(b) bzw. 2.12(d) möglich, wo der Dichteverlauf von 1000 und 10 Teilchen bei drei ausgewählten Temperaturen in logarithmischer Darstellung gezeigt ist. Zu sehen ist, dass der Verlauf bei Temperatur  $T/T_C^0 = 0$ , bei der sich alle Teilchen im Kondensat befinden, eine ganz andere Krümmung hat, als der Verlauf bei der



**Abbildung 2.12:** Temperaturabhängige semiklassische Dichten im thermodynamischen Limes nach (2.175) für 1000 Teilchen (blau) und 10 Teilchen (rot) ausgewertet für  $x_2 = x_3 = 0$  in normaler und logarithmischer Darstellung für verschiedene reduzierte Temperaturen  $t = T/T_C^0$ .

Temperatur  $T/T_C^0 = 1$ , die für 10 bzw. 1000 Teilchen oberhalb der kritischen Temperatur liegt, so dass fast alle Teilchen thermisch angeregt sind. Bei einer mittleren Temperatur  $T/T_C^0 = 0.5$ , ist ein Knick zu sehen: In der Mitte der Falle spiegelt der Teilchenverlauf den starken Anteil der Kondensatteilchen, während nach außen hin der thermische Anteil dominant wird. Dies entspricht genau der experimentellen Beobachtung, dass sich unterhalb der kritischen Temperatur im Zentrum der Falle das Kondensat ausbildet. Der beschriebene Knick fällt für kleinere Teilchenzahlen weniger deutlich aus.

### 2.3.2 Feldtheoretische Beschreibung

Auch bei der Teilchendichte ist man daran interessiert, Effekte zu untersuchen, die aufgrund endlicher Teilchenzahlen hervorgerufen werden. Dazu benötigen wir einen exakten Ausdruck für die großkanonische Teilchendichte in einem harmonischen Potential. Diesen Ausdruck kann man auf eine einfache Art und Weise aus dem kanonischen Einteilchenpropagator gewinnen. Zur Herleitung dieses Zusammenhangs wird im Folgenden ein feldtheoretischer Exkurs unternommen, der sich insbesondere an das Vorlesungsskript [23] sowie die Dissertation [24] anlehnt.

Statistische Größen im großkanonischen Ensemble können mit Hilfe von Funktionalintegralen berechnet werden. So gilt für die großkanonische Zustandssumme

$$Z_G = \oint \mathcal{D}\psi^* \oint \mathcal{D}\psi e^{-A[\psi^*, \psi]/\hbar}. \quad (2.177)$$

Dabei hat der Exponent des Integrandes die Form einer euklidischen Wirkung

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \right\} \psi(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.178)$$

Eine Herleitung des Funktionalintegrals (2.177) aus der großkanonischen Zustandssumme

$$Z_G = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \quad (2.179)$$

mit Hilfe kohärenter Vielteilchenzustände  $\psi^*(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\psi(\mathbf{x}, \tau)$  ist beispielsweise in Referenz [24] zu finden.

Damit die euklidische Wirkung (2.178) eine möglichst einfache Struktur hat, suchen wir im Folgenden eine Darstellung, in der der Integralkern

$$K(\mathbf{x}, \tau) = \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) - \mu \quad (2.180)$$

diagonalisiert wird. Da die zeitliche Abhängigkeit des Integralkerns linear ist und die räumlichen Abhängigkeiten davon entkoppelt sind, machen wir den Ansatz

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \phi(\tau) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (2.181)$$

Dabei ist die Zeitabhängigkeit durch  $\phi(\tau) = e^{\omega\tau}$  gegeben und die Ortswellenfunktionen  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$  werden durch Energieeigenzustände des Ein-Teilchen-Hamiltonoperators dargestellt, welche die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (2.182)$$

lösen und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (2.183)$$

und die Orthonormalitätsrelation

$$\int d^3x \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2.184)$$

erfüllen. Durch  $E_{\mathbf{k}}$  werden Energie-Eigenwerte im Einteilchen-Quantenzustand  $\mathbf{k}$  bezeichnet.

Bei der Bestimmung der Imaginärzeitabhängigkeit muss berücksichtigt werden, dass die Felder periodisch sind, d.h. den Bedingungen

$$\psi(\mathbf{x}, \hbar\beta) = \psi(\mathbf{x}, 0), \quad \psi^*(\mathbf{x}, \hbar\beta) = \psi^*(\mathbf{x}, 0) \quad (2.185)$$

genügen müssen. Die Periodizität wird erfüllt, wenn  $\omega = i\omega_m$  gilt und Frequenzen die Werte

$$\omega_m = \frac{2\pi m}{\hbar\beta} \quad \text{mit} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.186)$$

einnehmen. Diese Frequenzen werden auch Matsubara-Frequenzen genannt. Die Zeitfunktionen

$$\phi(\tau, m) = (\hbar\beta)^{-1/2} e^{i\omega_m \tau} \quad (2.187)$$



bilden ebenfalls ein vollständiges Orthonormalsystem im Raum der  $\hbar\beta$ -periodischen Funktionen mit der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \phi(\tau', m) \phi^*(\tau, m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau' - \tau - n\hbar\beta) \quad (2.188)$$

und der Orthonormalitätsrelation

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau \phi^*(\tau, m) \phi(\tau, m') = \delta_{m, m'}. \quad (2.189)$$

Die kohärenten Feldkonfigurationen können entsprechend dem Ansatz (2.181) und den Vollständigkeitsrelationen der räumlichen und zeitlichen Komponenten als Linearkombinationen

$$\psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i\omega_m \tau} \quad (2.190)$$

konstruiert werden. Sie diagonalisieren den Integralkern (2.180) entsprechend der Beziehung

$$K(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) e^{i\omega_m \tau}, \quad (2.191)$$

wie man mit Hilfe der Eigenwertgleichung (2.182) erkennt. Die euklidische Wirkung lässt sich unter Berücksichtigung der Orthonormalitätsrelation der Ortswellen- und der Zeitfunktionen (2.184) und (2.189) auf die Diagonalform bringen:

$$\mathcal{A}[\psi^*, \psi] = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\mathbf{k}m}^* a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu). \quad (2.192)$$

Die Freiheit der Wahl eines kohärenten Feldes ist aufgrund der Konstruktion (2.190) 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:

$$\oint \mathcal{D}\psi^*(\mathbf{x}, \tau) \mathcal{D}\psi(\mathbf{x}, \tau) = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \left[ \int \frac{da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m}}{2\pi\hbar\beta} \right]. \quad (2.193)$$

Dabei wurde berücksichtigt, 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, so dass die entsprechende Jacobi-Determinante gleich eins ist. Die Bedingung periodischer Feldkonfigurationen ist bereits durch die Wahl der Matsubara-Frequenzen gewährleistet. Der Faktor  $2\pi$  im Nenner war im Maß des Funktionalintegrals (2.177) bereits enthalten und ist hier nur ausgeschrieben worden. Mit (2.193) kann die großkanonische Zustandssumme (2.177) zunächst auf die Form

$$Z_G = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \left[ \int \frac{da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m}}{2\pi\hbar\beta} \right] \exp \{ -a_{\mathbf{k}m}^* a_{\mathbf{k}m} (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu) / \hbar \} \quad (2.194)$$

gebracht werden. Die komplexwertigen Entwicklungskoeffizienten können mit Hilfe reelwertiger Koeffizienten  $b_{\mathbf{k}m}$  und  $c_{\mathbf{k}m}$  umgeschrieben werden:

$$a_{\mathbf{k}m} = b_{\mathbf{k}m} + ic_{\mathbf{k}m}, \quad a_{\mathbf{k}m}^* = b_{\mathbf{k}m} - ic_{\mathbf{k}m}, \quad (2.195)$$

so daß sich unter Beachtung der Umformungsregel für eine zweidimensionale Koordinatentransformation

$$\int da_{\mathbf{k}m}^* da_{\mathbf{k}m} = 2 \int db_{\mathbf{k}m} dc_{\mathbf{k}m} \quad (2.196)$$

der folgende Ausdruck für die wechselwirkungsfreie großkanonische Zustandssumme ergibt:

$$Z_G = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\beta (i\hbar\omega_m + E_{\mathbf{k}} - \mu)}. \quad (2.197)$$

### Freier Propagator

In Analogie zur großkanonischen Zustandssumme ist der freie Propagator definiert als

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \frac{1}{Z_G} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \hat{T} \left[ \hat{a}(\mathbf{x}_1, \tau_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2) \right] \right\}. \quad (2.198)$$

Dabei stellen die Operatoren

$$\hat{a}(\mathbf{x}, \tau) = e^{\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}(\mathbf{x}) e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \quad (2.199)$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{x}, \tau) = e^{\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \hat{a}^\dagger(\mathbf{x}) e^{-\tau(\hat{H}-\mu\hat{N})/\hbar} \quad (2.200)$$

die explizit von der Imaginärzeit  $\tau$  abhängigen Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren im Heisenberg-Bild dar. Der Operator  $\hat{T}$  ist der Zeitordnungsoperator, der dafür sorgt, dass der früher wirkende Operator rechts vom später wirkenden steht. Die Spektraldarstellung der Green-Funktion berechnet sich mit einigem Aufwand [24, Kap. 2] zu

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{2\pi i m (\tau_1 - \tau_2) / \hbar \beta}}{\beta (E_{\mathbf{k}} - \mu) + 2\pi i m} \quad (2.201)$$

und kann mit Hilfe der Poissonschen Summenformel [24, Anhang A]

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-2\pi i n x} \quad (2.202)$$

weiter vereinfacht werden, so dass wir den Ausdruck

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega(\tau_1 - \tau_2 + n\hbar\beta)}}{-i\hbar(\omega + i\frac{E_{\mathbf{k}} - \mu}{\hbar})} \quad (2.203)$$

erhalten. Dies kann umgeschrieben werden zu

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2 + n\hbar\beta), \quad (2.204)$$

wobei für die Funktionen  $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau)$  gilt

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega\tau}}{-i\hbar(\omega + i\frac{E_{\mathbf{k}} - \mu}{\hbar})}. \quad (2.205)$$

Das  $\omega$ -Integral kann mit Hilfe des Residuensatzes und dem Lemma von Jordan ausgeführt werden. Für  $\tau > 0$  kann man das Integral über einen Halbkreis über die negative komplexe Ebene berechnen, wofür man das Residuum

$$\text{Res} \left[ \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\frac{E_{\mathbf{k}} - \mu}{\hbar}} \right]_{\omega = -i\frac{E_{\mathbf{k}} - \mu}{\hbar}} = e^{-(E_{\mathbf{k}} - \mu)\tau/\hbar} \quad (2.206)$$

benötigt. Für  $\tau < 0$  ist entsprechend ein Halbkreis über die positive komplexe Ebene zu benutzen, wo der Integrand keinen Pol besitzt. Die Ergebnisse lassen sich zusammenfassen zu

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau) = \Theta(\tau) \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_2) e^{-(E_{\mathbf{k}} - \mu)\tau/\hbar}. \quad (2.207)$$

Ein Vergleich mit der Spektraldarstellung des Imaginärzeitpropagators (3.45), der im nächsten Kapitel ausführlich beschrieben wird, zeigt, dass man die Funktionen  $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau)$  auch durch die Imaginärzeitentwicklungsamplituden darstellen kann, wenn man die Energieeigenwerte um das chemische Potential verringert:

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau) = \Theta(\tau) (\mathbf{x}_2, \tau | \mathbf{x}_1, 0) |_{E_{\mathbf{k}} \rightarrow E_{\mathbf{k}} - \mu}. \quad (2.208)$$

Wir erhalten als wichtiges Ergebnis, dass man die Vielteilchen-Green-Funktion mit Hilfe der Ein-Teilchen-Imaginärzeitentwicklungsamplitude bestimmen kann:

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta(\tau - \tau' + n\hbar\beta) (\mathbf{x}_2, \tau_2 - \tau_1 + n\hbar\beta | \mathbf{x}_1, 0) |_{E_{\mathbf{k}} \rightarrow E_{\mathbf{k}} - \mu}. \quad (2.209)$$

Insbesondere sind wir im Folgenden an der Teilchendichte interessiert, die durch

$$n(\mathbf{x}) = \lim_{\tau' \uparrow \tau} G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}, \tau') = \sum_{n=1}^{\infty} (\mathbf{x}, n\hbar\beta | \mathbf{x}, 0) \cdot e^{n\beta\mu} \quad (2.210)$$

gegeben ist.

### 2.3.3 Finite-Size-Korrekturen zur Teilchendichte

Zur Berechnung der Finite-Size-Korrekturen geht man von der Gleichung (2.210) aus. Hier wird von dem Beitrag der thermisch angeregten Teilchen der Grundzustand explizit absepariert, da er wie bei den anderen thermodynamischen Größen getrennt behandelt wird. Mit dem lautet der thermischer Anteil zur Teilchendichte:

$$n_T(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ (\mathbf{x}, n\hbar\beta | \mathbf{x}, 0) e^{n\beta\mu} - |\psi_0(\mathbf{x})|^2 e^{(\mu - E_0)n\beta} \right]. \quad (2.211)$$

Ausklammern der Fugazität  $e^{n\beta\hat{\mu}}$  mit dem reduzierten chemischen Potential  $\hat{\mu}$  gemäß (2.40) führt zunächst auf:

$$n_T(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ (\mathbf{x}, n\hbar\beta | \mathbf{x}, 0) e^{E_0 n\beta} - |\psi_0(\mathbf{x})|^2 \right] e^{n\beta\hat{\mu}}. \quad (2.212)$$

Einsetzen des Propagators (C.46) sowie der Grundzustandsfunktion (2.34) und des Grundzustands (2.37) in (2.212) ergibt dann

$$n_T(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left( \frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{\sinh^{3/2}(n\hbar\beta\omega)} \exp \left[ -\frac{M\omega\mathbf{x}^2}{\hbar} \tanh \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] e^{3/2 \hbar\beta\omega n} - \left( \frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{-M\omega\mathbf{x}^2/\hbar} \right\} e^{n\beta\hat{\mu}}. \quad (2.213)$$

Eine Entwicklung der Hyperbolicus-Funktionen sowie der Exponentialfunktion bis zur ersten Ordnung führt zu folgendem Ausdruck

$$n_T(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left( \frac{M\omega}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left[ \frac{1}{(n\hbar\beta\omega)^{3/2}} - \frac{1}{4}n\hbar\beta\omega + \dots \right] \left[ 1 + \frac{3}{2}n\hbar\beta\omega + \dots \right] \right. \\ \left. \times \exp \left[ -\frac{M\omega\mathbf{x}^2}{\hbar} \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right] - \left( \frac{M\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{-M\omega\mathbf{x}^2/\hbar} \right\} e^{n\beta\hat{\mu}},$$

der mit Hilfe polylogarithmischer Funktionen auf die Form

$$n_T(\mathbf{x}) = \mathcal{O}((\hbar\beta\omega)^4) + \frac{1}{\lambda_T^3} \left\{ \zeta_{3/2}(e^{\beta[\hat{\mu}-V(\mathbf{x})]}) + \frac{3\hbar\beta\omega}{2} \zeta_{1/2}(e^{\beta[\hat{\mu}-V(\mathbf{x})]}) + \dots \right\} \quad (2.214)$$

gebracht werden kann. Das Problem bei dieser Gleichung besteht darin, dass die Funktion  $\zeta_{1/2}(\hat{z})$  für  $\hat{z} \rightarrow 1$  divergiert. Diese Situation tritt dann auf, wenn  $T < T_C$  und  $V(\mathbf{x}) = 0$ . Dieser Umstand motiviert eine andere Herangehensweise für die Finite-Size-Berechnung der Dichte: Es wird zunächst die Fouriertransformation der Dichte durchgeführt und erst danach für kleine  $\hbar\beta\omega$  entwickelt [27].

Die Fouriertransformation der Dichte (2.213) gemäß

$$n_T(\mathbf{p}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} n_T(\mathbf{x}) \quad (2.215)$$

liefert zunächst

$$n_T(\mathbf{p}) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ \frac{1}{(1 - e^{-n\hbar\beta\omega})^3} \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar} \coth \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] - \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar^2} \right] \right\}. \quad (2.216)$$

Zur weiteren Berechnung wird die Dichte umgeformt zu

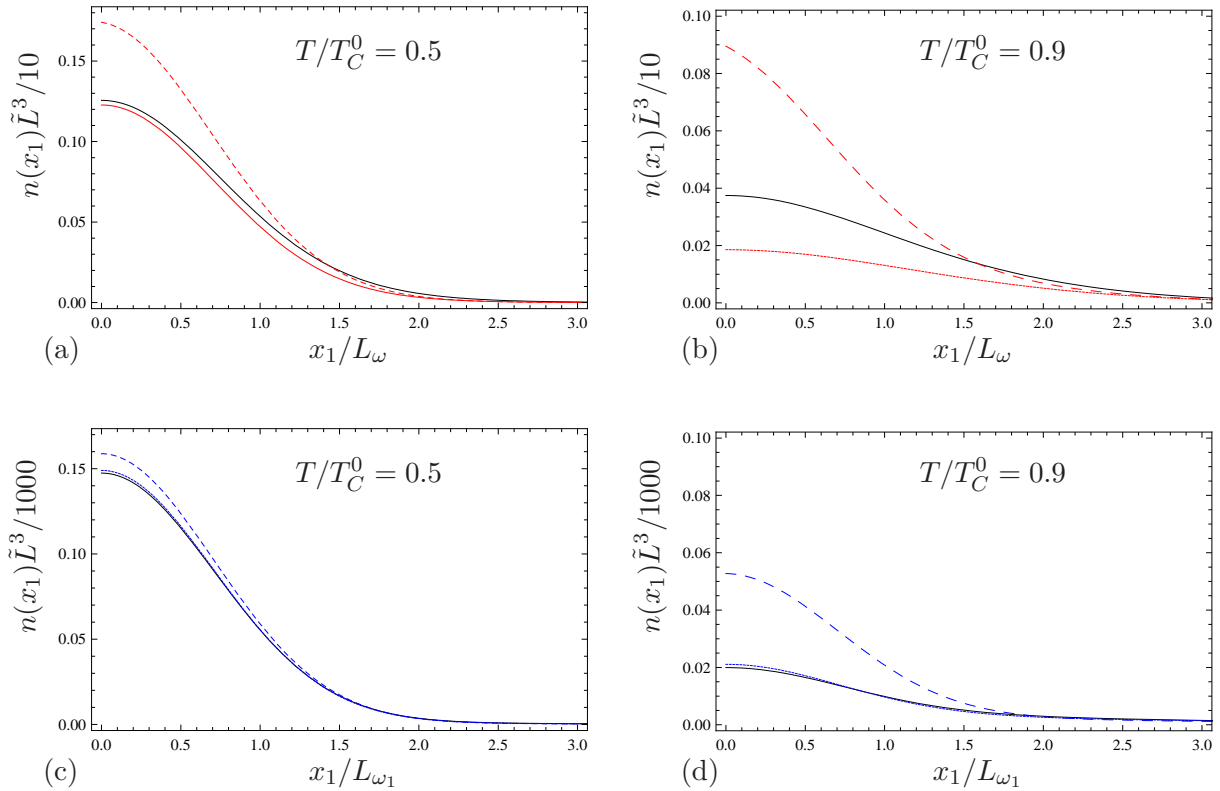
$$n_T(\mathbf{p}) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ \left[ \frac{1}{(1 - e^{-n\hbar\beta\omega})^3} - 1 \right] \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar} \coth \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] \right. \\ \left. + \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar} \coth \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] - \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar^2} \right] \right\}. \quad (2.217)$$

Jetzt wird die Differenz in der ersten eckigen Klammer auf den Hauptnenner gebracht

$$n_T(\mathbf{p}) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left\{ \frac{3e^{-n\hbar\beta\omega} - 3e^{-2n\hbar\beta\omega} + e^{-3n\hbar\beta\omega}}{(1 - e^{-n\hbar\beta\omega})^3} \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar} \coth \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] \right. \\ \left. + \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar} \coth \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] - \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar^2} \right] \right\}. \quad (2.218)$$

Die weitere Vorgehensweise wäre im Prinzip wie bei der Teilchenzahlberechnung, wo die Summe über  $n$  durch ein Integral plus Korrekturterm ersetzt wird. Da aber bisher für das Integral keine analytische Lösung gefunden wurde, wird die Dichte hier für kleine  $\hbar\beta\omega$  entwickelt und bis zur ersten Ordnung berechnet:

$$n_T(\mathbf{p}) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta\hat{\mu}} \left[ 3e^{-n\hbar\beta\omega} - 3e^{-2n\hbar\beta\omega} + e^{-3n\hbar\beta\omega} \right] \left[ \frac{1}{(n\hbar\beta\omega)^3} + \frac{3}{2} \frac{1}{(n\hbar\beta\omega)^2} \right] \\ \times \exp \left[ -\frac{\mathbf{p}^2 L_\omega^2}{4\hbar} \coth \left( \frac{n\hbar\beta\omega}{2} \right) \right] + \mathcal{O}[(\hbar\beta\omega)^{-1}]. \quad (2.219)$$



**Abbildung 2.13:** Vergleich der exakten Dichten, die numerisch aus der Gleichung (2.210) berechnet wurden, mit den semiklassischen Ergebnissen im thermodynamischen Limes und in der 1. Ordnung gemäß den Gleichungen (2.175) und (2.226). Dargestellt sind die Dichten für  $x_2 = x_3 = 0$  für 10 Teilchen (in rot) und 100 Teilchen (in blau) bei Temperaturen  $T/T_C^0 = 0.5$  und  $T/T_C^0 = 0.9$ . Numerisch berechneten Dichten sind schwarz, semiklassischen Dichten im thermodynamischen Limes sind als gestrichelte Linie und semiklassischen Dichten 1. Ordnung sind als durchgezogene farbige Linie gezeichnet.

Die beiden letzten Terme in (2.218) wurden vernachlässigt, da sie von der Ordnung  $\mathcal{O}[(\hbar\beta\omega)^0]$  und höher sind. Eine Rücktransformation sowie anschließende Entwicklung des Cotangenshyperbolikus nach  $\hbar\beta\omega$  führt auf

$$n_T(\mathbf{x}) = \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{n\beta(\hat{\mu}-\hbar\omega)} \left[3 - 3e^{-n\hbar\beta\omega} + e^{-n\hbar\beta\omega}\right] \times \left[\frac{1}{(n\hbar\beta\omega)^{3/2}} + \frac{3}{2} \frac{1}{(n\hbar\beta\omega)^{1/2}} + \dots\right] e^{-n\beta M\omega \mathbf{x}^2/2}. \quad (2.220)$$

Nach Entwicklung der Exponentialfunktionen in der eckigen Klammer und ausgedrückt mit polylogarithmischen Funktionen lässt sich die Dichte als

$$n_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{\lambda_T^3} \left\{ \zeta_{3/2} \left( e^{\beta(\hat{\mu}-\hbar\omega-V(\mathbf{x}))} \right) + \hbar\beta\omega \zeta_{1/2} \left( e^{\beta(\hat{\mu}-\hbar\omega-V(\mathbf{x}))} \right) + \dots \right\} \quad (2.221)$$

schreiben. Dieses Ergebnis ist wegen des zusätzlichen Faktors  $-\hbar\beta$  im Exponenten für alle Temperatur- und Potentialwerte konvergent. Die Raumintegration der Dichte führt zur Teilchenzahl:

$$N_T = \frac{1}{(\hbar\beta\omega)^3} \zeta_3 \left( e^{\beta(\hat{\mu}-\hbar\omega)} \right) + \frac{5}{2} \frac{1}{(\hbar\beta\omega)^2} \zeta_2 \left( e^{\beta(\hat{\mu}-\hbar\omega)} \right) + \dots, \quad (2.222)$$

welche unterhalb der kritischen Temperatur mit Hilfe der Robinson-Entwicklung (B.16 und B.16) auf die Form

$$N_T(T < T_C) = \frac{1}{(\hbar\beta_c\omega)^3}\zeta(3) + \frac{3}{2}\frac{1}{(\hbar\beta_c\omega)^2}\zeta(2) \quad (2.223)$$

gebracht werden kann. Wie zu erwarten, stimmt dieses Ergebnis mit dem Ergebnis erster Ordnung (2.86) überein.

Für die Darstellung der Gesamtdichte unterhalb der kritischen Temperatur benötigt man noch die Dichte der Teilchen im Grundzustand

$$n_0(\mathbf{x}) = N_0|\psi_0(\mathbf{x})|^2 \quad (2.224)$$

mit der Grundzustandsfunktion (2.34). Drückt man  $N_0$  mit Hilfe von (2.77) aus, so erhält man die folgende  $\hbar\beta\omega$ -Entwicklung für die Kondensatdichte

$$n_0(\mathbf{x}) = \frac{N}{L_\omega^3\pi^{3/2}} \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^3 - \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)} \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3} \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^2 \right\} e^{-\mathbf{x}^2/L_\omega^2}. \quad (2.225)$$

Die Gesamtdichte ergibt sich als Summe von (2.220) und (2.225):

$$n(\mathbf{x}) = \frac{N}{L_\omega^3\pi^{3/2}} \left\{ \left[ 1 - \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^3 - \frac{3\zeta(2)}{2\zeta(3)} \left(\frac{N}{\zeta(3)}\right)^{1/3} \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^2 \right] e^{-\mathbf{x}^2/L_\omega^2} + \frac{1}{\sqrt{8N\zeta(3)}} \left[ \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{3/2} \zeta_{3/2}(e^A) + \left(\frac{\zeta(3)}{N}\right)^{1/3} \left(\frac{T}{T_C^0}\right)^{1/2} \zeta_{1/2}(e^A) \right] + \dots \right\} \quad (2.226)$$

mit  $A$  aus (2.176).

### 2.3.4 Exakte Berechnung der Dichten

Bei der exakten Berechnung der Dichte wird Gleichung (2.213) numerisch ausgerechnet. Ein Vergleich der Ergebnisse aus der semiklassischen Näherung erster Ordnung (2.226) mit den exakten Resultaten kann anhand der Abbildung 2.13 vorgenommen werden. Zu sehen ist, dass die semiklassische Korrektur 1. Ordnung eine wesentliche Annäherung der Dichteverteilungen an die exakten Ergebnisse darstellt im Vergleich zum Resultat im thermodynamischen Limes 2.175. Für 10 Teilchen bleiben jedoch insbesondere für  $T > T_C^0$  noch sichtbare Unterschiede bestehen.

Ein 3D-Plot für die anisotrope Falle mit Frequenzen  $\omega_1 = \omega_2 = \sqrt{8}\omega_3$  wie im Experiment in [1] ist auf dem Titelblatt wiedergegeben. Es zeigt die Dichte für 1000 Teilchen bei Temperaturen  $T/T_C^0 = 0.9, 0.5, 0$  im Ortsraum. Man erkennt, dass bei fortschreitender Kühlung die Teilchendichte im Zentrum der Falle extrem anwächst und identifiziert diesen Umstand mit der Ausbildung des Kondensats (siehe auch die Diskussion im Abschnitt 2.3.1). Die Abbildung zeigt, dass die Ausbildung des Kondensats nicht nur im Impulsraum, sondern auch im Ortsraum zu beobachten ist.

## Kapitel 3

# Kanonisches Ensemble

Das kanonische Ensemble beschreibt ein geschlossenes System im Wärmebad mit konstanter Temperatur  $T$ , Volumen  $V$  und Teilchenzahl  $N$ . Wenn das betrachtete System wechselwirkungsfrei ist und sich in  $M$  möglichen Zuständen befinden kann, dann ist die Wahrscheinlichkeit, dass es die Energie  $E_n$  hat, gegeben durch

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}, \quad (3.1)$$

wobei  $\beta = 1/k_B T$  und  $Z$  die Zustandssumme

$$Z = \sum_{n=1}^M e^{-\beta E_n} \quad (3.2)$$

bezeichnet. Ist die Zustandssumme eines Systems bekannt, dann lassen sich die thermodynamischen Größen Entropie  $S$  und Druck  $p$  leicht aus der freien Energie

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (3.3)$$

berechnen gemäß:

$$S(T, V, N) = -\left. \frac{\partial F(T, V, N)}{\partial T} \right|_{V, N}, \quad (3.4)$$

$$p(T, V, N) = -\left. \frac{\partial F(T, V, N)}{\partial V} \right|_{T, N}. \quad (3.5)$$

Die Zustandssumme lässt sich in allgemeiner Gestalt als die Spur einer Matrix schreiben

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_N}, \quad (3.6)$$

wobei  $\hat{H}_N$  den  $N$ -Teilchen-Hamiltonoperator bezeichnet. Wir betrachten zunächst nur ein einzelnes Teilchen, das durch den Einteilchen-Hamiltonoperator  $\hat{H}$  beschrieben wird, und werten seine Zustandssumme in Ortsdarstellung aus:

$$Z_1(\beta) = \int d^D x \langle \mathbf{x} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{x} \rangle. \quad (3.7)$$

Als Ausgangspunkt für weitere Berechnungen dienen uns im Folgenden die Matrixelemente im Integranden. Für zeitunabhängige  $\hat{H}$  werden sie analog zur quantenmechanischen Zeitentwicklungsamplitude, welche durch

$$\langle \mathbf{x}_b; t_b | \mathbf{x}_a; t_a \rangle_{\text{qm}} = \langle \mathbf{x}_b | e^{-i(t_b - t_a) \hat{H} / \hbar} | \mathbf{x}_a \rangle \quad (3.8)$$

gegeben ist, definiert als

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \langle \mathbf{x}_b | e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle \quad (3.9)$$

und Imaginärzeitamplitude genannt. Dabei bezeichnet  $\tau$  die Imaginärzeit, welche den Weg entlang des Intervalls  $(0; \hbar\beta)$  parametrisiert, und  $\tau_a$  und  $\tau_b$  sind die Imaginärzeiten des Ausgangs- und des Endzustands. Die Ausdrücke (3.8) und (3.9) können durch die so genannte Wick-Rotation

$$\tau_b - \tau_a = i(t_b - t_a) \quad (3.10)$$

ineinander überführt werden. Die Zustandssumme (3.7) kann mit Hilfe der Imaginärzeitamplitude (3.9) dargestellt werden, wenn  $\tau_a = 0$  und  $\tau_b = \hbar\beta$  ist und die periodischen Randbedingungen  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_a = \mathbf{x}$  gelten

$$Z_1(\beta) = \int d^D x (\mathbf{x}; \hbar\beta | \mathbf{x}; 0). \quad (3.11)$$

### 3.1 Pfadintegralformalismus

Die Berechnung der Imaginärzeitamplituden wird im Rahmen des Feynmanschen Pfadintegralformalismus [28,29] durchgeführt. Seine Herleitung ist das Thema dieses Abschnitts. Sie folgt weitestgehend dem Buch von Kleinert [21, Kap. 2.1].

#### 3.1.1 Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplitude

Die Imaginärzeitamplitude (3.9) beschreibt die dynamische Entwicklung eines Teilchens vom Anfangszustand  $|\mathbf{x}_a\rangle$  zum Endzustand  $|\mathbf{x}_b\rangle$ . Der Boltzmannfaktor  $e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}/\hbar}$  in (3.9) kann nun in ein Produkt aus  $N + 1$  infinitesimalen Boltzmannfaktoren  $e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar}$  zerlegt werden, welche während eines infinitesimalen Imaginärzeitabschnitts  $\epsilon = (\tau_b - \tau_a)/(N + 1)$  wirken

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \langle \mathbf{x}_b | e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} \underbrace{\mathbb{1} e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} \dots \mathbb{1} e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar}}_{N \text{ Faktoren}} | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (3.12)$$

Unter Verwendung der Vollständigkeitsrelation

$$\int d^D x_n |\mathbf{x}_n\rangle \langle \mathbf{x}_n| = \mathbb{1}, \quad n = 1, \dots, N \quad (3.13)$$

in  $D$  Dimensionen, die jeweils zwischen zwei infinitesimalen Imaginärzeitentwicklungsamplituden eingesetzt wird, kann die Imaginärzeitenentwicklungsamplitude als Produkt von  $N$  Integralen geschrieben werden

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} d^D x_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} (\mathbf{x}_n; \tau_n | \mathbf{x}_{n-1}; \tau_{n-1}), \quad (3.14)$$

wobei  $\tau_n = \tau_a + n\epsilon$ ,  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_{N+1}$ ,  $\mathbf{x}_a = \mathbf{x}_0$ ,  $\tau_b = \tau_{N+1}$ ,  $\tau_a = \tau_0$  bezeichnen. Der Integrand ist das Produkt der Amplituden der infinitesimalen Zeitintervalle

$$(\mathbf{x}_n; \tau_n | \mathbf{x}_{n-1}; \tau_{n-1}) = \langle \mathbf{x}_n | e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \quad (3.15)$$

mit dem Hamilton-Operator, der als Summe der kinetischen und potentiellen Energie geschrieben werden kann:

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}) = \hat{T}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}). \quad (3.16)$$



Für genügend kleine Zeitintervalle faktorisiert der infinitesimale Zeitentwicklungsoperator gemäß der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel [21]:

$$e^{-\epsilon(\hat{T}+\hat{V})/\hbar} = e^{-\epsilon\hat{T}/\hbar}e^{-\epsilon\hat{V}/\hbar}\mathcal{O}\left(e^{\epsilon^2}\right). \quad (3.17)$$

Bei Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung in  $\epsilon$  kann die infinitesimale Zeitentwicklungsamplitude (3.15) durch

$$\langle \mathbf{x}_n | e^{-\epsilon\hat{H}(\tau_n)/\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \approx \int d^D x \langle \mathbf{x}_n | e^{-\epsilon\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})/\hbar} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | e^{-\epsilon\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})/\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \quad (3.18)$$

genähert werden. Der erste Erwartungswert im Integranden von (3.18) berechnet sich zu

$$\langle \mathbf{x}_n | e^{-\epsilon\hat{V}(\hat{\mathbf{x}})/\hbar} | \mathbf{x} \rangle = \delta(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}) e^{-\epsilon V(\mathbf{x}_n)/\hbar}. \quad (3.19)$$

Der zweite Erwartungswert im Integranden von (3.18) lässt sich unter Ausnutzung der Vollständigkeitsrelation

$$\int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} | \mathbf{p}_n \rangle \langle \mathbf{p}_n | = \mathbf{1} \quad (3.20)$$

und der Ortsdarstellung der Impulseigenzustände

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = (2\pi\hbar)^{-D} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar}, \quad (3.21)$$

und unter Verwendung der Orthonormalitätsrelation

$$\langle \mathbf{p}_n | \mathbf{p}_m \rangle = \delta_{n,m} \quad (3.22)$$

auf die Form

$$\langle \mathbf{x} | e^{-\epsilon\hat{T}(\hat{\mathbf{p}})/\hbar} | \mathbf{x}_{n-1} \rangle = \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} e^{i\mathbf{p}_n(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{n-1})/\hbar} e^{-\epsilon T(\mathbf{p}_n)/\hbar} \quad (3.23)$$

bringen. Die infinitesimale Zeitentwicklungsamplitude (3.15) lautet damit

$$(\mathbf{x}_n; \tau_n | \mathbf{x}_{n-1}; \tau_{n-1}) \approx \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left\{ i\mathbf{p}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})/\hbar - \epsilon T(\mathbf{p}_n)/\hbar - \epsilon V(\mathbf{x}_n)/\hbar \right\}. \quad (3.24)$$

Eingesetzt in (3.14) folgt daraus für die Imaginärzeitamplitude

$$(\mathbf{x}_a; \tau_a | \mathbf{x}_b; \tau_b) \approx \prod_{n=1}^N \left[ \int d^D x_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \right] \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_e^N \right) \quad (3.25)$$

mit der diskreten Euklidischen Wirkung

$$\mathcal{A}_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} \epsilon \left\{ -i\mathbf{p}_n \frac{(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})}{\epsilon} + T(\mathbf{p}_n) + V(\mathbf{x}_n) \right\}. \quad (3.26)$$

Die Approximation in Gleichung (3.17) und daher auch in (3.25) wird im Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$  exakt. Dies gilt jedoch nur, solange im Potential  $V(\mathbf{x})$  keine Singularitäten vom Typ  $V(x) \propto -1/|x|$  auftreten. In diesem Fall entspricht der Differenzenquotient in (3.26) der Ortsableitung:  $\dot{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1})/\epsilon$  und die Summe  $\mathcal{A}_e^N$  konvergiert gegen das Integral

$$\mathcal{A}_e[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{A}_e^N = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau [-i\mathbf{p}(\tau)\dot{\mathbf{x}}(\tau) + H(\mathbf{p}(\tau), \mathbf{x}(\tau))]. \quad (3.27)$$

In diesem Ausdruck können  $\mathbf{p}(\tau), \mathbf{x}(\tau)$  als Pfade im Phasenraum aufgefasst werden, die entlang der imaginären Zeitachse  $\tau$  laufen. Der Ausdruck  $\mathcal{A}_e$  wird dabei quantenstatistische Wirkung bzw. Euklidische Wirkung genannt. Der Grenzwert  $N \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0$  des Produktes von Integralen (3.25) wird Pfadintegral genannt und durch die Schreibweise

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \int_{\mathbf{x}(\tau_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(\tau_b)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}'^D x \int \mathcal{D}^D p e^{-\mathcal{A}_e[\mathbf{p}, \mathbf{x}]/\hbar} \quad (3.28)$$

dargestellt. Dabei ist das Integrationsmaß definiert durch

$$\int_{\mathbf{x}(\tau_a)=\mathbf{x}_a}^{\mathbf{x}(\tau_b)=\mathbf{x}_b} \mathcal{D}'^D x \int \mathcal{D}^D p = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int d^D x_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \right]. \quad (3.29)$$

Diese Definition enthält ein  $p_n$ -Integral mehr als  $x_n$ -Integrale: Während  $\mathbf{x}_0$  und  $\mathbf{x}_{N+1}$  festgehalten werden und die  $x_n$ -Integrale für  $n = 1, \dots, N$  ausgeführt werden, gehört zu jedem Paar  $(x_n, x_{n-1})$  ein  $p_n$ -Integral für  $n = 1, \dots, N+1$ . Dieser Sachverhalt wird durch den Strich beim Integrationsmaß  $\mathcal{D}'^D x$  verdeutlicht. Die Pfadintegraldarstellung für die Zustandssumme ergibt sich aus (3.28) gemäß (3.11) durch eine weitere Integration im Ortsraum sowie Einsetzen von  $\tau_a = 0$  und  $\tau_b = \hbar\beta$  und durch die Wahl von periodischen Randbedingungen  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_a = \mathbf{x}$ :

$$Z_1(\beta) = \int d^D x \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\hbar\beta)=\mathbf{x}} \mathcal{D}'^D x \int \mathcal{D}^D p e^{-\mathcal{A}_e[\mathbf{p}, \mathbf{x}]/\hbar}. \quad (3.30)$$

Dabei verschwindet auch die Asymmetrie in der Anzahl der  $p_n$ - und  $x_n$ -Integrale, da nun beide Integrale für  $n = 1, \dots, N+1$  ausgeführt werden.

Eine Pfadintegraldarstellung im Konfigurationsraum erhält man durch Ausführen der Impulsintegrale in (3.28). Dies ist möglich, da die kinetische Energie in (3.26) gewöhnlich die Form

$$T(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} \quad (3.31)$$

hat, so dass die zeitdiskrete Wirkung die Form

$$\mathcal{A}_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ -i\mathbf{p}_n(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}) + \epsilon \frac{\mathbf{p}_n^2}{2M} + \epsilon V(\mathbf{x}_n) \right\} \quad (3.32)$$

annimmt. Sie kann quadratisch ergänzt werden

$$\mathcal{A}_e^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{\epsilon}{2M} \left( \mathbf{p}_n - iM \frac{\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 + \frac{M}{2} \epsilon \left( \frac{\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 + \epsilon V(\mathbf{x}_n) \right\}, \quad (3.33)$$

und die Impulsintegrale in (3.28) können nun mit Hilfe des Gaußintegrals ausgeführt werden:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \frac{\epsilon}{2M} \left( \mathbf{p}_n - iM \frac{\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 \right\} = \frac{1}{(2\pi\hbar\epsilon/M)^{D/2}}. \quad (3.34)$$

Daher kann die Imaginärzeitamplitude als

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) \approx \frac{1}{(2\pi\hbar\epsilon/M)^{D/2}} \prod_{n=1}^N \left[ \frac{d^D x_n}{(2\pi\hbar\epsilon/M)^{D/2}} \right] \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}^N \right) \quad (3.35)$$

geschrieben werden, in der  $\mathcal{A}_\epsilon^N$  nun durch die Summe

$$\mathcal{A}_\epsilon^N = \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2} \left( \frac{\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 + V(\mathbf{x}_n) \right] \quad (3.36)$$

dargestellt wird. Im Kontinuumlimes konvergiert die Summe (3.36) gegen die Euklidische Version der Lagrange-Wirkung

$$\mathcal{A}_\epsilon[\mathbf{x}] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \left[ \frac{M}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + V(\mathbf{x}) \right]. \quad (3.37)$$

Für die Imaginärzeitamplitude erhält man im Kontinuumlimes ein Pfadintegral, das über alle Pfade im Konfigurationsraum summiert, gewichtet mit einem Phasenfaktor, der die Lagrange-Wirkung  $\mathcal{A}_\epsilon[\mathbf{x}]$  enthält:

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}^D x e^{-\mathcal{A}_\epsilon[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (3.38)$$

Das Pfadintegralmaß im Konfigurationsraum lautet dabei:

$$\int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}^D x = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar\epsilon/M)^{D/2}} \prod_{n=1}^N \int \frac{d^D x_n}{(2\pi\hbar\epsilon/M)^{D/2}}. \quad (3.39)$$

Hier wurde dieselbe Bezeichnung  $\mathcal{D}^D x$  für das Integrationsmaß wie in (3.29) benutzt, da aus dem Zusammenhang immer eindeutig ist, um welches Maß es sich handelt. Die Zustandssumme ergibt sich aus (3.38) gemäß (3.11) durch eine weitere Integration im Ortsraum sowie durch Einsetzen von  $\tau_a = 0$  und  $\tau_b = \hbar\beta$  und von periodischen Randbedingungen  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_a = \mathbf{x}$ :

$$Z_1(\beta) = \int d^D x \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}}^{\mathbf{x}(\hbar\beta)=\mathbf{x}} \mathcal{D}^D x e^{-\mathcal{A}_\epsilon[\mathbf{x}]/\hbar} = \oint \mathcal{D}^D x e^{-\mathcal{A}_\epsilon[\mathbf{x}]/\hbar}. \quad (3.40)$$

Das Pfadintegral  $\oint \mathcal{D}^D x$  betont die Periodizität der Pfade und steht als Abkürzung für

$$\oint \mathcal{D}^D x = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \int \frac{d^D x_n}{(2\pi\hbar\epsilon/M)^{D/2}}. \quad (3.41)$$

Zwei wichtige Eigenschaften der Imaginärzeitamplitude, auf die im Folgenden wiederholt zurückgegriffen wird, sind die Invarianz bezüglich zeitlicher Translation

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b + \tau | \mathbf{x}_a; \tau_a + \tau) = (\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a), \quad (3.42)$$

welche direkt aus der Definition (3.9) ersichtlich ist, und die Gruppeneigenschaft

$$(\mathbf{x}_c; \tau_c | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \int d^D x_b (\mathbf{x}_c \tau_c | \mathbf{x}_b \tau_b) (\mathbf{x}_b \tau_b | \mathbf{x}_a \tau_a), \quad (3.43)$$

welche aus der Vollständigkeitsrelation der Ortseigenfunktionen  $|\mathbf{x}\rangle$  folgt

$$\langle \mathbf{x}_c | e^{-(\tau_c - \tau_a)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_b \rangle = \int d^D x_b \langle \mathbf{x}_c | e^{-(\tau_c - \tau_b)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_b \rangle \langle \mathbf{x}_b | e^{-(\tau_b - \tau_a)\hat{H}/\hbar} | \mathbf{x}_a \rangle. \quad (3.44)$$

Die Spektraldarstellung des Imaginärzeitpropagators lautet

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_b) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_a) e^{-E_{\mathbf{k}}(\tau_b - \tau_a)/\hbar}. \quad (3.45)$$

Dabei wurden die Energieeigenzustände  $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  des Hamilton-Operators  $\hat{H}$  verwendet

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (3.46)$$

### 3.1.2 Teilchendichte

Wenn lokale Eigenschaften von Interesse sind, so betrachtet man die durch  $Z_1(\beta)^{-1}$  normierte Imaginärzeitamplitude (3.9) ausgewertet bei gleichen Anfangs- und Endorten  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_a = \mathbf{x}$  sowie  $\tau_a = 0$  und  $\tau_b = \hbar\beta$ :

$$\rho(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_1(\beta)}(\mathbf{x}; \hbar\beta | \mathbf{x}; 0). \quad (3.47)$$

Wegen (3.11) ist das Ortsintegral über  $\rho(\mathbf{x})$  normiert:

$$\int d^D x \rho(\mathbf{x}) = 1. \quad (3.48)$$

Unter Verwendung der Energieeigenzustände  $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  aus (3.46) erhält man die Spektralzerlegung von  $\rho(\mathbf{x})$

$$\rho(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2 e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}}{\sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}}. \quad (3.49)$$

Hier wurden die Vollständigkeitsrelation der Energieeigenzustände

$$\sum_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \psi_{\mathbf{k}}| = \mathbf{1} \quad (3.50)$$

und die Beziehung

$$\langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (3.51)$$

verwendet. Da  $|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Systems im Eigenzustand  $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  ist und das Verhältnis  $e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}/\sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}$  die normierte Wahrscheinlichkeit darstellt, das System im Eigenzustand  $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  zu finden, repräsentiert die Größe  $\rho(\mathbf{x})$  die normierte durchschnittliche Teilchendichte im Ortsraum als Funktion der Temperatur.

### 3.1.3 Imaginärzeitamplitude für $N$ Teilchen

Realistische physikalische Systeme enthalten für gewöhnlich Gruppen identischer Teilchen, d.h. Teilchen, deren innere Eigenschaften, wie z.B. Masse, Spin und Ladung, exakt übereinstimmen. In der klassischen Mechanik stellt diese Situation kein Problem dar, da jedes Teilchen sich längs einer wohldefinierten Bahnkurve bewegt, so dass man die Teilchen gegebenenfalls auch durchnummerieren könnte. In der Quantenmechanik sind die Teilchen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit über einen Bereich im Phasenraum verschmiert und müssen als ununterscheidbar behandelt werden.

Im folgenden Abschnitt wenden wir uns der Frage zu, wie die statistischen Eigenschaften eines Vielteilchensystems im Pfadintegralformalismus beschrieben werden können. Betrachtet man für einen Moment  $N$  unterscheidbare Teilchen ohne Wechselwirkung und nummeriert ihre Bahnkurven mit  $\mathbf{x}^{(n)}(\tau)$  mit  $n = 1, 2, 3, \dots, N$ , so erhält man ihre Zeitentwicklungsamplitude als Verallgemeinerung von (3.38) auf  $N$  Teilchen:

$$(\mathbf{x}_b^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_b^{(N)}; \tau_b | \mathbf{x}_a^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_a^{(N)}; \tau_a) = \prod_{n=1}^N \left[ \int_{x^{(n)}(\tau_a)=x_a}^{x^{(n)}(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}^D x^{(n)} \right] e^{-\mathcal{A}_e^{(N)}/\hbar} \quad (3.52)$$

mit der Wirkung

$$\mathcal{A}_e^{(N)} = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \sum_{n=1}^N \left[ \frac{M \dot{\mathbf{x}}^{(n)2}}{2} - V(\mathbf{x}^{(n)}) \right], \quad (3.53)$$

wobei  $V(\mathbf{x}^{(n)})$  ein beliebiges Hintergrundpotential ist.

Wenn das Ergebnis (3.52) auf ununterscheidbare spinlose Teilchen erweitert werden soll, dann muss einfach zu der Summe aller Pfade  $\mathbf{x}^{(n)}(\tau)$ , welche zu den Endpositionen  $\mathbf{x}_b^{(n)}(\tau)$  laufen, die Summe über alle Pfade, welche zu den permutierten Endpositionen  $\mathbf{x}_b^{(P(n))}(\tau)$  laufen, hinzuaddiert werden. Für Bosonen lautet daher die symmetrisierte Zeitentwicklungsamplitude

$$(\mathbf{x}_b^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_b^{(N)}; \tau_b | \mathbf{x}_a^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_a^{(N)}; \tau_a)^B = \frac{1}{N!} \sum_P (\mathbf{x}_b^{(P(1))}, \dots, \mathbf{x}_b^{(P(N))}; \tau_b | \mathbf{x}_a^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_a^{(N)}; \tau_a), \quad (3.54)$$

wo bei  $P(n)$  die möglichen  $N!$  Permutationen der Indizes  $n$  bezeichnet. Da sich die  $N$ -Teilchen-Wirkung (3.53) rein additiv aus den Wirkungen für einzelne Teilchen zusammensetzt, kann jeder Term in der Summe (3.54) als Produkt aus  $N$  Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplituden geschrieben werden:

$$(\mathbf{x}_b^{(P(1))}, \dots, \mathbf{x}_b^{(P(N))}; \tau_b | \mathbf{x}_a^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_a^{(N)}; \tau_a) = (\mathbf{x}_b^{(P(1))}; \tau_b | \mathbf{x}_a^{(1)}; \tau_a) \dots (\mathbf{x}_b^{(P(N))}; \tau_b | \mathbf{x}_a^{(N)}; \tau_a). \quad (3.55)$$

Die  $N$ -Teilchen-Zustandssumme ergibt sich aus (3.54) durch Integration über alle Teilchenorte, wobei  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_a = \mathbf{x}$  und  $\tau_b = \hbar\beta$ ,  $\tau_a = 0$  gesetzt wird:

$$Z_N^B(\beta) = \int d^D x^{(1)} d^D x^{(2)} \dots d^D x^{(N)} (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}; 0)^B. \quad (3.56)$$

## 3.2 Ein-Teilchen-Dichtematrix im $N$ -Teilchen-Ensemble

Die Ein-Teilchen-Dichtematrix kann in einem  $N$ -Teilchen-Ensemble als die unvollständige Spur der Imaginärzeitamplitude über  $N - 1$  Teilchenorte definiert werden, welche durch die Zustandssumme (3.56) normiert und für  $\tau_b = \hbar\beta$ ,  $\tau_a = 0$  ausgewertet ist:

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \int d^D x^{(2)} \dots d^D x^{(N)} (\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}; 0)^B. \quad (3.57)$$

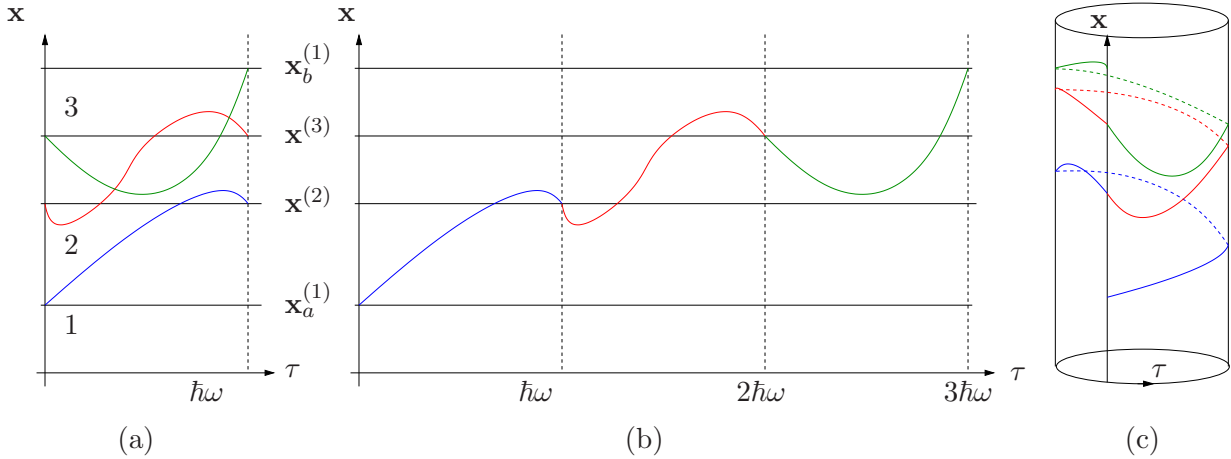
Mit der Definition (3.54) und der Faktorisierungseigenschaft (3.55) erhält man zunächst

$$\rho_N^B(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \frac{1}{N! Z_N^B(\beta)} \int d^D x^{(2)} \dots d^D x^{(N)} \sum_P (\mathbf{x}_b^{(P(1))}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \dots (\mathbf{x}^{(P(N))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(N)}; 0). \quad (3.58)$$

Das Produkt der Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplituden in (3.58) verbindet die Endposition eines Pfades mit der Anfangsposition eines anderen Pfades wie in der Abbildung 3.1 anhand eines Pfadverlaufs von 3 Teilchen veranschaulicht wird.

Das erste Teilchen startet zur Zeit  $\tau = 0$  am Ort  $\mathbf{x}_a^{(1)}$  und landet zur Zeit  $\tau = \hbar\beta$  an dem Startpunkt eines zweiten Teilchens  $\mathbf{x}^{(2)}$ . Das zweite Teilchen wiederum landet nach der Zeit  $\hbar\beta$  am Startpunkt des dritten Teilchens  $\mathbf{x}^{(3)}$ . Das dritte Teilchen landet nach der Zeit  $\hbar\beta$  am Punkt  $\mathbf{x}_b^{(1)}$ . Da die Teilchen ununterscheidbar sind, verliert ihre Nummerierung eine Bedeutung. Die Ausgangssituation stellt eine Anordnung dreier Teilchen an den Orten  $\mathbf{x}_a^{(1)}$ ,  $\mathbf{x}^{(2)}$  und  $\mathbf{x}^{(3)}$  und die Endsituation eine Anordnung dreier Teilchen an den Orten  $\mathbf{x}_b^{(1)}$ ,  $\mathbf{x}^{(2)}$  und  $\mathbf{x}^{(3)}$  dar. Dies ist in Abbildung 3.1(a) dargestellt. Ein solcher Pfad wird durch die Zwei-Punkt-Funktion

$$h_3(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \int d^D x^{(2)} d^D x^{(3)} (\mathbf{x}_b^{(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(2)}; 0) (\mathbf{x}^{(2)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(3)}; 0) (\mathbf{x}^{(3)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \quad (3.59)$$



**Abbildung 3.1:** Beispielhafter Pfadverlauf von drei Teilchen a) in gebräuchlicher Darstellung innerhalb einer Periode, b) in periodisch fortgesetzter Darstellung und c) aufgewickelt auf einem Feynman-Zylinder mit Kreisumfang  $\hbar\beta$ .

beschrieben. Sie kann mit Hilfe der Translationseigenschaft (3.42) und Gruppeneigenschaft (3.43) weiter vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} h_3(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) &= \int d^D x^{(2)} d^D x^{(3)} (\mathbf{x}_b^{(1)}; 3\hbar\beta | \mathbf{x}^{(2)}; 2\hbar\beta)(\mathbf{x}^{(2)}; 2\hbar\beta | \mathbf{x}^{(3)}; \hbar\beta)(\mathbf{x}^{(3)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \\ &= (\mathbf{x}_b^{(1)}; 3\hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0). \end{aligned} \quad (3.60)$$

Dies entspricht dem mittleren Bild 3.1(b)), das einen periodisch fortgesetzten Pfad der Länge  $3\hbar\beta$  zeigt. In Abbildung 3.1(c) ist der Verlauf des Pfades auf dem Feynmanschen Imaginärzeit-Zylinder mit dem Umfang  $\hbar\beta$  gezeigt. Eine Zwei-Punkt-Funktion der Länge 3 windet sich gerade 3 mal um diesen Zylinder. Allgemein führen wir für den Beitrag einer Zwei-Punkt-Funktion der Länge  $n$  die folgende Bezeichnung ein:

$$\begin{aligned} h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) &= \int d^D x^{(2)} \dots d^D x^{(n)} (\mathbf{x}_b^{(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(n)}; 0)(\mathbf{x}^{(n)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(n-1)}; 0) \dots (\mathbf{x}^{(2)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \\ &= (\mathbf{x}_b^{(1)}; n\hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Des Weiteren kann man feststellen, dass eine Integration über die Zwei-Punkt-Funktion mit  $\mathbf{x}_b = \mathbf{x}_a$  auf die Ein-Teilchen Zustandssumme (3.11) führt, welche in der  $n$ -fachen Imaginärzeit wirkt:

$$Z_1(n\beta) = \int d^D x^{(1)} h_n(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta). \quad (3.62)$$

Der Ausdruck (3.62) wird auch als  $n$ -facher Zyklus bezeichnet. Im Folgenden besteht das Ziel darin, eine Rekursionsbeziehung für die Dichtematrix (3.58) zu finden. Dazu stellen wir die Dichtematrix als Summe dar, wobei die Summanden den Beitrag  $B$  von Zwei-Punkt-Funktionen (3.61) verschiedener Länge zusammenfassen, die das erste Teilchen enthalten:

$$\rho_N(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \sum_{n=1}^N B \left[ h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \right]. \quad (3.63)$$

Es gibt nur eine Zwei-Punkt-Funktion der Länge eins, nämlich wenn das Teilchen eins am Ort  $\mathbf{x}_a^{(1)}$  nach einer Zeit  $\hbar\beta$  zum Ort  $\mathbf{x}_b^{(1)}$  gelangt. Die verbleibende Integration über die Orte der

Teilchen  $2, \dots, N$  zusammen mit der Normierung  $1/(N-1)!$ , welche im Normierungsfaktor von (3.58) enthalten ist, ergibt gerade die Zustandssumme von  $N-1$  Teilchen:

$$\begin{aligned} B \left[ h_1(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \right] &= \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} (\mathbf{x}_b^{(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \\ &\times \frac{1}{(N-1)!} \int d^3 x^{(2)} \dots d^3 x^{(N)} \sum_P (\mathbf{x}^{(P(2))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(2)}; 0) \dots (\mathbf{x}^{(P(N))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(N)}; 0) \\ &= \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} h_1(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) Z_{N-1}^B(\beta). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Eine Zwei-Punkt-Funktion der Länge 2 ergibt sich, wenn das erste Teilchen am Ort  $\mathbf{x}_a^{(1)}$  nach einer Zeit  $\hbar\beta$  zum Ort  $\mathbf{x}^{(n)}$  gelangt, während das Teilchen  $n$  vom Ort  $\mathbf{x}^{(n)}$  zum Ort  $\mathbf{x}_b^{(1)}$  gelangt. Es gibt insgesamt  $N-1$  solcher Funktionen für  $n = 2, \dots, N$ . Die verbleibenden Integrationen über die Orte der Teilchen  $2, \dots, n-1, n+1, N$  zusammen mit der Normierung  $1/(N-2)!$ , welche im Normierungsfaktor von (3.58) enthalten ist, ergibt gerade die Zustandssumme von  $N-2$  Teilchen:

$$\begin{aligned} B \left[ h_2(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \right] &= \frac{N-1}{N(N-1) Z_N^B(\beta)} \int d^3 x^{(n)} (\mathbf{x}_b^{(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(n)}; 0) (\mathbf{x}^{(n)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \times \\ &\frac{1}{(N-2)!} \int d^3 x^{(2)} \dots d^3 x^{(n-1)} d^3 x^{(n+1)} \dots d^3 x^{(N)} \sum_P (\mathbf{x}^{(P(2))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(2)}; 0) \dots (\mathbf{x}^{(P(N))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(N)}; 0) \\ &= \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} h_2(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) Z_{N-2}^B(\beta). \end{aligned} \quad (3.65)$$

Allgemein gilt, dass bei einer Zwei-Punkt-Funktion der Länge  $n$  ebensoviele Teilchen involviert sind. Das Teilchen 1 kann dabei in der Zeit  $\hbar\beta$  zu  $N-1$  möglichen Orten  $\mathbf{x}^{(n_1)}$  gelangen. Das Teilchen 2 hat anschließend  $N-2$  mögliche Orte  $\mathbf{x}^{(n_2)}$  zur Auswahl und das Teilchen  $n$  hat noch  $N-n$  mögliche Orte  $\mathbf{x}^{(n_n)}$  zur Auswahl. Insgesamt gibt es daher  $(N-1)(N-2) \dots (N-n+1)$  verschiedene Zwei-Punkt-Funktionen der Länge  $n$  nach Integration über die dabei involvierten Teilchenorte  $\mathbf{x}^{(n_i)}$  mit  $i = 2, \dots, n$ . Es verbleibt noch die Zustandssumme von  $N-n$  Teilchen:

$$\begin{aligned} B \left[ h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \right] &= \\ &\frac{(N-1)(N-2) \dots (N-n+1)}{N! Z_N^B(\beta)} \int d^3 x^{(n_1)} \dots d^3 x^{(n_n)} (\mathbf{x}_b^{(1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(n_n)}; 0) \dots (\mathbf{x}^{(n_1)}; \hbar\beta | \mathbf{x}_a^{(1)}; 0) \times \\ &\int d^3 x^{(n_{n+1})} \dots d^3 x^{(n_N)} \sum_P (\mathbf{x}^{(P(n_{n+1}))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(n_{n+2})}; 0) \dots (\mathbf{x}^{(P(n_N))}; \hbar\beta | \mathbf{x}^{(n_N)}; 0) \\ &= \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) Z_{N-n}^B(\beta). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Die Teilchendichte, die sich als Summe der Beiträge von Zwei-Punkt-Funktionen verschiedener Länge ergibt, kann damit in Form einer Rekursion geschrieben werden:

$$\rho_N(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} \sum_{n=1}^N h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.67)$$

Aus der Normierungsbedingung für die lokale Dichte

$$\int d^3 x^{(1)} \rho_N(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) = 1 \quad (3.68)$$

erhält man mit der Beziehung (3.62) die Rekursionsrelation für die Zustandssumme

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Z_1(n, \beta) Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.69)$$

Der Rekursionsanfang ist dabei durch die Zustandssumme für das Vakuum gegeben:

$$Z_0^B(\beta) = 1. \quad (3.70)$$

Die Rekursionsformel (3.69) stimmt mit dem Ergebnis in [21], das auf einem anderen Weg über die Zykluszerlegung hergeleitet wurde, überein. Obwohl diese Rekursion bereits 1961 von Landsberg in seinem Lehrbuch zur Thermodynamik [30] benutzt wurde, geriet sie eine Zeit lang in Vergessenheit und wurde erst in den 80ern zuerst von Sato für Fermionen [31] und dann von Borrmann und Franke für Bosonen [32] wiederentdeckt.

### Numerische Auswertung der Rekursion

Bei der numerischen Auswertung der Rekursionsbeziehung (3.67) ergeben sich Probleme, die eine alternative Formulierung der Rekursion erforderlich machen [24]. Zum einen nimmt die Zustandssumme aufgrund der nichtverschwindenden Rolle des Grundzustands für niedrige Temperaturen ( $\beta \rightarrow \infty$ ) extrem kleine Werte an. Diese potenzieren sich in der Rekursion, so dass numerisch nicht mehr berechenbare Ausdrücke entstehen. Aus diesem Grund geht man zur reduzierten Zustandssumme und Zwei-Punkt-Funktion über, bei denen der Beitrag der Grundzustandsenergie absepariert wurde:

$$h_n(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a, \beta) = e^{-n\beta E_0} \tilde{h}_n(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a; \beta), \quad (3.71)$$

$$Z_N^B(\beta) = e^{-N\beta E_0} \tilde{Z}_N^B(\beta), \quad (3.72)$$

$$Z_1^B(n, \beta) = e^{-n\beta E_0} \tilde{Z}_1^B(n, \beta). \quad (3.73)$$

Ein weiteres Problem tritt bei der numerischen Umsetzung der Rekursion (3.67) im Hochtemperaturbereich auf, wo kurze Zyklen wahrscheinlicher sind als lange. Da in einer  $N$ -Teilchen-Zustandssumme alle möglichen Zykluslängen gemischt auftauchen, werden Zahlen unterschiedlicher Größenordnung aufaddiert, wodurch Rechenfehler entstehen. Eine Lösung dieses Problems wurde von Brosens et. al. in [33] vorgeschlagen. Da der Beitrag jedes zusätzlichen Teilchens mit dem Beitrag aller anderen bereits vorhandenen Teilchen multipliziert wird, kann ein Produktansatz gemacht werden:

$$\tilde{Z}_N^B(\beta) = \prod_{k=1}^N \eta_k. \quad (3.74)$$

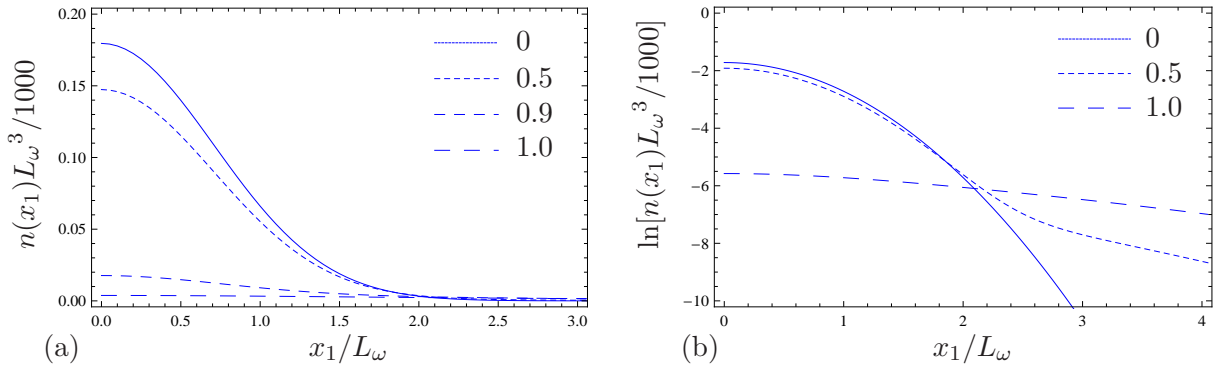
Eingesetzt in Gleichung (3.69), führt dieser Ansatz zu einer Rekursionsformel für die Faktoren  $\eta_k$ :

$$\eta_k(\beta) = \frac{1}{k} \left\{ \tilde{Z}_1(\beta) + \sum_{m=2}^k \tilde{Z}_1(m, \beta) \prod_{n=1}^{m-1} \frac{1}{\eta_{k-n}(\beta)} \right\}. \quad (3.75)$$

Diese Faktoren  $\eta_k(\beta)$  sind alle größer als eins und fallen in etwa exponentiell mit dem Parameter  $k$  ab. Setzt man nun den Ansatz (3.74) in die Dichtematrix-Rekursion (3.67) ein und berücksichtigt (3.71) und (3.72) so erhält man die Bestimmungsgleichung:

$$\rho_N(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \tilde{h}_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \prod_{k=1}^n \frac{1}{\eta_{N-k+1}}. \quad (3.76)$$





**Abbildung 3.2:** Kanonische Dichten für 1000 Teilchen ausgewertet für  $x_2 = x_3 = 0$  für die Temperaturen  $T/T_C^0 = 0, 0.5, 0.9, 1.0$  bzw.  $T/T_C^0 = 0, 0.5, 1.0$  (siehe Legende) in normaler und in logarithmischer Darstellung.

Wir interessieren uns im Folgenden für die lokale Dichte, welche durch

$$n(x) = N\rho(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) \quad (3.77)$$

gegeben ist und die Teilchenverteilung in Abhängigkeit vom Ort und von der Temperatur wiedergibt. Der Normierungsfaktor  $N$  ist eingeführt worden, um die kanonischen Resultate mit den früheren großkanonischen Rechnungen vergleichen zu können. Für den isotropen harmonischen Oszillator ist dabei  $\tilde{h}_n$  nach (3.71) und (C.47) ausgewertet bei gleichen Endpunkten:

$$\tilde{h}_n(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) = \left(\frac{M\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{(1 - e^{2n\hbar\beta\omega})^{3/2}} \exp\left\{-\frac{M\omega\mathbf{x}^{(1)2}}{\hbar} \tanh\left(\frac{n\hbar\beta\omega}{2}\right)\right\}. \quad (3.78)$$

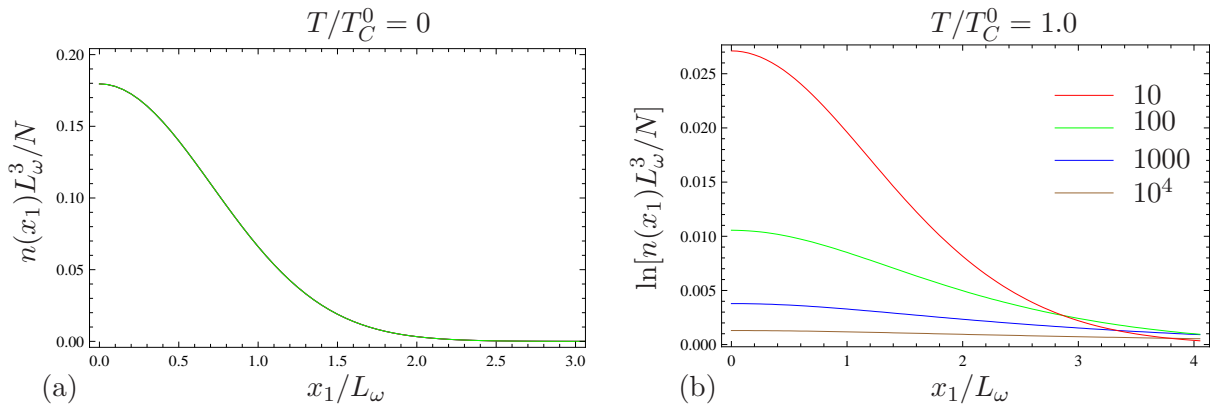
Der Rekursionsanfang für  $\eta_k(\beta)$  ist nach (3.75) durch

$$\eta_1(\beta) = \tilde{Z}_1(\beta) \quad (3.79)$$

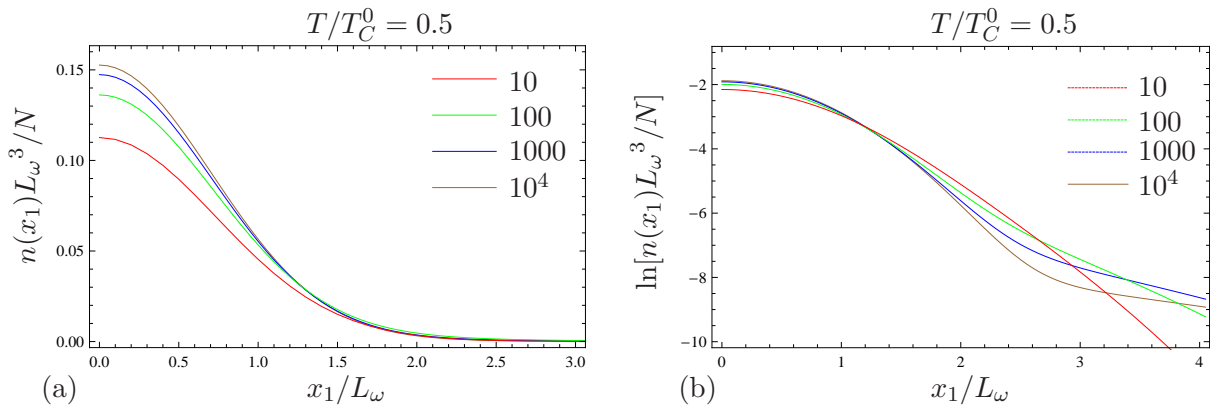
gegeben, wobei sich der Zyklusbeitrag  $\tilde{Z}_1(n\beta)$  für die isotrope harmonische Falle durch Integration von (3.78) ergibt

$$\tilde{Z}_1(n\beta) = \frac{1}{(1 - e^{-n\hbar\beta\omega})^3}. \quad (3.80)$$

Damit können die Dichten für verschiedene Teilchenzahlen und Temperaturen berechnet werden. (Das zugehörige C-Programm ist in Anhang D zu finden.) In Abbildung 3.2(a) ist die Dichte von 1000 Teilchen in Abhängigkeit vom Teilchenort, welcher durch die Fallenbreite  $L_\omega$  gemäß (2.43) normiert ist, für verschiedene reduzierte Temperaturen dargestellt. Dabei ist die reduzierte Temperatur durch  $T/T_C^0$  mit der kritischen Temperatur  $T_C^0$  aus (2.51) aus dem großkanonischen Formalismus gegeben. Zu erkennen ist, dass die Dichte im Zentrum der Falle umso größer wird, je tiefer die Temperatur ist. Eine genauere Analyse kann aus der logarithmischen Auftragung in 3.2(b) erfolgen. Dort wird ein qualitativer Unterschied der Dichteverläufe bei verschiedenen Temperaturen sichtbar. Die durchgezogene Linie entspricht dem Verlauf bei Temperatur  $T/T_C^0 = 0$ , bei der alle Teilchen im Kondensat sind. Die langgestrichelte Kurve entspricht dem Verlauf bei Temperatur  $T/T_C^0 = 1$ , so dass man annehmen kann, dass fast alle Teilchen thermisch angeregt sind. Bei der Temperatur  $T/T_C^0 = 0.5$  ist der Kurvenverlauf im Zentrum der Falle durch die Kondensatteilchentkurve und in den Randbereichen durch die thermische Kurve bestimmt. Diese Feststellung wird bei experimentellen Realisierungen von BEC ausgenutzt, wo ein Anwachsen



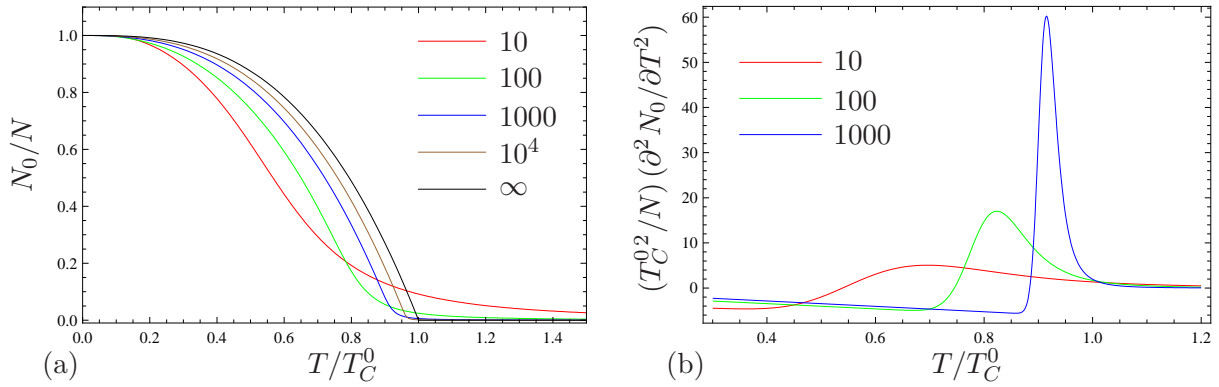
**Abbildung 3.3:** Kanonische Dichten für verschiedene Teilchenzahlen (siehe Legende) ausgewertet für  $x_2 = x_3 = 0$  bei Temperatur a)  $T/T_C^0 = 0$  (alle Kurven liegen aufeinander) und b)  $T/T_C^0 = 1.0$ .



**Abbildung 3.4:** Kanonische Dichten für verschiedene Teilchenzahlen (siehe Legende) ausgewertet für  $x_2 = x_3 = 0$  bei Temperatur  $T/T_C^0 = 0.5$  a) in normaler und b) in logarithmischer Darstellung.

der Dichte im Zentrum der Falle als ein Zeichen für die Ausbildung des Kondensats gedeutet wird.

Abbildung 3.3(a) zeigt den teilchenzahlabhängigen Dichteverlauf für  $T/T_C^0 = 0$ : Alle Teilchen befinden sich im Grundzustand, so dass die Kurven aufgrund der Normierung  $1/N$  bei beliebiger Teilchenzahl gleich sind. Abbildung 3.3(b) zeigt den teilchenzahlabhängigen Dichteverlauf für  $T/T_C^0 = 1$ : Die Dichten sind im Zentrum der Falle umso größer, je kleiner die Teilchenzahl ist. Schließlich zeigt die Abbildung 3.4(a) den teilchenzahlabhängigen Dichteverlauf bei Temperatur  $T/T_C^0 = 0.5$ : Die Dichten sind im Zentrum umso größer, je größer die Teilchenzahl ist (im Gegensatz zur Temperatur  $T/T_C^0 = 1$ ). Eine genauere Untersuchung ist wieder mit logarithmischer Darstellung in Abbildung 3.4(b) möglich. Man sieht, dass sich bei größer werdenden Teilchenzahlen immer deutlicher ein Knick ausbildet, d. h. dass bei größerer Teilchenzahl die kondensierte Komponente immer prägender wird. Bei 10 Teilchen ist der Knick dagegen kaum zu sehen, was bedeutet, dass es keinen großen Unterschied zwischen der thermischen und der kondensierten Komponente gibt.



**Abbildung 3.5:** (a) Kondensatteilchenanteil in Ensembles mit verschiedenen Teilchenanzahlen. Zum Vergleich ist auch das Ergebnis (2.53) aus der großkanonischen Rechnung im thermodynamischen Limes abgebildet (schwarze Linie). (b) Die zweite Ableitung des Kondensatteilchenanteiles, deren Maximum als quasi-kritische Temperatur gedeutet wird.

### 3.3 Kondensatteilchenanteil

Ausgehend von der Rekursionsrelation (3.67) kann die Anzahl der Teilchen im Grundzustand berechnet werden. Dazu benutzt man zunächst die Spektraldarstellung der lokalen Zwei-Punkt-Funktion

$$h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_b^{(1)}) e^{-n\beta E_{\mathbf{k}}} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_a^{(1)}), \quad (3.81)$$

welche in den Grundzustandsanteil und den Rest zerlegt wird

$$h_n(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = h_n^0(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) + h_n^R(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \quad (3.82)$$

mit dem Grundzustandsanteil

$$h_n^0(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \psi_{\mathbf{0}}(\mathbf{x}_b^{(1)}) e^{-n\beta E_{\mathbf{0}}} \psi_{\mathbf{0}}^*(\mathbf{x}_a^{(1)}) \quad (3.83)$$

und dem Restanteil angeregter Zustände

$$h_n^R(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_b^{(1)}) e^{-n\beta E_{\mathbf{k}}} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}_a^{(1)}). \quad (3.84)$$

Setzt man (3.82) in die Rekursionsformel (3.67) ein, dann kann man die Dichtematrix als Summe zweier Komponenten, die des Kondensats und die des Rests, schreiben:

$$\begin{aligned} \rho_N(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) &= \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} \sum_{n=1}^N \left[ h_n^0(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) + h_n^R(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) \right] Z_{N-n}^B(\beta) \\ &= \rho_N^0(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta) + \rho_N^R(\mathbf{x}_b^{(1)}, \mathbf{x}_a^{(1)}; \beta). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Für das Kondensat erhält man auf diese Weise eine einfach auszuwertende Rekursionsformel:

$$\rho_N^0(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) = \frac{1}{N Z_N^B(\beta)} \sum_{n=1}^N h_n^0(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.86)$$

Da die Dichte (3.85) normiert ist

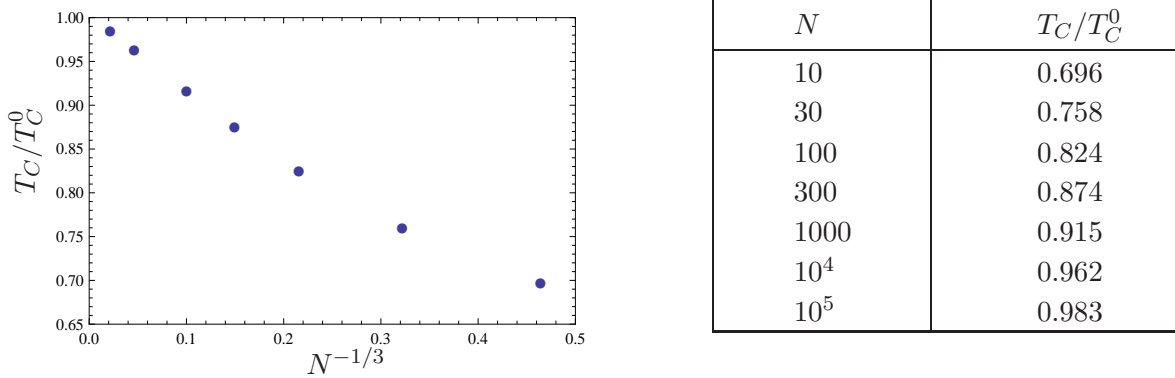


Abbildung 3.6: Teilchenzahlabhängige kritische Temperatur.

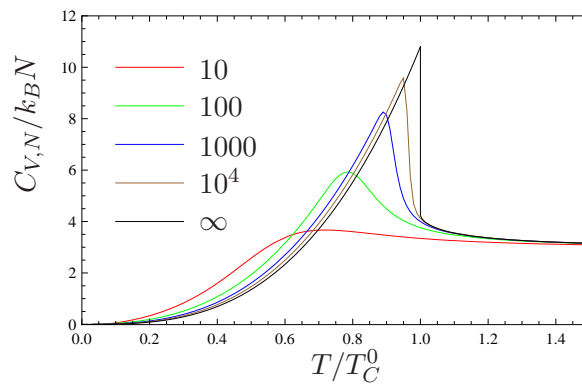


Abbildung 3.7: Wärmekapazität in Ensembles mit verschiedenen Teilchenanzahlen. Zum Vergleich sind auch die Resultate (2.69) und (2.66) aus der großkanonischen Rechnung im thermodynamischen Limes abgebildet (schwarze Linie).

$$\int d^D x^{(1)} \rho_N^0(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) + \rho_N^R(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}; \beta) = \frac{N_0}{N} + \frac{N_R}{N} = 1, \quad (3.87)$$

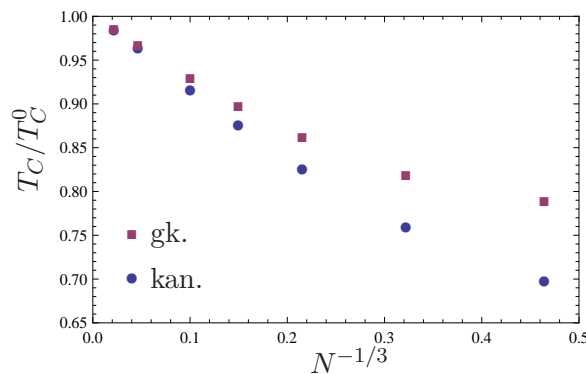
kann man durch Integration von (3.86) auf die Teilchenzahl im Grundzustand schließen

$$N_0 = \frac{1}{Z_N^B(\beta)} \sum_{n=1}^N e^{-n\beta E_0} Z_{N-n}^B(\beta). \quad (3.88)$$

Das Ergebnis für den Fall der isotropen harmonischen Falle ist in der Abbildung 3.5(a) dargestellt. Zum Vergleich ist auch das Ergebnis (2.53) aus der großkanonischen Rechnung im thermodynamischen Limes abgebildet. Die Kurven sind glatt und nähern sich für größere Teilchenzahlen immer mehr dem großkanonischen Resultat im thermodynamischen Limes. Wie bei den exakten großkanonischen Rechnungen im Abschnitt (2.2.6) wird die Temperatur, die der größten Krümmung entspricht, als quasi-kritische Temperatur interpretiert. Die Krümmung der Kondensatkurven ist in Abbildung 3.5(b) dargestellt. Die daraus abgeleitete kritischen Temperatur als Funktion von  $N^{-1/3}$  ist in Abbildung 3.6(a) zu sehen.

### 3.4 Wärmekapazität

Eine weitere interessante Größe ist die Wärmekapazität  $C_{V,N}$ , welche die Stärke der Energiefluktuationen im vorliegenden System anzeigt. Sie ist definiert als die Änderung der inneren Energie



**Abbildung 3.8:** Vergleich der kanonischen (kan.) und großkanonischen (gk.) kritischen Temperatur.

bei einer Erwärmung für konstantes Volumen  $V$  und Teilchenzahl  $N$  und lässt sich mit Hilfe der Entropie schreiben als

$$C_{V,N} = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{V,N}. \quad (3.89)$$

Im kanonischen Ensemble kann  $C_{V,N}$  mit den Beziehungen (3.4) und (3.3) einfach berechnet werden:

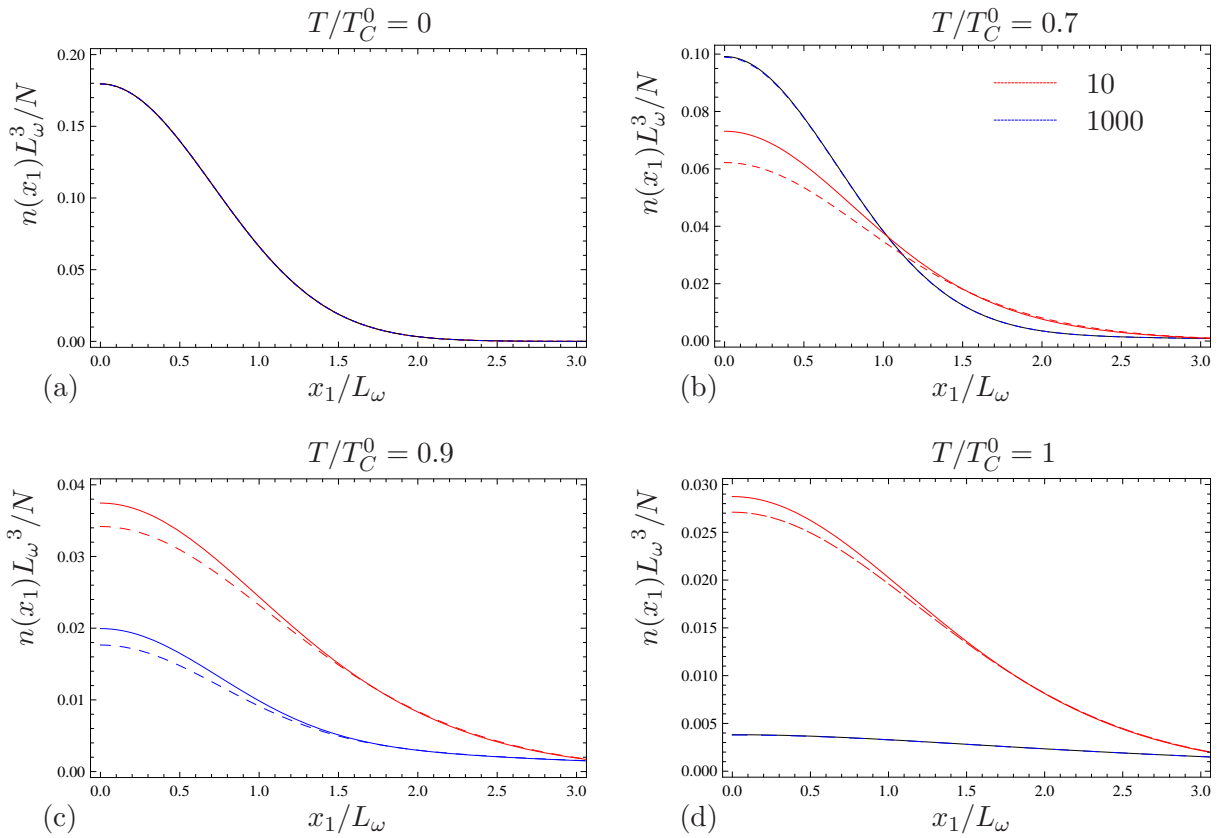
$$C_{V,N} = k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \{T \ln Z_N(T)\}. \quad (3.90)$$

Mit der Rekursionsbeziehung für die Zustandssumme ist man so in der Lage, die Wärmekapazitäten für verschiedene Teilchenzahlen zu erhalten.

Das Resultat für verschiedene Teilchenzahlen ist in Abbildung 3.7 graphisch dargestellt. Man erkennt, dass die Kurven stetig sind und mit steigender Teilchenzahl gegen die Resultate (2.69) und (2.66) im thermodynamischen Limes konvergieren, der durch die schwarze Kurve dargestellt ist. Der Finite-Size-Effekt äußert sich hier in der Verschiebung der Maxima zu kleineren Temperaturen für kleinere Teilchenzahlen. Die Maxima der Wärmekapazität werden dabei für kleinere Teilchenzahlen immer kleiner und sind immer weniger ausgeprägt.

### 3.5 Vergleich zwischen kanonischen und großkanonischen Ergebnissen

Interessant ist auch der Vergleich zwischen kanonischen und großkanonischen Ergebnissen, der im Folgenden für die kritische Temperatur und für die Dichten vorgenommen wird. Die kritische Temperatur ist in Abbildung 3.8 wiedergegeben. Es kann festgestellt werden, dass deutliche Unterschiede für Teilchenzahlen kleiner als 1000 ( $N^{-1/3} = 0.1$ ) auftreten. Die großkanonischen Werte sind größer als die kanonischen, wobei dieser Unterschied umso größer ausfällt, je kleiner die Teilchenzahlen sind. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass es sich im großkanonischen Ensemble bei der Teilchenzahl um einen Mittelwert aus verschiedenen großen Ensembles handelt und die reduzierte kritische Temperatur nicht konstant von der Teilchenzahl ist. Dabei fällt die Reduktion der kritischen Temperatur bei kleinen Teilchenzahlen etwas stärker ins Gewicht. Dieser Unterschied in der kritischen Temperatur wirkt sich auch auf die Dichten aus, wie aus der Abbildung 3.9 zu entnehmen ist. Während bei der Temperatur  $T/T_C^0 = 0$  die kanonischen und großkanonischen Ergebnisse sowohl für 10 als auch für 1000 Teilchen übereinstimmen, gibt es für  $T/T_C^0 > 0$  insbesondere für 10 Teilchen Unterschiede. Dabei sind die größten Unterschiede in der



**Abbildung 3.9:** Vergleich der kanonischen (gestrichelte Linie) und großkanonischen (durchgezogene) Dichten für  $N = 10$  (rot) und  $N = 1000$  (blau) Teilchen ausgewertet für  $x_1 = x_2 = 0$  bei einer festgelegten Temperatur entsprechend der Bildbeschriftung.

Nähe der kritischen Temperaturen zu finden, die für 10 Teilchen bei  $T/T_C^0 = 0.70$  im kanonischen und bei  $T/T_C^0 = 0.78$  im großkanonischen Ensemble und für 1000 Teilchen bei  $T/T_C^0 = 0.92$  im kanonischen und  $T/T_C^0 = 0.93$  im großkanonischen Ensemble liegen. Dadurch setzt die Kondensation im großkanonischen Ensemble schon ein, während die kanonischen Dichten noch durch den thermischen Anteil bestimmt sind. Für Teilchenzahlen größer als 1000 werden die Dichteunterschiede auch in der Nähe der kritischen Temperatur zunehmend geringer, so dass in der Tat gefolgert werden kann, dass im thermodynamischen Limes die Ergebnisse für die Dichte und für die kritische Temperatur im großkanonischen und im kanonischen Ensemble übereinstimmen.

# Kapitel 4

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde die Bose-Einstein-Kondensation nichtwechselwirkender Bose-Gase in einer harmonischen Falle für endliche Teilchenzahlen untersucht. Dabei wurden sowohl globale thermodynamische Eigenschaften als auch die Teilchendichte betrachtet.

Im Anschluß an eine Einführung in das moderne Forschungsgebiet ultrakalter Quantengase befasst sich Kapitel 2 mit der Berechnung thermodynamischer Größen im großkanonischen Ensemble. Es wurden die Größen Kondensatteilchenanteil, kritische Temperatur, Wärmekapazität und Dichte zum einen im Rahmen der semiklassischen Näherung untersucht und zum anderen exakt numerisch berechnet. Dabei waren wir insbesondere an der Berechnung von Finite-Size-Korrekturen interessiert, welche die semiklassischen Ergebnisse im thermodynamischen Limes [15–17] modifizieren, um die endliche Teilchenzahl bei der experimentellen Realisierung eines BEC zu berücksichtigen. Während in den Referenzen [18,34] Finite-Size-Korrekturen nur bis zur ersten Ordnung berechnet werden konnten, da der nächst höhere Term aufgrund der dort vorkommenden polylogarithmischen Funktion  $\zeta_1(z)$  divergiert, berechneten wir Finite-Size-Korrekturen für die isotrope und anisotrope harmonische Falle bis zur dritten Ordnung. Dabei folgten wir im Wesentlichen der Euler-MacLaurin-Methode in Referenz [19]. Im isotropen Fall stellten wir fest, dass unser Ergebnis (2.85) mit der Gleichung (2.13) in [19] übereinstimmt; das anisotrope Ergebnis (2.18) in [19] ist jedoch fehlerhaft. Der korrekte Ausdruck für die Teilchenzahl in einer anisotropen Falle ist in Gleichung (2.109) wiedergegeben. Die Teilchenzahlgleichungen (2.85) und (2.109) für die isotrope und anisotrope Falle dienten als Ausgangspunkt, um die kritische Temperatur zu berechnen. Der Vergleich der kritischen Temperaturen im isotropen und anisotropen Fall zeigt, dass Anisotropie das Einsetzen der Kondensation unterdrückt (siehe Abbildung 2.4). Bei der Berechnung der kritischen Temperatur kam ein Manko der verwendeten Euler-MacLaurin-Methode zu Tage, welches darin besteht, dass in drei Dimensionen der Term zweiter Ordnung für die kritische Temperatur nicht vollständig ist, wenn die  $\hbar\beta\omega$ -Entwicklung der Teilchenzahlgleichung (2.85) abgebrochen wird. Dieses Manko kann durch die Resummationsmethode [21,25] behoben werden. Vergleicht man die Ergebnisse der Euler-MacLaurin- und der Resummationsmethode (2.86) und (2.151), so ist zu sehen, dass sich die analytischen Ausdrücke in der zweiten Ordnung unterscheiden, wobei im Resummationsergebnis die charakteristische Euler-Mascheroni-Konstante auftaucht. Numerisch sind die beiden Werte jedoch fast identisch. Um die Qualität der semiklassischen Ergebnisse zu beurteilen, wurden diese mit numerischen Daten aus exakten Rechnungen verglichen. Dabei konnte man feststellen, dass die Korrekturen erster und zweiter Ordnung das semiklassische Ergebnis zunehmend verbessern, die Korrektur der dritten Ordnung jedoch so klein ist, dass sie keine sichtbare Verbesserung bringt (siehe Abbildung 2.9(a)). Während bei der untersuchten dreidimensionalen Falle die berechneten Finite-Size-Korrekturen zweiter und dritter Ordnung zu klein sind, um gemessen zu werden, wird die untersuchte Fragestellung bei niedrigeren Dimensionen wichtig, da sich dort die beschriebene

Konvergenzproblematik in die 1. Ordnung (im 2-D Fall) und sogar in den thermodynamischen Limes (für 1-D Fall) verschiebt [25].

Des Weiteren wurde die semiklassische Korrektur der Teilchendichte bis zur ersten Ordnung berechnet mit dem Ergebnis (2.221). Diese stellt eine erhebliche Annäherung der semiklassischen Teilchendichte an die exakten Ergebnisse dar (siehe Abbildung 2.13). Die Integration der Teilchendichte führt wieder auf die Teilchenzahlgleichung (2.85). Wie oben besprochen, sind wir auch hier mit dem Konvergenzproblem im Term zweiter Ordnung konfrontiert. Eine Anwendung des Resummationsansatzes auf die Teilchendichte steht noch aus.

In Kapitel 3 wurden die Rechnungen im kanonischen Ensemble durchgeführt. Ausgehend von der Feynmanschen Pfadintegral-Darstellung [21,29] wurde zunächst eine Rekursionsformel für die Einteilchen-Dichtematrix (3.67) gefunden. Aus der Normierungsbedingung für die Dichtematrix konnte auch eine Rekursionsbeziehung für die Zustandssumme abgeleitet werden, welche mit dem Ergebnis in [30–32] übereinstimmt. Die Rekursionsformel für die Dichtematrix wurde mit Hilfe des Ansatzes in [33] in eine für numerische Berechnungen günstigere Form (3.76) gebracht. Die damit berechneten Dichten für verschiedene Temperaturen und Teilchenzahlen sind in den Abbildungen 3.2–3.3 dargestellt. Es ist zu sehen, dass sich die Teilchen mit sinkender Temperatur im Zentrum der Falle ansammeln. Weiterhin zeigt die logarithmische Darstellung, dass die Dichte aus zwei Komponenten besteht, die dem thermischen und dem kondensierten Anteil entsprechen. Dabei kann festgestellt werden, dass die Kondensatteilchendichte dominant wird, wenn die Temperatur klein genug ist. Durch Aufteilung der Einteilchen-Dichtematrix in einen Grundzustands- und einen thermisch angeregten Anteil und anschließende Integration wurde dann eine Rekursionsformel (3.88) für die Anzahl der Teilchen im Kondensat hergeleitet. Diese stimmt mit dem Resultat aus [35] überein, benötigte aber wesentlich weniger Aufwand zur Herleitung. Der Kondensatteilchenanteil, der in Abbildung 3.5(a) dargestellt ist, dient wieder als Ausgangspunkt zur Berechnung der quasikritischen Temperatur.

Abschließend wurden die kanonischen Ergebnisse für die kritische Temperatur und für die Dichte mit den großkanonischen Ergebnissen verglichen (siehe Abbildungen 3.8 und 3.9). Deutliche Unterschiede treten bei der kritischen Temperatur für Teilchenzahlen kleiner als 1000 auf. Die großkanonischen Werte sind größer als die kanonischen, wobei dieser Unterschied umso größer ausfällt, je kleiner die Teilchenzahlen sind. Dieser Umstand wirkt sich auch auf die Dichten aus: Bei einem Temperaturwert, bei dem im großkanonischen Ensemble die Kondensation bereits eingesetzt hat, wird die kanonische Dichte noch durch den thermischen Anteil bestimmt. Daher treten in der Nähe der kritischen Temperatur die größten Dichteunterschiede auf. Im thermodynamischen Limes aber stimmen die Ergebnisse für die Dichte und für die kritische Temperatur im großkanonischen und im kanonischen Ensemble überein.



# Anhang A

## Polylogarithmische Funktionen

Bei Berechnung von thermodynamischen Größen kommen Integrale der Form

$$\zeta_\nu(\hat{z}) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{\hat{z}^{-1}e^x - 1} \quad 0 \leq z \leq 1 \quad (\text{A.1})$$

mit  $x = \beta E$  und  $\hat{z} = e^{\beta\mu}$  vor, die polylogarithmische Funktionen bzw. Bose-Einstein-Funktionen genannt werden. Der Integrand kann für  $\hat{z}e^{-x} < 1$  entwickelt werden, was auf

$$\zeta_\nu(\hat{z}) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=1}^{\infty} \hat{z}^k \int_0^\infty dx x^{\nu-1} e^{-kx}. \quad (\text{A.2})$$

führt. Das letzte Integral kann auf die Gammafunktion  $\Gamma(\nu)$  zurückgeführt werden, so dass man die folgende Reihendarstellung für polylogarithmische Funktionen erhält:

$$\zeta_\nu(\hat{z}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\hat{z}^k}{k^\nu}, \quad (\text{A.3})$$

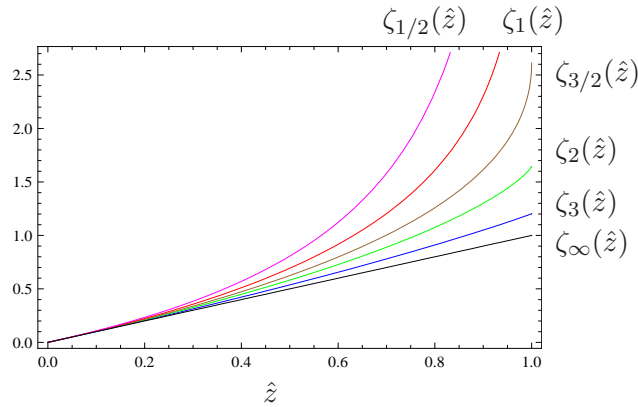
wobei aus physikalischen Gründen  $0 \leq \hat{z} \leq 1$ . Der Verlauf einiger Funktionen  $\zeta_\nu(\hat{z})$  ist in Abbildung A.1 dargestellt. Die polylogarithmischen Funktionen starten im Ursprung alle mit Steigung 1. Wenn  $\nu \leq 1$  ist, divergieren  $\zeta_\nu(\hat{z})$  für  $\hat{z} \rightarrow 1$ . Wenn  $\nu > 1$  ist, dann konvergieren sie für alle  $0 \leq \hat{z} \leq 1$ . Für  $\nu \rightarrow \infty$  ist  $\zeta_\nu(\hat{z}) \rightarrow \hat{z}$ . Weiterhin gilt für  $\hat{z} = 1$  und  $\nu > 1$  der folgende Zusammenhang mit der Riemannschen Zeta-Funktion:

$$\zeta_\nu(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\nu} = \zeta(\nu). \quad (\text{A.4})$$

### A.1 Modifizierte polylogarithmische Funktionen

Die Infrarotdivergenz von (A.1) für  $\nu \leq 1$  verschwindet, wenn die untere Integrationsgrenze nicht null, sondern ein Wert  $x_{\min}$  ist. Physikalisch kann dies so begründet werden, dass bei BEC der Grundzustand separat behandelt wird, so dass ab dem ersten angeregten Zustand abzüglich dem Grundzustand integriert werden muss. Dieser Ansatz wurde beispielsweise in Referenzen [19,36] verfolgt. Zur Unterscheidung von den ursprünglichen Funktionen mit der unteren Integrationsgrenze null (A.1) werden die Funktionen mit der unteren Integrationsgrenze  $x_{\min}$  im Folgenden mit  $\tilde{\zeta}_\nu(\hat{z})$  bezeichnet:

$$\tilde{\zeta}_\nu(\hat{z}) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{x_{\min}}^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{\hat{z}^{-1}e^x - 1}, \quad 0 \leq z \leq 1. \quad (\text{A.5})$$



**Abbildung A.1:** Die Funktionsverlauf von  $\zeta_\nu(\hat{z})$  im physikalisch relevanten Bereich  $0 \leq \hat{z} \leq 1$ . Der Funktionswert an der Stelle  $\hat{z} = 1$  beschreibt das Verhalten physikalischer Größen unterhalb der kritischen Temperatur (2.51).

Analog zur Gleichung (A.2) erhält man zunächst das Resultat:

$$\tilde{\zeta}_\nu(\hat{z}) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=1}^{\infty} \hat{z}^k \int_{x_{\min}}^{\infty} dx x^{\nu-1} e^{-kx}. \quad (\text{A.6})$$

Diese Gleichung wird nun so umgeformt, dass man die ursprüngliche Reihendarstellung (A.3) und einen weiteren Term erhält:

$$\begin{aligned} \tilde{\zeta}_\nu(\hat{z}) &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=1}^{\infty} \hat{z}^k \left[ \int_0^{\infty} dx x^{\nu-1} e^{-kx} - \int_0^{x_{\min}} dx x^{\nu-1} e^{-kx} \right] \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\hat{z}^k}{k^\nu} \left( 1 - \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^{kx_{\min}} dx x^{\nu-1} e^{-x} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Daraus ergeben sich durch Ausführung der Integration folgende Beziehungen zwischen modifizierten und ursprünglichen polylogarithmischen Funktionen:

$$\tilde{\zeta}_1(\hat{z}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\hat{z}^k}{k} e^{-kx_{\min}} = \zeta_1(\hat{z}e^{-x_{\min}}), \quad (\text{A.8})$$

$$\tilde{\zeta}_2(\hat{z}) = \zeta_2(\hat{z}e^{-x_{\min}}) + x_{\min} \zeta_1(\hat{z}e^{-x_{\min}}), \quad (\text{A.9})$$

$$\tilde{\zeta}_3(\hat{z}) = \zeta_3(\hat{z}e^{-x_{\min}}) + x_{\min} \zeta_2(\hat{z}e^{-x_{\min}}) + \frac{1}{2} x_{\min}^2 \zeta_1(\hat{z}e^{-x_{\min}}), \quad (\text{A.10})$$

$$\tilde{\zeta}_4(\hat{z}) = \zeta_4(\hat{z}e^{-x_{\min}}) + x_{\min} \zeta_3(\hat{z}e^{-x_{\min}}) + \frac{1}{2} x_{\min}^2 \zeta_2(\hat{z}e^{-x_{\min}}) + \frac{1}{6} x_{\min}^3 \zeta_1(\hat{z}e^{-x_{\min}}). \quad (\text{A.11})$$

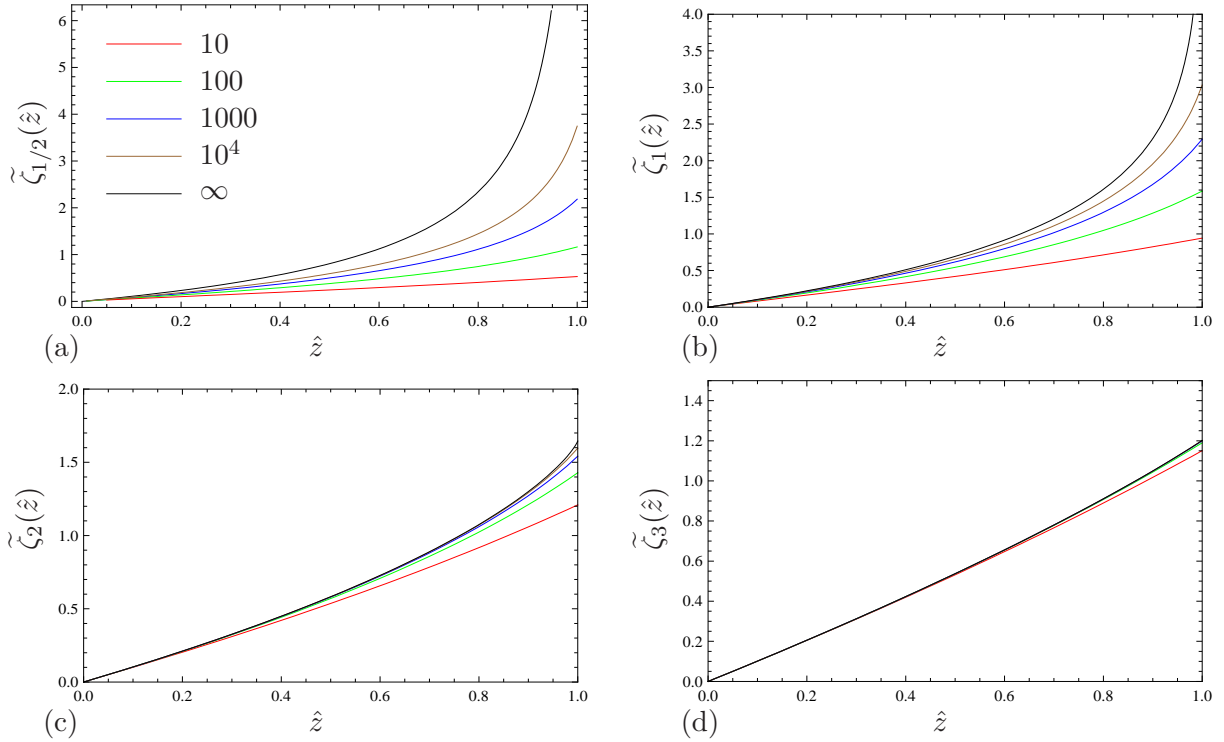
Man kann  $\tilde{\zeta}_\nu(\hat{z})$  auch direkt durch Auswertung des Integrals (A.5) bestimmen. Für  $n = 1$  erhält man z.B.

$$\tilde{\zeta}_1(\hat{z}) = -\ln[1 - e^{-x_{\min}} \hat{z}]. \quad (\text{A.12})$$

Dies stimmt mit dem Ergebnis (A.8) überein, wenn man den Logarithmus entwickelt.

Die modifizierten Funktionen (A.8)-(A.10) sowie die Funktion  $\tilde{\zeta}_{1/2}(\hat{z})$ , die numerisch aus der Definition (A.5) berechnet wurde, sind in Abbildung A.2 dargestellt. Die untere Grenze für den isotropen harmonischen Oszillator lautet

$$x_{\min} = \hbar\beta\omega = \left( \frac{\zeta_3(\hat{z})}{N} \right)^{1/3}, \quad (\text{A.13})$$



**Abbildung A.2:** Modifizierte polylogarithmische Funktionen. Schwarz ist  $\lim N \rightarrow \infty$  dargestellt, der gewöhnlichen polylogarithmischen Funktionen entspricht.

dabei wurde die Temperatur  $T$  durch Umformung der Gleichung (2.50) als Funktion von  $\hat{z}$  dargestellt. Im Limes  $N \rightarrow \infty$  geht  $x_{\min}$  gegen null, so dass die modifizierten polylogarithmischen Funktionen in die gewöhnlichen polylogarithmischen Funktionen (A.1) übergehen. In der Abbildung A.2 ist zu sehen, dass die modifizierten polylogarithmischen Funktionen für endliche Teilchenzahlen  $N$  für  $\nu \leq 1$  nicht mehr divergieren, sondern bei  $\hat{z} = 1$  einen endlichen Wert annehmen. Im Prinzip müsste aus Konsistenzgründen bei der Berechnung der unteren Grenze (A.13) auch die modifizierte Funktion  $\tilde{\zeta}_3(\hat{z})$  verwendet werden. Wie aus der Abbildung A.2(d) zu sehen ist, kann diese Funktion jedoch gut mit  $\zeta_3(\hat{z})$  genähert werden.

Die Ableitung von (A.7) nach  $\hat{z}$  berechnet sich mit Hilfe der partiellen Integration zu

$$\frac{\partial}{\partial \hat{z}} \tilde{\zeta}_\nu(\hat{z}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\hat{z}^{k-1}}{k^{\nu-1}} \left( 1 - \frac{1}{\Gamma(\nu-1)} \int_0^{kx_{\min}} dx x^{\nu-2} e^{-x} + \frac{1}{\Gamma(\nu)} (kx_{\min})^{\nu-1} e^{-kx_{\min}} \right), \quad (\text{A.14})$$

was zu folgender Rekursionsbeziehung für die modifizierten polylogarithmischen Funktionen führt

$$\tilde{\zeta}_{\nu-1}(\hat{z}) = \hat{z} \frac{\partial}{\partial \hat{z}} \tilde{\zeta}_\nu(\hat{z}) - \frac{x_{\min}^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=1}^{\infty} \hat{z}^k e^{-kx_{\min}}. \quad (\text{A.15})$$

Die polylogarithmischen Funktionen  $\tilde{\zeta}_\nu(\hat{z})$  aus Gleichungen (A.8–A.11) lassen sich tatsächlich mit Hilfe der Beziehung (A.15) ineinander überführen.

## A.2 Teilchenzahlberechnung

Die modifizierten polylogarithmischen Funktionen (A.8)-(A.11) bieten eine andere Möglichkeit, thermodynamische Größen wie z.B. die Teilchenzahl (2.86) zu berechnen. Dazu geht man von der freien Energie (2.39) aus, die sich für den isotropen Fall wegen (2.72) vereinfacht als

$$F_G = \frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega k} \right) \quad (\text{A.16})$$

schreiben lässt. Nach Separation des Grundzustandes

$$F_G = \frac{1}{\beta} \ln(1 - \hat{z}) + \frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{\infty} \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega k} \right) \quad (\text{A.17})$$

nutzt man wieder Euler Maclaurin und erhält

$$F_G = \frac{1}{\beta} \ln(1 - \hat{z}) + \frac{1}{\beta} \left\{ \int_1^{\infty} dk \left( \frac{k^2}{2} + \frac{3k}{2} + 1 \right) \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega k} \right) + \frac{3}{2} \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega} \right) - \frac{1}{12} \left[ 3\beta \hbar \omega \frac{\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}} + \frac{5}{2} \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega k} \right) \right] + \dots \right\}. \quad (\text{A.18})$$

Partielle Integration des ersten Terms führt dann zu

$$F_G = \frac{1}{\beta} \ln(1 - \hat{z}) + \frac{1}{\beta} \left\{ \int_1^{\infty} dk \left( \frac{k^3}{6} + \frac{3k^2}{4} + k \right) \frac{\beta \hbar \omega \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega k}}{1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega k}} + \frac{5}{8} \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega} \right) + \frac{1}{4} \beta \hbar \omega \frac{\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}} + \dots \right\}. \quad (\text{A.19})$$

Das Integral kann nach Substitution  $x = \beta \hbar \omega k$  mit Hilfe der polylogarithmischen Funktionen  $\tilde{\zeta}_\nu(\hat{z})$  gemäß (A.5) auf die Form

$$F_G = \frac{1}{\beta} \ln(1 - \hat{z}) + \frac{1}{\beta(\beta \hbar \omega)^3} \left\{ \tilde{\zeta}_4(\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}) + \frac{3}{2} \beta \hbar \omega \tilde{\zeta}_3(\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}) + (\beta \hbar \omega)^2 \tilde{\zeta}_2(\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}) + \frac{5}{8} (\beta \hbar \omega)^3 \ln \left( 1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega} \right) + \frac{1}{4} (\beta \hbar \omega)^4 \frac{\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}} + \dots \right\} \quad (\text{A.20})$$

gebracht werden. Die Teilchenzahl ergibt sich daraus als die negative Ableitung nach  $\mu$ . Bei Berücksichtigung der Ableitungsregel (A.15) lautet sie

$$N = N_0 + \frac{1}{(\beta \hbar \omega)^3} \left\{ \tilde{\zeta}_3(\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}) + \frac{3}{2} \beta \hbar \omega \tilde{\zeta}_2(\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}) + (\beta \hbar \omega)^2 \tilde{\zeta}_1(\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}) + \frac{31}{24} (\beta \hbar \omega)^3 \frac{\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}} + \frac{1}{4} (\beta \hbar \omega)^4 \frac{\hat{z} e^{-\beta \hbar \omega}}{(1 - \hat{z} e^{-\beta \hbar \omega})^2} + \dots \right\}. \quad (\text{A.21})$$

Dieses Ergebnis stimmt mit dem Resultat aus [19] überein und kann mit Hilfe von Gleichungen (A.8)-(A.11) sowie den Identitäten

$$\zeta_0(\hat{z}) = \frac{\hat{z}}{1 - \hat{z}} \quad (\text{A.22})$$

und

$$\zeta_{-1}(\hat{z}) = \frac{\hat{z}}{(1 - \hat{z})^2} \quad (\text{A.23})$$

auf die gewöhnlichen polylogarithmischen Funktionen gebracht werden. Das Resultat ist dann übereinstimmend mit dem Ergebnis (2.85).



## Anhang B

# Robinson-Entwicklung

Eine wichtige Rolle bei der Diskussion der Bose-Einstein-Kondensation spielen polylogarithmische Funktionen der Form

$$\zeta_\nu(e^{-b}) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\nu} e^{-kb}. \quad (\text{B.1})$$

Dabei ist man insbesondere an ihrer Entwicklung nach dem Kleinheitsparameter  $b$  interessiert. Es stellt sich heraus, dass die naive Entwicklung der Exponentialfunktion und die Vertauschung der beiden Reihen kein zufriedenstellendes Ergebnis liefert:

$$\zeta_\nu(e^{-b}) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{k^m}{k^n} \frac{(-b)^m}{m!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-b)^m}{m!} \zeta(\nu - m). \quad (\text{B.2})$$

Man erhält nämlich durch diese Vorgehensweise eine Reihe mit der Riemannschen Zeta-Funktion, welche für den Fall  $\nu \geq 1$  immer den singulären Term  $\zeta(1)$  enthält.

Die Reihenentwicklung wird daher im Folgenden mit Hilfe analytischer Regularisierung durchgeführt, welche in der Referenz [21, Kap. 2] vorgestellt ist. Die Reihe wird mit einem Integral genähert und die sich dadurch ergebende Differenz wird zur ursprünglichen Reihe dazuaddiert:

$$\zeta_\nu(e^{-b}) = \int_0^\infty dk \frac{1}{k^\nu} e^{-kb} + \left( \sum_{k=1}^{\infty} - \int_0^\infty dk \right) \frac{1}{k^\nu} e^{-kb}. \quad (\text{B.3})$$

Für  $\nu \leq 1$  kann das Integral berechnet werden:

$$I = \int_0^\infty \frac{dk}{k} k^{-\nu+1} e^{-kb} = \Gamma(1 - \nu) b^{\nu-1}, \quad (\text{B.4})$$

wobei man sich des Schwinger-Tricks bedient:

$$a^{-\epsilon} = \frac{1}{\Gamma(\epsilon)} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} \tau^\epsilon e^{-\tau a}. \quad (\text{B.5})$$

Für  $\nu > 1$  wird das Ergebnis mittels analytischer Fortsetzung definiert. Der zweite Summand in (B.3) wird nach Potenzen von  $b$  entwickelt und ergibt zunächst

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left( \sum_{k=1}^{\infty} - \int_0^\infty dk \right) \frac{1}{k^{\nu-m}} \frac{(-b)^m}{m!}. \quad (\text{B.6})$$

Weiterhin verschwindet aufgrund der Veltman-Regel der Beitrag des Integrals [26]:

$$\int_0^\infty d\omega' (\omega')^\epsilon = 0 \quad \text{für alle } \epsilon, \quad (\text{B.7})$$

so dass man die folgende Beziehung erhält:

$$\zeta_\nu(e^{-b}) = \Gamma(1 - \nu)(b)^{\nu-1} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-b)^m}{m!} \zeta(\nu - m), \quad (\text{B.8})$$

die zuerst von Robinson hergeleitet wurde [37] und daher als Robinson-Entwicklung bezeichnet wird. Bei der konkreten Berechnung der Reihenentwicklung für  $\nu \geq 1$  erhält man nun ein konvergentes Ergebnis, da sich die Singularitäten der Gamma-Funktion und desjenigen Summanden in der Reihe, welcher die  $\zeta(1)$ -Funktion liefert, aufheben. So erhält man für  $\nu = 1$

$$\zeta_1(e^{-b}) = \lim_{\nu \rightarrow 1} \Gamma(1 - \nu)b^{\nu-1} + \lim_{\nu \rightarrow 1} \zeta(\nu) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-b)^m}{m!} \zeta(1 - m). \quad (\text{B.9})$$

Unter Ausnutzung der folgenden Taylorentwicklungen um den Punkt  $\nu = 1$

$$\Gamma(1 - \nu) = \frac{1}{1 - \nu} - \gamma + \mathcal{O}(\nu - 1), \quad (\text{B.10})$$

$$\zeta(\nu) = \frac{1}{\nu - 1} + \gamma + \mathcal{O}(\nu - 1) = -\Gamma(1 - \nu) + \mathcal{O}(\nu - 1), \quad (\text{B.11})$$

$$b^{\nu-1} = 1 + (\nu - 1) \ln(b), \quad (\text{B.12})$$

kann man die ersten beiden Summanden in (B.9) wie folgt zusammenfassen

$$\lim_{\nu \rightarrow 1} \Gamma(1 - \nu)b^{\nu-1} + \lim_{\nu \rightarrow 1} \zeta(\nu) = -\ln b. \quad (\text{B.13})$$

Dabei bezeichnet  $\gamma$  in (B.10) und (B.11) die Euler-Mascheroni Konstante (2.141). Als Endergebnis erhält man für (B.9) den folgenden Ausdruck

$$\zeta_1(e^{-b}) = -\ln b + \frac{b}{2} - \frac{b^2}{24} + 0 + \mathcal{O}(b^4). \quad (\text{B.14})$$

Analog liefert (B.8) für  $\nu = 2, 3, 4$  die folgenden  $b$ -Entwicklungen :

$$\zeta_2(e^{-b}) = \zeta(2) + b(\ln b - 1) - \frac{b^2}{4} + \frac{b^2}{72} + 0 + \mathcal{O}(b^4), \quad (\text{B.15})$$

$$\zeta_3(e^{-b}) = \zeta(3) - b\zeta(2) - \frac{b^2}{2} \left( \ln b - \frac{3}{2} \right) + \frac{b^3}{12} + \mathcal{O}(b^4), \quad (\text{B.16})$$

$$\zeta_4(e^{-b}) = \zeta(4) - b\zeta(3) + \frac{b^2}{2}\zeta(2) + \frac{b^3}{6} \left( \ln b - \frac{11}{6} \right) + \mathcal{O}(b^4). \quad (\text{B.17})$$

Für  $\nu \leq 0$  kann (B.8) sofort ausgewertet werden und liefert beispielsweise

$$\zeta_0(e^{-b}) = \frac{1}{b} - \frac{1}{2} + \frac{b}{12} - \frac{b^3}{720} + \mathcal{O}(b^4), \quad (\text{B.18})$$

$$\zeta_{-1}(e^{-b}) = \frac{1}{b^2} - \frac{1}{12} - \frac{b^2}{120} + \mathcal{O}(b^4). \quad (\text{B.19})$$



## Anhang C

# Exakte Lösung für den harmonischen Oszillator

In diesem Abschnitt soll die Zeitentwicklungsamplitude für den Fall des linearen harmonischen Oszillators explizit mit Hilfe des Pfadintegralformalismus berechnet werden, da wir wiederholt auf dieses Ergebnis zurückgreifen. Die verwendete Methode ist dabei dem Lehrbuch [21, Kap. 2] entnommen. Bei der folgenden Berechnung wird zunächst der eindimensionale Fall behandelt, der anschließend leicht auf  $D$  Dimensionen verallgemeinert werden kann.

Im Konfigurationsraum lautet das Pfadintegral gemäß (3.38)

$$(x_b; \tau_b | x_a; \tau_a) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x e^{-\mathcal{A}[x]/\hbar} \quad (\text{C.1})$$

mit der Langrange-Wirkung des harmonischen Oszillators

$$\mathcal{A}[x] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \omega^2 x^2). \quad (\text{C.2})$$

Der Pfad wird nun aufgespalten in den klassischen Pfad  $x_{\text{kl}}(\tau)$  und Fluktuationen  $y(\tau)$

$$x(\tau) = x_{\text{kl}}(\tau) + y(\tau). \quad (\text{C.3})$$

Da die Anfangs- und Endpunkte durch  $x_a$  und  $x_b$  festgelegt sind, verschwinden die Fluktuationen an diesen Punkten

$$y(\tau_a) = y(\tau_b) = 0. \quad (\text{C.4})$$

Damit zerfällt die Wirkung (C.2) in einen klassischen Teil

$$\mathcal{A}_{\text{kl}} = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \frac{M}{2} [\dot{x}_{\text{kl}}^2(\tau) + \omega^2 x_{\text{kl}}^2(\tau)] \quad (\text{C.5})$$

und einen Fluktuationsteil

$$\mathcal{A}_{\text{F}} = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \frac{M}{2} [\dot{y}(\tau)^2 + \omega^2 y(\tau)^2]. \quad (\text{C.6})$$

Die gemischten Terme, welche sich nach partieller Integration auf die Form

$$\mathcal{A}_{\text{Misch}} = M \dot{x}_{\text{kl}}(\tau) y(\tau) \Big|_{\tau_a}^{\tau_b} - 2 \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau M [\dot{x}_{\text{kl}}(\tau) - \omega^2 x_{\text{kl}}(\tau)] y(\tau) \quad (\text{C.7})$$

bringen lassen, verschwindet wegen (C.4) sowie der Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators, die in Imaginärzeit  $\tau = it$  die Form:

$$\ddot{x}_{\text{kl}}(\tau) = \omega^2 x_{\text{kl}}(\tau) \quad (\text{C.8})$$

hat. Die Zeitentwicklungsamplitude lässt sich daher ebenfalls in einen klassischen Anteil sowie einen Fluktuationsfaktor aufspalten:

$$(x_b; \tau_b | x_a; \tau_a) = e^{-\mathcal{A}_{\text{kl}}/\hbar} F(\tau_b - \tau_a). \quad (\text{C.9})$$

Der Fluktuationsfaktor ist dabei durch das Pfadintegral

$$F(\tau_b - \tau_a) = \int_{y(\tau_a)=0}^{y(\tau_b)=0} \mathcal{D}y e^{-\mathcal{A}_{\text{F}}/\hbar} \quad (\text{C.10})$$

gegeben mit der Wirkung  $\mathcal{A}_{\text{F}}$  aus (C.6).

Zur Berechnung der Zeitentwicklungsamplitude (C.9) muss zunächst die klassische Wirkung  $\mathcal{A}_{\text{kl}}$ , welche durch die Gleichung (C.5) gegeben ist, berechnet werden. Partielle Integration von (C.5) liefert zunächst

$$\mathcal{A}_{\text{kl}} = \int_{\tau_a}^{\tau_b} dt \frac{M}{2} [x_{\text{kl}}(\tau)(-\ddot{x}_{\text{kl}}(\tau) + \omega^2 x_{\text{kl}})] + \frac{M}{2} x_{\text{kl}}(\tau) \dot{x}_{\text{kl}} \Big|_{\tau_a}^{\tau_b}. \quad (\text{C.11})$$

Da der erste Term aufgrund der Bewegungsgleichung (C.8) verschwindet, erhält man unter Verwendung der Lösung der Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators

$$x_{\text{kl}} = \frac{x_b \sinh \omega(\tau - \tau_a) + x_a \sinh \omega(\tau_b - \tau)}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} \quad (\text{C.12})$$

das folgende Resultat für die klassische Wirkung

$$\mathcal{A}_{\text{kl}} = \frac{M\omega}{2 \sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cosh \omega(\tau_b - \tau_a) - 2x_b x_a]. \quad (\text{C.13})$$

Zur Berechnung des Fluktuationsfaktors betrachten wir die diskrete Form des Pfadintegrals (C.10) entsprechend (3.39):

$$F^N(\tau_b - \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_{\text{F}}^N \right\} \quad (\text{C.14})$$

mit der zeitdiskreten Wirkung

$$\mathcal{A}_{\text{F}}^N = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(y_n - y_{n-1})^2}{\epsilon} + \epsilon \omega^2 y_n^2 \right]. \quad (\text{C.15})$$

Dazu werden im Folgenden der diskretisierte Ableitungsoperator

$$\nabla y_n = \frac{1}{\epsilon} [y_{n+1} - y_n], \quad n = 0, 1, \dots, N \quad (\text{C.16})$$

und seine konjugierte Form  $\bar{\nabla}$

$$\bar{\nabla} y_n = \frac{1}{\epsilon} [y_n - y_{n-1}], \quad n = 1, 2, \dots, N+1 \quad (\text{C.17})$$

verwendet. Diese Operatoren sind zwei diskrete Versionen der Zeitableitung  $\partial_\tau$ , auf die sie sich im Kontinuumlimes  $\epsilon \rightarrow 0$  reduzieren:

$$\nabla, \bar{\nabla} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \partial_\tau. \quad (\text{C.18})$$

Eine nützliche Eigenschaft von Gitter- wie auch von gewöhnlichen Zeitableitungen ist, dass sie im Fourier-Raum diagonal sind. Für den Gitteroperator  $\nabla$  ergeben sich nach der folgenden Rechnung

$$\begin{aligned} \nabla y_n &= \frac{1}{\epsilon} [y(\tau_n + \epsilon) - y(\tau_n)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{\epsilon} \left( e^{-i\omega(\tau_n + \epsilon)} - e^{-i\omega\tau_n} \right) \tilde{y}(\omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau_n} \frac{1}{\epsilon} (e^{-i\omega\epsilon} - 1) \tilde{y}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

die Eigenwerte  $(e^{-i\omega\epsilon} - 1)/\epsilon$ . Im Kontinuumlimes  $\epsilon \rightarrow 0$  werden diese Eigenwerte zu Eigenwerten des gewöhnlichen Zeitableitungsoperators, d.h. zu  $-i$  mal der Frequenz der Fourier-Komponenten  $\omega$ . In Anlehnung daran werden die Eigenwerte der Gitterableitung im Folgenden mit  $\Omega$  bezeichnet:

$$\mathcal{F}(i\nabla y_n) = \Omega \tilde{y}(\omega) = \frac{i}{\epsilon} (e^{-i\omega\epsilon} - 1) \tilde{y}(\omega). \quad (\text{C.20})$$

Für die konjugierte Gitterableitung  $\bar{\nabla}$  erhält man analog die Eigenwerte

$$\mathcal{F}(i\bar{\nabla} y_n) = \bar{\Omega} \tilde{y}(\omega) = -\frac{i}{\epsilon} (e^{i\omega\epsilon} - 1) \tilde{y}(\omega). \quad (\text{C.21})$$

Wegen des Verschwindens von Fluktuationen zum Anfangszeitpunkt  $\tau = \tau_a$  kann die Fourierzerlegung von  $y_n$  auf die Sinusfunktionen begrenzt werden. Weiterhin kann die Summation auf  $N$  Glieder beschränkt werden, da die Funktion  $y(\tau)$  nur an den  $N + 1$  Stützpunkten angenähert werden muss. Damit lautet die Fourierzerlegung der Fluktuationen

$$y_n = \sum_{m=1}^N \sqrt{\frac{2}{(N+1)\epsilon}} \sin \omega_m (\tau_n - \tau_a) \tilde{y}(\omega_m). \quad (\text{C.22})$$

Dabei wird durch die Bedingung

$$\omega_m = \frac{\pi m}{\tau_b - \tau_a} = \frac{\pi m}{(N+1)\epsilon} \quad (\text{C.23})$$

das Verschwinden der Fluktuationen zur Zeit  $\tau_b$  erreicht. Diese Funktionen sind orthogonal [21]

$$\frac{2}{(N+1)\epsilon} \sum_{n=1}^N \sin \omega_m (\tau_n - \tau_a) \sin \omega_{m'} (\tau_n - \tau_a) = \delta_{mm'} \quad (\text{C.24})$$

und vollständig

$$\frac{2}{(N+1)\epsilon} \sum_{m=1}^N \sin \omega_m (\tau_n - \tau_a) \sin \omega_m (\tau_{n'} - \tau_a) = \delta_{nn'}. \quad (\text{C.25})$$

Mit Hilfe der Gitterableitung lässt sich die zeitdiskrete Wirkung (C.15) als

$$\mathcal{A}_F^N = \frac{M}{2} \epsilon \sum_{n=1}^{N+1} [(\bar{\nabla} y_n)^2 + \omega^2 y_n^2] \quad (\text{C.26})$$

schreiben. Da die Fluktuationen an den Enden entsprechend  $y_{N+1} = y(\tau_b) = 0$  und  $y_0 = y(\tau_a) = 0$  verschwinden, gilt außerdem die folgende Feststellung:

$$\sum_{n=1}^{N+1} (\bar{\nabla} y_n)^2 = - \sum_{n=1}^N y_n \nabla \bar{\nabla} y_n. \quad (\text{C.27})$$

Der Fluktuationsanteil (C.14) kann damit auf die Form

$$F^N(\tau_b - \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \frac{M}{2} \epsilon \sum_{n=1}^N y_n [-\nabla \bar{\nabla} + \omega^2] y_n \right\}. \quad (\text{C.28})$$

gebracht werden. Im Fourier-Raum wird der Fluktuationsoperator diagonal

$$\mathcal{F} \{ [-\nabla \bar{\nabla} + \omega^2] y_n \} = [\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2] \tilde{y}(\omega_m), \quad (\text{C.29})$$

wobei  $\Omega_m$  und  $\bar{\Omega}_m$  wieder die Eigenwerte nach Gleichung (C.20) bzw. (C.21) bezeichnen, jedoch mit diskreten  $\omega = \omega_m$ -Werten gemäß (C.23). Die Eigenwerte in (C.29) lauten explizit

$$\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2 = \frac{1}{\epsilon^2} [2 - 2 \cos(\omega_m \epsilon)] + \omega^2. \quad (\text{C.30})$$

Wir wechseln daher in den Fourier-Raum, wobei wir feststellen, dass die Jacobi-Matrix beim Wechsel von den lokalen Variablen  $y_n$  zu Fourierkomponenten  $\tilde{y}(\omega_m)$  gleich 1 ist, so dass

$$\prod_{n=1}^N dy_n = \prod_{m=1}^N d\tilde{y}(\omega_m) \quad (\text{C.31})$$

gilt. Der Exponent im Fluktuationsfaktor (C.28) zerfällt nun wegen der Orthogonalität (C.24) der Fourierkoeffizienten (C.22) in eine Summe unabhängiger quadratischer Terme, so dass der Fluktuationsfaktor als Produkt einfacher Gaußintegrale geschrieben werden kann

$$F_N(\tau_b - \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_n}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \right] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \frac{M}{2} \epsilon \sum_{m=1}^N (\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2) [y(\omega_m)]^2 \right\}, \quad (\text{C.32})$$

deren Auswertung den Ausdruck

$$F(\tau_b - \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\epsilon/M}} \prod_{m=1}^N \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2(\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2)}} \quad (\text{C.33})$$

liefert. Um das Produkt zu berechnen, wird es zunächst wie folgt umgeformt:

$$\prod_{m=1}^N \epsilon^2(\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2) = \prod_{m=1}^N [\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m] \prod_{m=1}^N \left[ \frac{\epsilon^2(\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2)}{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m} \right]. \quad (\text{C.34})$$

Zur Berechnung des ersten Produkts stellen wir zunächst fest, dass es als Determinante einer  $N \times N$ -Matrix  $-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}$  aufgefasst werden kann

$$\prod_{m=1}^N \epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m = \det_N (-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}). \quad (\text{C.35})$$

Angewendet auf den Vektor  $(y_1, y_2, \dots, y_N)^T$  wirkt der Operator  $-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}$  entsprechend den Gleichungen (C.16) und (C.17) als quadratische Matrix

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.36})$$

Die Determinante dieser Matrix kann durch Induktion bestimmt werden. Für  $N = 1$  sehen wir, dass

$$\det_{N=1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = |2| = 2 \quad (\text{C.37})$$

ist. Für  $N = 2$  ist die Determinante

$$\det_{N=2}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 3. \quad (\text{C.38})$$

Gilt die Induktionsannahme, dass

$$\det_{N-1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = N, \quad (\text{C.39})$$

so folgt für  $\det_N$  durch Entwicklung der Determinante nach der ersten Zeile und anschließende Entwicklung des zweiten Summanden nach der ersten Spalte

$$\det_N(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = 2 \det_{N-1}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) - \det_{N-2}(-\epsilon^2 \nabla \bar{\nabla}) = N + 1. \quad (\text{C.40})$$

Daher berechnet sich das erste Produkt in (C.34) zu

$$\prod_{m=1}^N \epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m = N + 1. \quad (\text{C.41})$$

Für jeden Faktor des zweiten Produkts in (C.34) kann der Limes  $\epsilon \rightarrow 0$  direkt berechnet werden:

$$\frac{\epsilon^2(\Omega_m \bar{\Omega}_m + \omega^2)}{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m} = 1 + \frac{\epsilon^2 \omega^2}{2 - 2 \cos(\omega_m \epsilon)} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 1 + \frac{\omega^2 (t_b - t_a)^2}{\pi^2 m^2}. \quad (\text{C.42})$$

Dabei wurde im ersten Schritt die Beziehung (C.30) verwendet und im zweiten Schritt die Bedingung (C.23) ausgenutzt. Unter Verwendung der Produktformel für die Sinusfunktion [38, (1.431.2)]

$$\sinh x = x \prod_{m=1}^{\infty} \left( 1 + \frac{x^2}{m^2 \pi^2} \right) \quad (\text{C.43})$$

und mit  $x = \omega(\tau_b - \tau_a)$  berechnet sich das zweite Produkt in (C.34) zu

$$\prod_{m=1}^N \frac{\epsilon^2(\Omega_m \bar{\Omega}_m - \omega^2)}{\epsilon^2 \Omega_m \bar{\Omega}_m} = \frac{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)}{\omega(\tau_b - \tau_a)}. \quad (\text{C.44})$$

Setzt man die Ergebnisse (C.41) und (C.44) in den Ausdruck (C.34) ein und erinnert sich, dass  $\epsilon = (\tau_b - \tau_a)/(N + 1)$ , so ergibt sich damit der Fluktuationsfaktor (C.33)

$$F(\tau_b - \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar/M}} \sqrt{\frac{\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)}}. \quad (\text{C.45})$$

Die Zeitentwicklungsamplitude des harmonischen Oszillators (C.9) lautet daher mit Gleichungen (C.13) und (C.45):

$$(x_b; \tau_b | x_a; \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar/M}} \sqrt{\frac{\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)}} \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \frac{M\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cosh \omega(\tau_b - \tau_a) - 2x_b x_a] \right\}. \quad (\text{C.46})$$

Da die Wirkung (C.2) in  $D$  Dimensionen separabel in einzelnen Raumkomponenten ist, berechnet sich die Zeitentwicklungsamplitude für  $D$  Dimensionen als Produkt eindimensionaler Zeitentwicklungsamplituden (C.46):

$$(\mathbf{x}_b; \tau_b | \mathbf{x}_a; \tau_a) = \prod_{i=1}^D (x_b^i; \tau_b | x_a^i; \tau_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar/M}^D} \sqrt{\frac{\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)}}^D \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar} \frac{M\omega}{\sinh \omega(\tau_b - \tau_a)} [(\mathbf{x}_b^2 + \mathbf{x}_a^2) \cosh \omega(\tau_b - \tau_a) - 2\mathbf{x}_b \mathbf{x}_a] \right\}. \quad (\text{C.47})$$

# Anhang D

## C-Programme

Die Berechnung kanonischer Größen wird anhand von Rekursionsformeln auf numerischem Weg implementiert. Im Folgenden ist ein Beispielprogramm aufgeführt, mit dem die Ein-Teilchen-Dichte (3.76) im Fall des harmonischen Oszillators berechnet wurde.

```
/*~~~~~PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER DICHTEN~~~~~*/

#include<stdio.h>
#include<math.h>
#define TEILCHENZAHL 1000
#define step 0.05
#define temp 1.0

int main()
{
    double Nkond(double);/* Programm zur Bestimmung einzelner Faktoren*/
    double x,y,t;
    double c,cn,hn,b,a,d,n0,n2;
    c=pow(1.20206/TEILCHENZAHL,1.0/3);
    FILE *fp;

    fp=fopen("probe.dat","w");
    a=Nkond(0.0);
    d=1/pow(TEILCHENZAHL,1.0/6);
    fprintf(fp,"{%f,%f}\n",0.0,a/pow((M_PI),1.5)/TEILCHENZAHL);
    for(x=0.0+step;x<=4+step;x=x+step)
        {fprintf(fp,"{%f,%f}\n",x,Nkond(x)/pow((M_PI),1.5)/TEILCHENZAHL);}
    fprintf(fp,"}");
    fclose(fp);
    return 0;
}

/*~~~~~Unterprogramm kondN(double t)zur Berechnung einzelner Faktoren~~~~~*/

double Nkond(double x)
{
    int m,k,l;
    double sum,sum0,prod,hk,h0;
    double c;
    c=pow(1.20206/TEILCHENZAHL,1.0/3);
    double b,tc2;
```

```
double g[TEILCHENZAHL+1];/* entspricht eta */
double fakt[TEILCHENZAHL+1];
double f;

for(k=1;k<=TEILCHENZAHL;k++)
    {fakt[k]=(1-exp(-c*k/temp))*(1-exp(-c*k/temp))*(1-exp(-c*k/temp));}

for(k=1;k<=TEILCHENZAHL;k++)
    {sum=0.0;
    prod=1.0;
    for(m=2;m<=k;m++)
    {prod=prod/g[k+1-m];
    sum=sum+prod*fakt[1]/fakt[m];}
    g[k]=(1+sum)/(k*fakt[1]);
    }

sum=0.0;
sum0=0.0;
prod=1.0;

for(k=1;k<=TEILCHENZAHL;k++)
    { h0=sqrt(1-exp(-2*c*k/(temp)))*sqrt(1-exp(-2*c*k/(temp)))
    *sqrt(1-exp(-2*c*k/(temp)));
    hk=exp(-x*x*tanh(c*k/(2*temp)))/h0;
    prod=prod/g[TEILCHENZAHL+1-k];
    sum=(sum+prod*hk);
    sum0=(sum0+prod*h0);
    }
return sum;
}
```



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Anschauliche Vorstellung der Bose-Einstein-Kondensation . . . . .	2
1.2	Kondensatteilchenanteil für ein homogenes ideales Bose Gas . . . . .	3
1.3	Allgemeines Phasendiagramm für BEC . . . . .	4
1.4	Prinzip der Laserkühlung am Beispiel eines Zwei-Niveau-Atoms . . . . .	5
1.5	Verdampfungskühlung in einer magnetischen Falle . . . . .	6
1.6	System aus einem Zeeman-Slower und einer MOT . . . . .	7
1.7	Phasenkontrastaufnahme bei der Bildung eines BEC . . . . .	9
1.8	Time-of-flight-Aufnahme eines BEC . . . . .	9
2.1	Kondensatteilchenanteil und Wärmekapazität im thermodynamischen Limes . . .	19
2.2	Semiklassische Näherung 1. Ordnung für den Kondensatteilchenanteil . . . . .	21
2.3	Kritische Temperatur und Kondensatteilchenanteil nach Euler-MacLaurin-Näherung . . . . .	25
2.4	Vergleich der kritischen Temperaturen für die isotrope Falle und die zylindrische anisotrope Falle . . . . .	29
2.5	Exakte Berechnung des chemischen Potentials und des Kondensatteilchenanteils .	36
2.6	Vergleich der Kondensatteilchenanteile aus der exakten und der semiklassischen Berechnung . . . . .	37
2.7	Vergleich der chemischen Potentiale und der Kondensatteilchenanteile für die isotrope und die anisotrope Falle . . . . .	37
2.8	Krümmung der Kurven für Kondensatteilchenanteile aus exakter Rechnung . . .	38
2.9	Quasikritische Temperatur für verschiedene Teilchenzahlen . . . . .	38
2.10	Wärmekapazität aus exakter und semiklassischer Rechnung . . . . .	40
2.11	Teilchenzahlabhängige semiklassische Dichten im thermodynamischen Limes . . .	42
2.12	Temperaturabhängige semiklassische Dichten im thermodynamischen Limes . . .	43
2.13	Vergleich der semiklassischen Dichten im thermodynamischen Limes und in der 1. Ordnung mit den exakten Ergebnissen . . . . .	49
3.1	Ein-Teilchen-Imaginärzeitamplitude: Beispielhafter Pfadverlauf von drei Teilchen	58
3.2	Temperaturabhängige kanonische Dichte für 1000 Teilchen . . . . .	61
3.3	Kanonische Dichten für verschiedene Teilchenzahlen bei $T/T_C^0 = 0$ und $T/T_C^0 = 1.0$	62
3.4	Kanonische Dichten für verschiedene Teilchenzahlen in normaler und logarithmischer Darstellung . . . . .	62
3.5	Kondensatteilchenanteil und seine zweite Ableitung . . . . .	63
3.6	Teilchenzahlabhängige kritische Temperatur . . . . .	64
3.7	Wärmekapazität . . . . .	64
3.8	Vergleich der kanonischen und großkanonischen kritischen Temperatur . . . . .	65
3.9	Vergleich der kanonischen und großkanonischen Dichten . . . . .	66

A.1 Polylogarithmische Funktionen . . . . .	70
A.2 Modifizierte polylogarithmische Funktionen . . . . .	71

# Literaturverzeichnis

- [1] ANDERSON, M. H. ; ENSHER, J. R. ; MATTHEWS, M. R. ; WIEMAN, C. E. ; CORNELL, E. A.: Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. In: *Science* **269** (1995), S. 198
- [2] DAVIS, K. B. ; MEWES, M. O. ; ANDREWS, M. R. ; DRUTEN, N. J. ; DURFEE, D. S. ; KURN, D. M. ; KETTERLE, W.: Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. In: *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), S. 3969
- [3] BOSE, S. N.: Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. In: *Zeitschrift für Physik* **26** (1924), S. 178
- [4] EINSTEIN, A.: Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. In: *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.* (1925)
- [5] LONDON, F.: On the Bose-Einstein Condensation. In: *Phys. Rev.* **54** (1938), S. 947
- [6] PENROSE, O. ; ONSAGER, L.: Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. In: *Phys. Rev.* **104** (1956), S. 576
- [7] KETTERLE, W. ; DURFEE, D. S. ; STAMPER-KURN, D. M.: Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates. In: *Proceedings of the Varenna conference on Bose-Einstein condensation* (1999). – arXiv:cond-mat/9904034
- [8] CORNELL, E. A. ; ENSHER, J. R. ; WIEMAN, C. E.: Experiments in Dilute Atomic Bose-Einstein Condensation. In: *Proceedings of the Varenna conference on Bose-Einstein condensation* (1999). – arXiv:cond-mat/9904034
- [9] CHU, S. ; HOLLBERG, L. ; BJORKHOLM, J. E. ; CABLE, A. ; ASHKIN, A.: Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure. In: *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985), Nr. 1, S. 48
- [10] PHILLIPS, W. D.: Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. In: *Rev. Mod. Phys.* **70** (1998), S. 721
- [11] ITANO, W. M. ; WINELAND, D. J.: Laser cooling of ions stored in harmonic and Penning traps. In: *Phys. Rev. A* **25** (1982), S. 35
- [12] LETT, P. D. ; WATTS, R. N. ; WESTBROOK, C. I. ; PHILLIPS, W. D. ; GOULD, P. L. ; METCALF, H. J.: Observation of Atoms Laser Cooled below the Doppler Limit. In: *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988), Nr. 2, S. 169
- [13] DURFEE, D. S. ; KETTERLE, W.: Experimental Studies of Bose-Einstein Condensation. In: *Optics Express* **2** (1998), S. 299

- [14] SCHWABL, F.: *Statistische Mechanik*. 2. Auflage. Springer-Verlag, 2004
- [15] BAGNATO, V. ; PRITCHARD, D. E. ; KLEPPNER, D.: Bose-Einstein condensation in an external potential. In: *Phys. Rev. A* **35** (1986), S. 4354
- [16] PETHICK, C. J. ; SMITH, H.: *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. 1. Aufl. Cambridge University Press, 2002
- [17] PITAEVSKI, L. ; STRINGARI, S.: *Bose-Einstein-Condensation*. Oxford University Press, 2003
- [18] GROSSMANN, S. ; HOLTHAUS, M.: On Bose-Einstein condensation in harmonic traps. In: *Phys. Lett. A* **208** (1995), S. 188
- [19] HAUGSET, T. ; HAUGERUD, H. ; ANDERSEN, J. O.: Bose-Einstein condensation in anisotropic harmonic traps. In: *Phys. Rev. A* **55** (1997), Nr. 4, S. 2922
- [20] ABRAMOWITZ, M. ; STEGUN, I.: *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, 1965. – <http://www.math.ucla.edu/cbm/aands/>
- [21] KLEINERT, H.: *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. 4. Aufl. World Scientific, 2006. – <http://users.physik.fu-berlin.de/kleinert/kleinert/?p=booklist>
- [22] KIRSTEN, K. ; TOMS, D. J.: Bose-Einstein condensation of atomic gases in a general harmonic-oscillator. In: *Phys. Rev. A* **54** (1996), S. 4188
- [23] PELSTER, A.: *Bose-Einstein-Kondensation*. Universität Duisburg-Essen, 2004
- [24] GLAUM, K.: *Bose-Einstein-Kondensation in endlichen Systemen*, Freie Universität Berlin, Diss., 2008. – <http://www.diss.fu-berlin.de/2008/117/index.html>
- [25] KLÜNDER, B. ; PELSTER, A.: Systematic Semiclassical Expansion for Harmonically Trapped Ideal Bose Gases. In: *Eur. Phys. J. B* **68** (2009), S. 457
- [26] KLEINERT, H. ; SCHULTE-FROHLINDE, V.: *Critical Properties of  $\phi^4$ -Theories*. World Scientific, 2001
- [27] KLÜNDER, B.: *Superfluide Eigenschaften ungeordneter Bosonen*, Universität Duisburg-Essen, Diplomarbeit, 2007
- [28] FEYNMAN, R. P.: *Statistical Mechanics*. Benjamin, 1972
- [29] FEYNMAN, R. P.: Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum-Mechanics. In: *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948), S. 367
- [30] LANDSBERG, P. T.: *Thermodynamics: With Quantum Statistical Illustrations*. Interscience, 1961
- [31] SATO, H.: Nucleus as a canonical ensemble: Entropy and level density at low temperature. In: *Phys. Rev. C* **36** (1987), S. 785
- [32] BORRMANN, P. ; FRANKE, G.: Recursion Formulas for Quantum Statistical Partition Functions. In: *J. Chem. Phys.* **98** (1993), S. 2484

- 
- [33] BROSENS, F. ; DEVREESE, J. T. ; LEMMENS, L. F.: Thermodynamics of Coupled Identical Oscillators within the Path-Integral-Formalism. In: *Phys. Rev. E* **55** (1997), S. 227
- [34] KETTERLE, W. ; DRUTEN, N. J.: Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. In: *Phys. Rev. A* **54** (1996), S. 656
- [35] GLAUM, K. ; KLEINERT, H. ; PELSTER, A.: Condensation of ideal Bose gas confined in a box within a canonical ensemble. In: *Phys. Rev. A* **76** (2007), S. 063604
- [36] YUKALOV, V. I.: Modified semiclassical approximation for trapped Bose gases. In: *Phys. Rev. A* **72** (2005), S. 033608
- [37] ROBINSON, J. E.: Note on the Bose-Einstein Integral Functions. In: *Phys. Rev.* **83** (1951), S. 678
- [38] GRADSHTEYN, I. S. ; RYZHIK, I. M.: *Table of Integrals Series and Products*. 4. Aufl. Academic Press, 1965



# Danksagung

*“Parturiunt montes, nascitur ridiculus mus.”*

Horaz, Ars poetica

Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Hagen Kleinert für die Möglichkeit, Diplomarbeit in seiner Arbeitsgruppe zu machen.

Ein großer Dank geht auch an Herrn Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster und Dr. Konstantin Glaum für Ihre Betreuung. Sie haben mich geduldig bei großen und kleinen Problemen unterstützt und bei der Niederschrift der Diplomarbeit angeleitet. Ohne sie wäre diese Diplomarbeit nicht möglich gewesen.

Für die entspannte Atmosphäre bedanke ich mich bei allen Gruppenmitgliedern. Nicht unerwähnt sollen Aristeu Lima, Ednilson Santos, Dr. Flavio Nogueira, Dr. Jürgen Dietel, Markus Düttmann, Matthias Ohliger, Nathalie Pfitzinger, Oliver Gabel, Dr. Petr Jizba, Tobias Graß und Victor Bezerra bleiben, mit denen ich gern Zeit verbracht und unzählige Kaffees getrunken habe.

