

Ultrakalte Quantengase und Atomlaser

Dissertation
an der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Jens Schneider
aus Idar-Oberstein

München, 18.12.2000

1. Gutachter: Prof. Dr. A. Schenzle
2. Gutachter: Prof. Dr. T. W. Hänsch

Tag der mündlichen Prüfung: 27.04.2001

Zusammenfassung

Thema der vorliegenden Arbeit ist die Bose-Einstein-Kondensation stark verdünnter atomarer Gase. Nach einer Einführung in die Theorie solcher schwach wechselwirkender Quantengase und einer Zusammenfassung wesentlicher experimenteller Ergebnisse aus dem Gebiet der Bose-Einstein-Kondensation wird zunächst die Physik ultrakalter, in Atomfallen gefangener Fermigase diskutiert. Dieses Gebiet hat sich in den letzten Jahren parallel zu dem der kondensierten Bosegase stark entwickelt und bietet vielversprechende Möglichkeiten, Modelle wie die BCS-Theorie erstmals in fast idealen Fermigasen zu untersuchen. Es werden Ergebnisse zu den thermodynamischen Eigenschaften solcher Gase vorgestellt, die vor allem für mesoskopische Teilchenzahlen (unter 1000) relevant sind. Dabei wird insbesondere auf Schaleneffekte bei der Dichteverteilung in einer Atomfalle und bei der Wärmekapazität eingegangen.

Im zweiten Teil der Arbeit wird die Physik von Atomlasern diskutiert. Als „Atomlaser“ bezeichnet man Systeme, die in der Lage sind, kohärente Materiewellen aus Atomen zu erzeugen. Die einem Bose-Einstein-Kondensat inhärente Kohärenz wird in Experimenten genutzt, um mittels eines kohärent arbeitenden Auskoppelmechanismus solche Atomstrahlen herzustellen. Die zugehörige Physik wird durch die so genannte Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben, einer Art nichtlinearen Schrödingergleichung für die Wellenfunktionen der beteiligten Hyperfeinzustände des Bose-Einstein-Kondensats aus ^{87}Rb -Atomen. In der vorliegenden Arbeit wurden unter anderem die Auskoppelstärke mittels analytischer und vor allem numerischer Methoden untersucht. Darüber hinaus konnten Aussagen über das zeitliche Verhalten von Atomlasern gewonnen, die mit zwei Radiofrequenzen betrieben werden. In diesem Fall wird der Atomstrahl aus zwei interferierenden Materiewellen verschiedener Energie gebildet, sodass kohärente, atomare Pulse mit makroskopischen Dimensionen auftreten.

Im letzten Abschnitt wird mit der Spurafluidität ein weiterer, sehr interessanter Aspekt von kondensierten Bosegasen behandelt. Nach einer Einführung in die Bestimmung quantenstatistischer Eigenschaften von Vielteilchensystemem mithilfe von Pfadintegral-Monte-Carlo-Verfahren wird der suprafluide Anteil eines kondensierten Bosegases mit verschiedenen Approximationen berechnet. Dazu wird neben den Pfadintegralen eine auf so genannten Permutationszykeln beruhende Methode eingesetzt, mit der man die Zustandssumme von Bosonen im kanonischen Ensemble und damit auch viele andere Größen ausrechnen kann. Auf diese Weise konnte der suprafluide Anteil eines idealen Bosegases im kanonischen Ensemble erstmals vollständig quantenmechanisch exakt ermittelt werden.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Bose-Einstein-Kondensation in Atomfallen — Einführung und Grundlagen	4
1.1 Bose-Einstein-Kondensation idealer Bosegase	4
1.1.1 Das homogene ideale Bosegas	5
1.1.2 Bosonen in harmonischen Fallen	7
1.1.3 Teilchenzahlfluktuationen und statistische Ensembles	8
1.2 Zur Beschreibung von Quantengasen	8
1.2.1 Vielteilchensysteme in zweiter Quantisierung	9
1.2.2 Die makroskopische Wellenfunktion	10
1.3 Schwach wechselwirkendes Bosegas	13
1.3.1 Mean-Field-Näherung und Anregungsspektrum	14
1.3.2 Gross-Pitaevskii-Gleichung	16
1.4 Niedrigdimensionale Systeme	18
1.4.1 Homogene Systeme	18
1.4.2 Oblate und prolata harmonische Fallen	19
1.5 Bose-Einstein-Kondensation im Experiment	20
1.5.1 Vor 1995	21
1.5.2 Bose-Einstein-Kondensation in atomaren Gasen	24
2 Quantenstatistische Eigenschaften von gefangenen Fermigasen	32
2.1 Wechselwirkung in atomaren Fermigasen	33
2.2 Mesoskopisches ideales Fermigas in einer Falle	33
2.2.1 Fermionen in einer isotropen Falle	35
2.2.2 Der anisotrope Fall	42
2.2.3 Résumé	47
2.3 Neuere Entwicklungen	47
3 Atomlaser	51
3.1 Was ist ein Atomlaser?	51
3.1.1 Vorschläge für Nachlademechanismen	52
3.1.2 Auskoppelmethoden und Experimente	54
3.2 Theoretische Modellierung	55
3.2.1 Numerische Methode	60
3.3 Numerische Ergebnisse für eine Radiofrequenz	62
3.3.1 Auskoppelrate	66

3.3.2	Reflektion an einem Dipolpotential	68
3.4	Atomlaser mit zwei Radiofrequenzen – kohärent gepulster Atomstrahl	70
3.4.1	Gekoppelte Gross-Pitaevskii-Gleichungen mit zwei Radiofrequenzen	70
3.4.2	Airy-Funktionen für fallende Atome und die Flussstärke des Atomstrahls	72
3.4.3	Numerische Ergebnisse	75
3.5	Ausblick	81
4	Quantenstatistik ultrakalter Bose-Gase mittels Pfadintegralen	82
4.1	Statistische Mechanik von Vielteilchen-Systemen und Pfadintegrale	82
4.2	Monte-Carlo Verfahren für Pfadintegrale	86
4.2.1	Bestimmung von Observablenerwartungswerten	87
4.2.2	Bestimmung der Energie von Bosonen in einer harmonischen Falle	89
4.2.3	Dichteverteilung in einer harmonischen Falle	91
4.3	Permutationszykel und Suprafluidität beim idealen Bosegas	92
4.3.1	Permutationszykel im kanonischen Ensemble	93
4.3.2	Suprafluidität in einer harmonischen Falle	96
4.3.3	Numerische Ergebnisse und Vergleich mit PIMC	99
4.4	Neuere Entwicklungen	102
	Ausblick	104
	Literatur	107

Einleitung

Der Begriff „Bose-Einstein-Kondensation“ bezeichnet einen spektakulären physikalischen Effekt, bei dem unterhalb einer kritischen Temperatur ein makroskopischer Anteil eines Gases aus Bosonen den Grundzustand des Systems besetzt. Dieser *Kondensatanteil* ist vollkommen kohärent und stellt eine makroskopischen Materiewelle dar.

Schon in den Anfangstagen der Quantenmechanik hat Einstein dieses Phänomen theoretisch vorhergesagt [58, 59]; er folgerte die Existenz des Phasenübergangs für ein ideales Gas ohne Wechselwirkungen zwischen den Teilchen allein aus dem für Bosonen in drei Raumdimensionen begrenzten Phasenraum.

Von den 20er Jahren des 20. Jahrhunderts bis 1995 gab es keine klare experimentelle Realisierung der Bose-Einstein-Kondensation. Einsteins Vorschlag wurde zwar in den 30er Jahren mit der damals neu entdeckten Suprafluidität von flüssigem Helium in Verbindung gebracht; da Helium jedoch kein ideales Gas, sondern eine stark wechselwirkende Flüssigkeit ist, gibt es nur eine lose Verbindung zwischen den beiden Effekten. Basierend auf diesen ersten Untersuchungen wurden sehr erfolgreiche Theorien für Quantenflüssigkeiten und -gase entwickelt; Ende der 50er Jahre lag eine weitestgehend abgeschlossene Theorie der Bose-Einstein-Kondensation in schwach wechselwirkenden Bosegasen vor. Einziger Schönheitsfehler dieser Modelle war die Tatsache, dass sie nicht experimentell verifiziert werden konnten, da sie insbesondere nicht auf ^4He anwendbar waren.

Die erste eindeutige Realisierung eines Bose-Einstein-Kondensats wurde 1995 [6, 28, 48] mit ultrakalten atomaren Bosegasen erreicht. Drei Gruppen war es gelungen, Rubidium, Lithium und Natrium auf Temperaturen unterhalb eines Mikrokelvins abzukühlen und zu speichern und damit die Bedingungen für Bose-Einstein-Kondensation zu erreichen. Dabei kamen die erst in den 80er Jahren entwickelten optischen Verfahren der Laserkühlung und verwandte Methoden zum Einfang von Atomen in optischen und magnetischen Fallen zum Einsatz. Diese Experimente standen am Ende einer langen Reihe von Versuchen, spinpolarisierte, bosonische Atome wie Wasserstoff oder die Alkaliatome unter die kritische Temperatur für Bose-Einstein-Kondensation abzukühlen. Der ursprüngliche Vorschlag, solche Gase durch Spinpolarisation zu stabilisieren, um die Bildung von Molekülen zu verhindern und um so die Bose-Einstein-Kondensation eines atomaren Gases zu erreichen, geht auf eine Arbeit von 1959 zurück [85] und wurde erst 1976 konkretisiert [186].

Seit 1995 wird die Bose-Einstein-Kondensation atomarer Bosegase in einer beeindruckenden Zahl von experimentellen und theoretischen Arbeiten [1] untersucht. Dabei bestand zunächst einmal großes Interesse an der Klärung prinzipieller Fragen nach der tatsächlichen Natur von Bose-Einstein-Kondensaten. So konnte z.B. mit Interferenzexperimenten an unabhängigen Kondensaten nachgewiesen werden, dass Bose-Einstein-Kondensate vollständig kohärent sind [8, 165]. Auf theoretischer Seite musste im Rahmen dieser Betrachtungen das Konzept der *spontanen Symmetriebrechung*, das in der Theorie der kondensierten Materie oft sehr erfolgreich

angewandt wurde, neu überdacht werden, da die Existenz einer genau bekannten Phase nicht mit der im Prinzip exakt bekannten Atomanzahl in den neuen Experimenten in Einklang zu bringen ist. Auch an anderen Stellen war es notwendig, die alten Theorien für schwach wechselwirkende Bosegase zu hinterfragen und auf die neue Situation mit räumlich inhomogenen Gasen in Atomfallen anzupassen [45].

Neben diesen prinzipiellen Themen wurde die Arbeit mit Bose-Einstein-Kondensaten schon von Anbeginn durch einen Traum der Quanten- und Atomoptik beflügelt: Die Möglichkeit, die Kohärenz von Bose-Einstein-Kondensaten zur Erzeugung kohärenter Atomstrahlen zu nutzen, d.h. Materiewellen mit Eigenschaften, die denen des optischen Lasers gleichen. Mittlerweile betreiben mehrere experimentelle Gruppen Apparaturen, die solche Strahlen – wenn auch nur für eine Zeit von etwa 100 ms – erzeugen. Für diese Quellen kohärenter Atomstrahlen verwendet man heute den Begriff *Atomlaser*.

Kohärente Atomstrahlen aus Atomlasern bieten eine Vielzahl neuer Möglichkeiten für die Atomoptik. So kann man z.B. die Genauigkeit von Atomuhren, die auf atomaren Fontänen basieren, verbessern oder genauere Atominterferometer zur Messung von Rotationen oder der Erdbeschleunigung entwickeln. Ein weiterer Anwendungsbereich wird die Atomlithographie sein, bei der die leichte Kontrolle der de Broglie-Wellenlänge der Atome im Atomstrahl eine wichtige Rolle spielt.

Aus der Vielzahl der Themen greift die vorliegende Arbeit drei Bereiche heraus, die sowohl prinzipielle Fragestellungen tangieren als auch das eher anwendungsorientierte Feld der Atomlaser betreffen. Nach einer allgemeinen Einführung in das Gebiet der Bose-Einstein-Kondensation in Kapitel 1 wird im nächsten Kapitel auf ein Thema eingegangen, das eng mit dem Gebiet der ultrakalten Bosegase verwandt ist: ultrakalte *Fermigase*. Atomare Fermigase bei sehr tiefen Temperaturen konnten bis vor wenigen Jahren noch nicht erzeugt werden. Erst die für Bosegase entwickelten experimentellen Techniken ermöglichten es in jüngster Zeit, Fermigase bis unter die Fermitemperatur abzukühlen [50]. Die Physik von Fermionen bei solchen Temperaturen konnte bisher nur mit Elektronen im Festkörper oder mit Nukleonen in Atomkernen untersucht werden; atomare Fermigase bieten daher erstmals die Möglichkeit, mit fast idealen Gasen arbeiten zu können. Neben interessanten Phänomenen bei der Kombination von Bosonen und Fermionen in Atomfallen stellt die Vorhersage eines BCS-artigen Übergangs in einem Gemisch zweier Hyperfeinstruktur-Komponenten eines spinpolarisierten Fermigases die faszinierendste Perspektive in diesem Feld dar.

In der vorliegenden Arbeit werden die thermodynamischen Eigenschaften gefangener Fermigase diskutiert. Dabei wird vor allem die Analyse von Schaleneffekten bei Gasen mit unter 1000 Atomen und die Berechnung der Wärmekapazität solcher Gase im Vordergrund stehen.

Kapitel 3 befasst sich wieder mit Bosonen und ist dem Thema Atomlaser gewidmet. Nach einer Einführung in die theoretische Modellierung von Atomlasern werden verschiedene Ergebnisse zum Auskoppelverhalten vorgestellt und diskutiert. Die Arbeiten entstanden zum Teil in Kooperation mit der Münchner Gruppe um T.W. Hänsch und T. Esslinger [23, 24], sodass auch einige Vergleiche mit experimentellen Daten angestellt werden konnten. Weitere Untersuchungen beschäftigten sich mit der theoretischen Beschreibung eines Atomlasers, der mit zwei Radiofrequenzen betrieben wird. In diesem Fall treten im Atomstrahl zwei Energien auf und die zugehörigen Wellenfunktionen interferieren. Dadurch kommt es zu einem faszinierenden Phänomen, nämlich der Ausbildung kohärenter, gepulster atomarer Materiewellen.

Im letzten Kapitel wird die Berechnung von Eigenschaften ultrakalter Bosegase mittels Pfadintegralen vorgestellt. Neben Verfahren, die sich auf die Berechnung elementarer Anregungen

stützen, um diese z.B. zur Bestimmung des Kondensatanteils heranzuziehen, stellen so genannte *Pfadintegral-Monte-Carlo-Methoden* eine weitere, potenziell exakte Möglichkeit dar, thermodynamische Effekte und Eigenschaften bei endlicher Temperatur zu berechnen. Auf diese Weise wurden in der vorliegenden Arbeit die Dichteverteilung und die Gesamtenergie eines kondensierten idealen Bosegases ermittelt. Darüber hinaus wird vor allem die Suprafluidität solcher Gase unterhalb der Übergangstemperatur diskutiert. Mit einem Verfahren, das auf den von Feynman eingeführten Permutationszykeln beruht, konnte erstmals der suprafluide Anteil in einem gefangenen Bosegas im kanonischen Ensemble berechnet werden.

Veröffentlichungen

In Zusammenhang mit dieser Dissertation sind folgende Publikationen entstanden:

- J. Schneider und H. Wallis,
Mesoscopic Fermi gas in a harmonic trap,
Phys. Rev. A **57**, 1253 (1998).
- J. Schneider und A. Schenzle,
Output from an atom laser: theory vs. experiment,
Appl. Phys. B **69**, 353 (1999).
- J. Schneider und A. Schenzle,
Investigations of a two-mode atom laser model,
Phys. Rev. A **61**, 053611 (2000).
- J. Schneider und A. Schenzle,
Theory of a pulsed rf atom laser,
in: S. Martellucci, A. N. Chester, A. Aspect und M. Inguscio (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensates and Atom Lasers*, International School on Quantum Electronics, Erice, Kluwer Academic / Plenum Publishers, London (2000).
- J. Schneider und H. Wallis,
Fully quantum mechanical moment of inertia of a mesoscopic ideal Bose gas,
Euro. Phys. J. B **18**, 507 (2000).

1

Bose-Einstein-Kondensation in Atomfallen — Einführung und Grundlagen

In diesem einleitenden Kapitel werden die Grundzüge der Theorie der Bose-Einstein-Kondensation dargelegt und verschiedene experimentelle Realisierungen dieses Phänomens, vor allem im Bereich schwach wechselwirkender atomarer Bosegase, beschrieben. Die Themenauswahl orientiert sich dabei an den in späteren Kapiteln verwendeten Konzepten und Techniken. Die Literatur zu diesem Thema ist in den letzten Jahren stark angewachsen (siehe z.B. [1]). Hervorzuheben sind vor allem zwei theoretische Übersichtsartikel [45, 157], die die Forschungsergebnisse über Bose-Einstein-Kondensate aus der Perspektive der Physik der kondensierten Materie bzw. der Quantenoptik zusammenstellen und einordnen.

1.1 Bose-Einstein-Kondensation idealer Bosegase

Mit dem Begriff Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet man die Tatsache, dass Bosonen, d.h. Teilchen deren Gesamtwellenfunktion bzgl. Vertauschungen symmetrisch ist, unterhalb einer kritischen Temperatur T_c den Grundzustand des betrachteten physikalischen Systems makroskopisch bevölkern, sie *kondensieren*. Dieses Phänomen wurde zuerst von Bose [27] und Einstein [58, 59] vorhergesagt.

Betrachtet man ein Gas von nicht wechselwirkenden Bosonen der Masse M , deren Dynamik durch einen Einteilchenhamiltonoperator \hat{H}_0 beschrieben wird, so können die thermodynamischen Eigenschaften dieses Gases im Rahmen einer großkanonischen Beschreibung aus der zugehörigen Zustandssumme

$$\mathcal{Z}_{\text{BE}}(T, \mu) = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \right\} = \prod_{j=0}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}} \quad (1.1)$$

bestimmt werden. Dabei beschreibt $\beta = 1/(kT)$ die inverse Temperatur; mit ϵ_k werden die Energieeigenwerte von \hat{H}_0 bezeichnet, \hat{N} ist der Teilchenzahloperator. Das chemische Potential μ ergibt sich aus der mittleren Anzahl $\langle N \rangle$ der Teilchen im System. Mittels des großkanoni-

schen Potentials

$$\Xi_{\text{BE}}(T, \mu) = -kT \ln \mathcal{Z}_{\text{BE}}(T, \mu) = kT \sum_{j=0}^{\infty} \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)} \right) \quad (1.2)$$

erhält man

$$\langle N \rangle = - \frac{\partial \Xi_{\text{BE}}(T, \mu)}{\partial \mu} = \sum_{j=0}^{\infty} \langle n_j \rangle, \quad (1.3)$$

wobei mit $\langle n_j \rangle$ die *Bose-Einstein-Verteilung*

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1} \quad (1.4)$$

für die mittlere Besetzung der Einteilchenzustände mit den Energien ϵ_j bezeichnet wird. Setzt man nun eine mittlere Teilchenanzahl $\langle N \rangle$ voraus, so kann durch Inversion von Gl. (1.3) das chemische Potential μ berechnet werden. Da für die Besetzungszahlen $\langle n_j \rangle \geq 0$ gilt, folgt aus Gl. (1.4) $\mu \leq \epsilon_0$, d. h. das chemische Potential muss kleiner oder gleich der Energie ϵ_0 des Grundzustandes sein. Der Grundzustand kann daher mit beliebig vielen Teilchen besetzt werden, denn es gilt

$$\langle n_0 \rangle \rightarrow \infty \quad \text{für} \quad \mu \rightarrow \epsilon_0. \quad (1.5)$$

Ein räumlich homogenes ideales Bosegas zeigt nun genau dieses Verhalten. Dies soll im Folgenden genauer erläutert werden.

1.1.1 Das homogene ideale Bosegas

Führt man bei konstanter Dichte n den thermodynamischen Limes

$$\langle N \rangle \rightarrow \infty, \quad V \rightarrow \infty, \quad n = \frac{\langle N \rangle}{V} = \text{const.} \quad (V : \text{Volumen}) \quad (1.6)$$

durch, so kann die Summe in Gl. (1.3) näherungsweise durch ein Integral ausgedrückt werden. Für die Dichte erhält man somit

$$n = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_{\text{th}}^3} \quad (1.7)$$

mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ und der thermischen Wellenlänge

$$\lambda_{\text{th}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{MkT}}. \quad (1.8)$$

Die so genannte *Bose-Funktion* $g_{3/2}(z)$ ist für $z > 0$ eine monoton steigende Funktion, allgemein gilt (vgl. z.B. [96])

$$g_x(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^x}. \quad (1.9)$$

Da aber wegen $\mu \leq \epsilon_0 = 0$ die Fugazität nach oben durch den Wert 1 beschränkt ist, folgt aus Gl. (1.7) eine obere Grenze für die Dichte, wobei $\zeta(x)$ die Riemannsche ζ -Funktion ist

$$n\lambda_{\text{th}}^3|_{z=1} = g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) \approx 2.612. \quad (1.10)$$

Dieses Resultat steht zum einem im Gegensatz zur physikalischen Tatsache, dass man die Dichte eines Gases zumindest prinzipiell beliebig erhöhen kann; zum anderen widerspricht es der Feststellung aus Gl. (1.5). Dieser Widerspruch lässt sich lösen: Bei näherer Betrachtung der obigen Integralnäherung zeigt sich, dass der Grundzustand getrennt behandelt werden muss, mithin gilt ($\langle N_0 \rangle = \langle n_0 \rangle$)

$$n = \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_{\text{th}}^3}. \quad (1.11)$$

Sobald also bei $z = 1$ das Maximum des zweiten Summanden erreicht wird, bevölkern zusätzliche Teilchen den Grundzustand, die Dichte ist damit nicht mehr beschränkt. Aus Gl. (1.7) erhält man eine *kritische Temperatur*

$$kT_c = \frac{2\pi\hbar^2}{M} \left(\frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \quad (1.12)$$

bzw. eine *kritische Dichte*

$$n_c = \zeta(3/2) \left(\frac{MkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad (1.13)$$

welche die Grenze für den Bereich mit $\langle N_0 \rangle = 0$ markieren. Für $T < T_c$ bzw. $n > n_c$ wird der Grundzustand makroskopisch besetzt, man spricht von *Bose-Einstein-Kondensation*. Die Änderung der Eigenschaften des Gases bei T_c stellt einen thermodynamischen Phasenübergang dar, für die Grundzustandsbesetzung gilt

$$\frac{\langle N_0 \rangle}{\langle N \rangle} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (1.14)$$

Neben dieser, rein auf der statistischen Mechanik basierenden Argumentation kann man den Phasenübergang der Bose-Einstein-Kondensation auch aus der Sicht der Quantenmechanik interpretieren: Die thermische Wellenlänge λ_{th} kann als de Broglie-Wellenlänge der bosonischen Teilchen aufgefasst werden. Wird nun bei konstanter Dichte die Temperatur des Gases auf T_c abgesenkt, so „überlappen“ sich gemäß Gl. (1.10) die Wellenpakete benachbarter Teilchen gerade. Man erwartet dann kooperative Effekte, die auf bosonischer Stimulierung beruhen und zur makroskopischen Besetzung des Grundzustandes führen. Da $1/\lambda_{\text{th}}^3$ proportional zur Dichte im Impulsraum ist, kann man Gl. (1.10) auch als Bedingung an die Phasenraumdichte auffassen. Liegt deren Wert in der Größenordnung von 1, so beginnen quantenmechanische Effekte eine Rolle zu spielen. Quantenkinetische Betrachtungen [68] und Untersuchungen der Besetzungsstatistik des Kondensats, die auf der Analogie zur Dynamik beim Laserübergang basieren [114, 176], haben diese Auffassung bestätigt.

1.1.2 Bosonen in harmonischen Fallen

Die bisherigen Ausführungen bezogen sich auf ein Gas von Bosonen im freien Raum ohne äußeres Potential. Die Experimente zur Bose-Einstein-Kondensation, die seit 1995 zu einer Flut von beeindruckenden experimentellen und theoretischen Resultaten geführt haben (siehe auch Abschnitt 1.5.2), wurden hingegen allesamt an atomaren Gasen durchgeführt, die mit optischen und magnetischen Fallen in einem räumlich begrenzten Gebiet gehalten wurden. Die Atome befinden sich dabei in sehr guter Näherung in einem äußeren, meist anisotropen, harmonischen Potential

$$V_{\text{ext}} = \frac{1}{2}M\omega_{\perp}^2(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}M\omega_{\parallel}^2z^2. \quad (1.15)$$

Auch diese Situation kann mit einem dem üblichen thermodynamischen Limes ähnlichen Verfahren [49] analysiert werden. Betrachtet man der Einfachheit halber ein isotropes Potential mit der Frequenz ω , so wird statt der Dichte das Produkt $N\omega^3$ konstant gehalten, für $N \rightarrow \infty$ geht also $\omega \rightarrow 0$. Wie in [10] gezeigt wird, führt die Näherung der Summe in Gl. (1.3) durch ein Integral (wiederum unter Abspaltung des Grundzustandes) zu einer kritischen Temperatur

$$kT_c = \hbar\omega \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}; \quad (1.16)$$

die Population des Grundzustandes verhält sich gemäß

$$\frac{\langle N_0 \rangle}{\langle N \rangle} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3. \quad (1.17)$$

Die Summe in Gl. (1.3) kann aber auch exakt berechnet werden, man erhält

$$\langle N \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{(1 - e^{-j\beta\hbar\omega})^3}. \quad (1.18)$$

Viele Autoren [77, 112] (siehe auch Kapitel II in [45]) haben diese Darstellung als Ausgangspunkt für Untersuchungen des Verhaltens bei endlichen Teilchenzahlen verwendet. Ist die Temperatur groß gegen den Abstand der Energieeigenwerte, also $kT \gg \hbar\omega$, so kann man Gl. (1.18) mithilfe von Integralen nähern und es folgt

$$\langle N \rangle = \frac{z}{1-z} + g_3(z) \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 + \frac{3}{2} g_2(z) \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^2, \quad (1.19)$$

wobei der erste Summand den Grundzustandsbeitrag beschreibt. Hieraus lassen sich Korrekturen für T_c und $\langle N_0 \rangle$ berechnen, so gilt z.B. [45, 112]

$$kT_{c,\text{kor}} = kT_c - \hbar\omega \frac{\zeta(2)}{2\zeta(3)}. \quad (1.20)$$

Die Methoden für endliche Teilchenzahlen wurden auch erfolgreich auf stark anisotrope Fallen angewendet [192], auf mögliche Besonderheiten in diesen Fällen wird im Rahmen einer kurzen Diskussion niedrigdimensionaler Systeme in Abschnitt 1.4 eingegangen.

1.1.3 Teilchenzahlfuktuationen und statistische Ensembles

Ein weiteres interessantes Problem, das im Zuge der Forschung an Bosegasen in harmonischen Fallen gelöst wurde, betrifft die Fluktuationen der Kondensatbesetzung $\langle N_0 \rangle$. Alle bisherigen Aussagen wurden mithilfe des großkanonischen Ensembles gewonnen. Auch die Fluktuationen der mittleren Populationen $\langle n_j \rangle$ der Einteilchenzustände können in diesem Ensemble berechnet werden, es gilt

$$\frac{\langle n_j^2 \rangle - \langle n_j \rangle^2}{\langle n_j \rangle^2} = \frac{1}{\langle n_j \rangle} + 1. \quad (1.21)$$

Dies hätte für ein Bose-Einstein-Kondensat bei kleinen Temperaturen mit $\langle N_0 \rangle \approx \langle N \rangle$ Kondensatfluktuationen der Größenordnung $\langle N \rangle$ zur Folge, und damit auch ebensolche Fluktuationen von $\langle N \rangle$ selbst. Dieses Verhalten macht physikalisch wenig Sinn, es basiert auf einer Unzulänglichkeit des großkanonischen Ensembles [210]; in [78, 149, 161, 176] und in den Arbeiten von Wilkens und Mitarbeitern (siehe [101] und die dortigen Referenzen) werden die Fluktuationen der Kondensatbesetzung genauer analysiert. Da die Teilchenanzahl in den derzeitigen Experimenten nicht durch ein angekoppeltes Teilchenreservoir fluktuiert, sondern vielmehr fest vorgegeben ist, liegt diesen Arbeiten nicht das großkanonische sondern das kanonische oder mikrokanonische Ensemble zu Grunde. Letzteres entspricht den experimentellen Gegebenheiten am besten, denn auch die Gesamtenergie ist bei den Fallenexperimenten fixiert und kann nicht mit einem Reservoir ausgetauscht werden. Schon Politzer [161] hat für die relativen Kondensatfluktuationen das eigentlich erwartete normale Verhalten

$$\frac{\langle \Delta N_0 \rangle}{\langle N_0 \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1.22)$$

gefunden.

Die Unterschiede zwischen den verschiedenen statistischen Ensembles scheinen aber auf das Problem der Teilchenzahlfuktuationen beschränkt zu sein. Nur für sehr kleine Teilchenzahlen $N < 1000$ zeigen sich wirklich Unterschiede in den Vorhersagen z.B. für N_0 [87]. In Kapitel 4 werden im kanonischen Ensemble einige interessante Eigenschaften des idealen Bosegasen mit Hilfe von Permutationszykeln berechnet, dort wird auch auf den Unterschied zu Ergebnissen auf Basis großkanonischer Rechnungen eingegangen.

1.2 Zur Beschreibung von Quantengasen

Um die Terminologie für die folgenden Kapitel festzulegen, sollen hier die Grundzüge der Beschreibung von Quantengasen in zweiter Quantisierung mittels Feldoperatoren dargelegt werden (siehe auch [64]). Des Weiteren wird auf die Problematik der Beschreibung von Bose-Einstein-Kondensaten mittels makroskopischer Wellenfunktionen eingegangen.

1.2.1 Vielteilchensysteme in zweiter Quantisierung

Die Physik von wechselwirkenden Bosonen oder Fermionen wird meist mit Hilfe von *Feldoperatoren*

$$\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_j \psi_j(\mathbf{x}) a_{\alpha,j} \quad (1.23a)$$

$$\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \psi_j^*(\mathbf{x}) a_{\alpha,j}^\dagger \quad (1.23b)$$

formuliert, die ein Teilchen der Spezies α an einer Stelle \mathbf{x} im Raum entweder vernichten (Gl. (1.23a)) oder erzeugen (Gl. (1.23b)). Die durch α indizierten Teilchensorten können z.B. Elektronen mit unterschiedlichem Spin sein, aber auch Atome in verschiedenen Hyperfeinstruktur- oder Zeeman-Zuständen. Eine solche Situation liegt in vielen Experimenten zur Bose-Einstein-Kondensation vor; so gibt es in Atomlasern (siehe Kapitel 3) Atome, die abhängig von ihrem Drehimpulszustand entweder im Atomlaser „gefangen bleiben“ oder in einen Atomstrahl ausgekoppelt werden.

Die Wellenfunktionen $\psi_j(\mathbf{x})$ bilden eine orthonormierte Basis von Funktionen, j ist ein Index für die dazugehörigen Einteilchenzustände $|j\rangle$. Die Operatoren $a_{\alpha,j}$ und $a_{\alpha,j}^\dagger$ sind Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren für Teilchen der Sorte α in diesen auch *Moden* genannten Zuständen. Bosonen bzw. Fermionen werden durch quantenmechanische Zustände beschrieben, die sich unter Permutationen von Teilchen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch verhalten. Diese Eigenschaft wird durch die folgenden Kommutatorrelationen für bosonische Feldoperatoren (bzw. Antikommutatorrelationen für fermionische Operatoren) implementiert

$$[\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.24a)$$

$$[\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\Psi}_\beta(\mathbf{y})]_{\mp} = [\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = 0, \quad (1.24b)$$

wobei $[\ , \]_{\mp}$ den Kommutator ($-$) für Bosonen bzw. den Antikommutator ($+$) für Fermionen bezeichnet. Analoge Relationen gelten für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_{\alpha,j}, a_{\alpha,j}^\dagger$.

Der gesamte Hilbertraum (auch *Fock-Raum* genannt) eines Systems nicht wechselwirkender Teilchen einer Spezies wird nun mittels der Einteilchenzustände $|j\rangle$ und der Erzeugungsoperatoren a^\dagger aufgebaut. Die Fockbasis besteht aus Zuständen der Form

$$|n_0, n_1, \dots\rangle := \prod_{j=1}^{\infty} \frac{a_j^{\dagger n_j}}{\sqrt{n_j!}} |0, 0, \dots\rangle, \quad (1.25)$$

d.h. Zuständen, in denen die Einteilchenzustände $|j\rangle$ n_j -mal besetzt sind. Aus den Kommutatorrelationen für a_j, a_j^\dagger folgt für Bosonen $n_j \in \{0, 1, 2, \dots\}$, d.h. ein Einteilchenzustand kann mit einer beliebigen Anzahl von Teilchen besetzt werden; für Fermionen gilt gemäß dem Pauli-Prinzip $n_j \in \{0, 1\}$.

Die Dynamik eines Vielteilchensystems wird natürlich durch einen Hamiltonoperator bestimmt, in den die Wechselwirkung zwischen Teilchen einfließt. Diese kann oft in guter Näherung durch eine Zweiteilchenwechselwirkung beschrieben werden, die man durch ein Potential $U_{\alpha,\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ parametrisiert. Enthält das System verschiedene Teilchensorten, so hat der

Hamiltonoperator folgende Form

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \int d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M_{\alpha}} + V_{\alpha}(\mathbf{x}) \right\} \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{y}) U_{\alpha, \beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{y}) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Neben dem kinetischen Anteil wurde hier noch ein äußeres Potential $V_{\alpha}(\mathbf{x})$ eingeführt. Dies wird, wie schon in Abschnitt 1.1.2 angesprochen wurde, oft das harmonische Potential einer Atomfalle sein, das allerdings noch vom magnetischen Moment der Atome abhängt. Des Weiteren nennt man

$$\hat{N}_{\alpha} = \int d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad (1.27)$$

den Teilchenzahloperator der Teilchensorte α ; da \hat{N}_{α} mit \hat{H} kommutiert $[\hat{H}, \hat{N}_{\alpha}] = 0$, bleibt die Teilchenanzahl jeder Spezies getrennt erhalten. In Gl. (1.26) werden inelastische Zwei- und Dreikörperstöße, welche den Spinzustand von Atomen in magnetischen Fallen können, vernachlässigt. Auf die Form des Potentials $U_{\alpha, \beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, das die elastischen Zweikörperstöße beschreibt, wird im nächsten Kapitel genauer eingegangen.

Die Formulierung der statistischen Mechanik eines Vielteilchensystems ist im großkanonischen Ensemble nun recht einfach. Man betrachtet¹ den um das chemische Potential μ erweiterten Hamiltonoperator

$$\hat{K} = \hat{H} + \mu \hat{N}_{\alpha}. \quad (1.28)$$

Wie schon in Gl. (1.1) beschrieben, ergibt sich die großkanonische Zustandssumme aus

$$\mathcal{Z}(T, \mu) = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{K}} \right\}, \quad (1.29)$$

die Spurbildung geschieht durch Summation über alle Besetzungszustände aus Gl. (1.25). Für ein System ohne Wechselwirkung $U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$ erhält man

$$\mathcal{Z}(T, \mu) = \prod_{j=0}^{\infty} \frac{1}{1 \mp e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}}, \quad (1.30)$$

das Minuszeichen gilt hierbei für Bosonen, das Pluszeichen für Fermionen. Wie die Eigenschaften eines wechselwirkenden Systems berechnet werden können, soll im Kapitel über schwach wechselwirkende Bosegase näher beleuchtet werden.

1.2.2 Die makroskopische Wellenfunktion

Die wesentliche Eigenschaft der Bose-Einstein-Kondensation ist die makroskopische Besetzung des Grundzustandes eines Vielteilchensystems. Im bisher betrachteten Fall eines idealen Bosegases ist dieser Zustand der Grundzustand des äußeren Potentials $V(\mathbf{x})$, beschrieben durch

¹Der Einfachheit halber wird hier nur eine Teilchenart berücksichtigt.

die Einteilchenwellenfunktion $\psi_0(\mathbf{x})$. Im Grenzfall $T = 0$ sind alle N Teilchen kondensiert, der Grundzustand des Gesamtsystems lässt sich dann durch

$$\Psi_0 = \psi_0(\mathbf{x}_1) \times \psi_0(\mathbf{x}_2) \times \dots \times \psi_0(\mathbf{x}_N) \quad (1.31)$$

beschreiben. $\sqrt{N}\psi_0(\mathbf{x})$ wird in diesem Fall *makroskopische Wellenfunktion* genannt, da tatsächlich das ganze Kondensat durch diese eine Funktion beschrieben wird. Dieser auf F. London [124] zurückgehende Begriff wurde auf zwei konzeptionell verschiedene Arten auf Systeme mit Wechselwirkungen verallgemeinert, die im Folgenden dargelegt werden sollen. Im Übrigen ist die makroskopische Wellenfunktion identisch mit dem von Ginzburg und Landau eingeführten *Ordnungsparameter* (siehe [123]) und für die Beschreibung von supraflüssigen bzw. supraleitenden Systemen von großer Bedeutung.

Off-diagonal-long-range-order

Im Gegensatz zu nicht wechselwirkenden Bosegasen ist der Grundzustand eines wechselwirkenden Vielteilchensystems selbst bei $T = 0$ nicht durch ein Produkt von Einteilchenzuständen darstellbar. Eine direkte Verallgemeinerung von Gl. (1.31) ist somit nicht möglich. Penrose und Onsager [158] haben aus diesem Grund eine allgemeinere Definition der Bose-Einstein-Kondensation angegeben, die auf der Einteilchendichtematrix $\langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \rangle$ beruht. Besitzt diese einen einzigen, makroskopischen Eigenwert N_0 , so wird dieser als Population des Bose-Einstein-Kondensats interpretiert, und man kann die Einteilchendichtematrix mit Hilfe der zugehörigen Eigenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ folgendermaßen darstellen

$$\langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \rangle = N_0 \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) + \tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (1.32)$$

$\sqrt{N_0}\psi(\mathbf{x})$ wird nun als makroskopische Wellenfunktion bezeichnet; diese Definition ist im Falle eines idealen Gases bei $T = 0$ identisch mit der weiter oben genannten. $\tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ beschreibt den nicht kondensierten Anteil, da dieser für $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ keine Korrelationen aufweist, gilt $\tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rightarrow 0$ und somit

$$\langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \rangle \rightarrow N_0 \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) \quad \text{für} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty. \quad (1.33)$$

Für ein räumlich homogenes System gilt

$$\langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \rangle \rightarrow \frac{N_0}{V} \quad \text{für} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty; \quad (1.34)$$

man erkennt in diesem Fall besonders gut, dass in einem Bose-Einstein-Kondensat eine Korrelation zwischen beliebig weit voneinander entfernten Punkten vorliegt. Diese Erkenntnis schlägt sich in dem Begriff *off-diagonal-long-range-order* (ODLRO) nieder, der von Yang [207] für Vielteilchensysteme geprägt wurde, die eine langreichweitige Korrelation von Nebendiagonalelementen einer reduzierten Dichtematrix aufweisen.

Spontane Symmetriebrechung

Die zweite Möglichkeit, das Konzept der makroskopischen Wellenfunktion auch für Systeme mit Wechselwirkung zu definieren, beruht auf der so genannten *spontanen Symmetriebrechung* [71, 96, 97]. Als Modellsystem dient dabei der Ferromagnetismus: Der Hamiltonoperator

für ein ferromagnetisches System ist zwar invariant unter räumlichen Drehungen, beim Phasenübergang am Curie-Punkt tritt jedoch eine spontane Magnetisierung $\langle M \rangle_{\text{spont.}}$ auf, die diese Rotationssymmetrie bricht. Für Temperaturen $T < T_{\text{Curie}}$ nimmt das System also einen von vielen, entarteten Grundzuständen an, die durch Symmetrietransformationen ineinander überführt werden können.

Mathematisch lässt sich dieses Phänomen nur mit einem Trick modellieren, denn im gewöhnlichen Ensemblemittel verschwindet der Erwartungswert der Magnetisierung aufgrund der Rotationssymmetrie für alle Temperaturen, da Konfigurationen mit einer Magnetisierung M mit gleicher Wahrscheinlichkeit im Ensemble vertreten sind wie solche mit Magnetisierung $-M$. Nur die Einführung eines äußeren, magnetischen Hilfsfeldes, das erst nach der Ensemblemittelung auf null gesetzt wird, ermöglicht die Berechnung von $\langle M \rangle_{\text{spont.}}$. Man sagt, dass die Magnetisierung im Ensemblemittel verschwindet, dass aber ein *Einzelssystem* durchaus eine nicht verschwindende Magnetisierung aufweisen kann.

Bogoliubov [25] hat diese Beobachtungen auf die Beschreibung der Bose-Einstein-Kondensation in einem wechselwirkenden System übertragen. Der Hamiltonoperator (1.26) besitzt eine globale $U(1)$ -Eichsymmetrie, die bei der Bose-Einstein-Kondensation spontan gebrochen wird. Bogoliubov nahm an, dass der Feldoperator in Analogie zur Magnetisierung einen endlichen Erwartungswert besitzt

$$\langle \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle = \sqrt{N_0} \psi(\mathbf{x}), \quad (1.35)$$

den man wieder als makroskopische Wellenfunktion auffasst. Mit dieser Annahme lautet die Bedingung (1.33) für ODLRO

$$\langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \rangle = \langle \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle^* \langle \hat{\Psi}(\mathbf{y}) \rangle \quad \text{für} \quad |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty. \quad (1.36)$$

Umgekehrt folgt aus dem Vorliegen von ODLRO nicht zwangsweise eine spontan gebrochene Symmetrie, sodass off-diagonal-long-range-order als die fundamentalere Definition für Bose-Einstein-Kondensation anzusehen ist.

Aus beiden vorgestellten Konzepten folgt, dass ein Bose-kondensiertes System Phasenkohärenz aufweist [7]. Die Annahme einer gebrochenen Eichsymmetrie macht dies intuitiv sofort verständlich; es ist ja gerade die Phase der makroskopischen Wellenfunktion $\langle \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle$, deren Symmetrie gebrochen wurde. Die Phasenkohärenz von $\langle \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle$ wird natürlich durch den inkohärenten Beitrag von thermischen Anregungen modifiziert. Bei Temperaturen weit unterhalb der Übergangstemperatur reicht allerdings die makroskopische Wellenfunktion zur Beschreibung fast aller Eigenschaften eines Bose-Einstein-Kondensats aus. Es stellt sich dann die Frage, ob unabhängige Bose-Einstein-Kondensate zur Interferenz gebracht werden können.

Interferenz von Bose-Einstein-Kondensaten

In einem spektakulären Experiment haben Ketterle et al. [8] gezeigt, dass zwei unabhängige Bose-Einstein-Kondensate tatsächlich miteinander interferieren können. Beim Überlappen der beiden Kondensate konnten Interferenzstreifen beobachtet werden, deren Struktur mit theoretischen Rechnungen in hervorragender Weise übereinstimmt [145, 165, 196]. Diese Beobachtung lässt sich zwar unter der Annahme einer gebrochenen Eichsymmetrie und der Zuordnung einer festen Phase für jede Einzelrealisierung der beiden Bose-Einstein-Kondensate sofort verstehen, doch gibt es einige Gründe die gegen diese Annahme sprechen [122, 148]. So gibt es für Bosegase – im Gegensatz zum äußeren Magnetfeld bei Ferromagneten – kein physikalisch

reales Hilfsfeld (siehe aber z.B. [96]), das man zur Modellierung der Symmetriebrechung heranziehen könnte. Des Weiteren sind Zustände mit einer kohärenten Überlagerung verschiedener Teilchenzahlen, wie sie bei der üblichen Beschreibung der Symmetriebrechung im großkanonischen Ensemble verwendet werden [148], nicht in Einklang zu bringen mit Superauswahlregeln für massebehaftete Teilchen [80, 200]. Letztere besagen gerade, dass in der Natur nur Zustände mit genau definierter Teilchenzahl vorkommen. Im mikrokanonischen Ensemble hingegen ist zwar die Teilchenzahl genau festgelegt, der Grundzustand $|N\rangle$ ist dann allerdings invariant unter Eichtransformationen, sodass es die für spontane Symmetriebrechung notwendigen entarteten Grundzustände hier nicht gibt.

Um neben dem trotz allem sehr erfolgreichen Konzept der gebrochenen Eichsymmetrie noch einen weiteren theoretischen Zugang zu den Interferenzexperimenten zu finden, haben mehrere Autoren [37, 42, 108, 148] versucht, mit Hilfe quantenoptischer Methoden die Interferenzfähigkeit von Bose-Einstein-Kondensaten, die verwandt ist mit der Interferenzfähigkeit von Lasern, zu untersuchen. Es zeigt sich, dass selbst zwei Kondensate in Fockzuständen $|N_1\rangle \otimes |N_2\rangle$, die eine völlig unbestimmte Phase besitzen, miteinander interferieren können. Die Interferenz entsteht dabei bei der Messung selbst; sie entspricht der Symmetriebrechung der *relativen* Phase zwischen den Kondensaten. Dies ist möglich, weil die Herkunft der im Lauf der Messung registrierten Teilchen und damit auch die Differenz $N_1 - N_2$ der Teilchenzahlen nicht bekannt ist und sich das anfängliche Produkt zweier Fockzustände in einen komplizierten verschränkten Zustand verwandelt. Schon wenige registrierte Atome legen die Phase des Interferenzmusters bei einem einzelnen Interferenzexperiment fest [42], diese Phasenlage variiert aber von Realisierung zu Realisierung, sodass im Ensemblemittel die Interferenzen ausgewaschen werden.

1.3 Schwach wechselwirkendes Bosegas

Die Physik schwach wechselwirkender Bosegase ist seit den 40er Jahren des 20. Jahrhunderts Gegenstand vor allem theoretischer Untersuchungen [74]. Bis zur erstmaligen Realisierung von Bose-Einstein-Kondensation in atomaren Gasen [6, 28, 48] im Jahre 1995 gab es auch kein experimentelles System, an dem die bis dahin schon sehr gut ausgearbeitete Theorie wirklich überprüft werden konnte. Allerdings hatten sich die meisten Arbeiten bis 1995 nur mit Bose-Einstein-Kondensation in räumlich homogenen Systemen beschäftigt, Ausnahmen bilden z.B. [63], wo die Möglichkeit eines inhomogenen Kondensats diskutiert wird, oder [9, 10, 49], die unter anderem die Kondensation in harmonischen Fallen zum Thema haben.

Im folgenden werden die wesentlichen und für die vorliegende Arbeit relevanten Ergebnisse dargestellt. Diesen Betrachtungen liegt der Hamiltonoperator aus Gl. (1.26) zugrunde, wobei für das Wechselwirkungspotential $U(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ eine einfache Näherung verwendet wird, die sich als völlig ausreichend für die Beschreibung der Situation in den Fallenexperimenten erwiesen hat. Für ein kaltes, schwach wechselwirkendes Bosegas reicht es aus, die so genannte *s-Wellen-Streuung* zu betrachten, die vollständig durch die *s-Wellen-Streulänge* a_0 beschrieben wird. Genügt die Dichte $n(\mathbf{x})$ des Gases der Bedingung

$$n(\mathbf{x})a_0^3 \ll 1, \quad (1.37)$$

ist also der mittlere Abstand der Teilchen im Gas durchschnittlich viel größer als die Streulänge, so kann man $U(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ durch das *Pseudopotential*

$$U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = U_0\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.38)$$

annähern mit der Wechselwirkungsstärke

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_0}{M}. \quad (1.39)$$

Ein stark verdünntes, kaltes Bosegas wird also durch den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V(\mathbf{x}) \right\} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{U_0}{2} \int d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (1.40)$$

beschrieben.

1.3.1 Mean-Field-Näherung und Anregungsspektrum

Der Vorschlag Bogoliubovs [25], den Feldoperator $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ in einen komplexwertigen Anteil, der das Kondensat beschreibt, und einen fluktuierenden Operatoranteil zu zerlegen, um die Anregungen eines räumlich homogenen Bose-kondensierten Gases zu berechnen, kann auf räumlich inhomogene Systeme ausgedehnt werden [63, 73]. Mit der auf die Kondensatbesetzung N_0 normierten makroskopischen Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ schreibt man $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ als

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (1.41)$$

und erhält damit auch den symmetriebrechenden Erwartungswert $\langle \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle = \psi(\mathbf{x})$.

Setzt man nun diese Zerlegung in den großkanonischen Hamilton-Operator \hat{K} (1.40, 1.28) ein und verwendet eine selbstkonsistente Mean-Field-Näherung für alle Terme in dritter und vierter Ordnung in den Operatoren $\delta\hat{\Psi}$ und $\delta\hat{\Psi}^\dagger$ [73], so erhält man die *Hartree-Fock-Bogoliubov*-Näherung (HFB) für den Hamiltonoperator. Durch eine kanonische Transformation der Fluktuationsoperatoren $\delta\hat{\Psi}$, $\delta\hat{\Psi}^\dagger$

$$\begin{aligned} \delta\hat{\Psi}(\mathbf{x}) &= \sum_j \left(u_j(\mathbf{x}) \hat{\alpha}_j - v_j^*(\mathbf{x}) \hat{\alpha}_j^\dagger \right) \\ \delta\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_j \left(u_j^*(\mathbf{x}) \hat{\alpha}_j^\dagger - v_j(\mathbf{x}) \hat{\alpha}_j \right), \end{aligned} \quad (1.42)$$

wie sie erstmals von Bogoliubov [25] verwendet wurde, lässt sich \hat{K} diagonalisieren. Die Funktionen $u_j(\mathbf{x})$ und $v_j(\mathbf{x})$ beschreiben die räumliche Struktur der *Quasiteilchen* genannten Anregungen, die durch die Operatoren $\hat{\alpha}_j$, $\hat{\alpha}_j^\dagger$ vernichtet bzw. erzeugt werden. Diese Quasiteilchen beschreiben für kleine Energien Dichtefluktuationen des Kondensats und entsprechen damit den Phonon-Anregungen eines räumlich homogenen Gases [25]. Quasiteilchen höherer Energie repräsentieren teilchenartige Anregungen. Für \hat{K} erhält man somit

$$\begin{aligned} \hat{K} = & \int d^3\mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} U_0 |\psi(\mathbf{x})|^2 - \mu \right\} \psi(\mathbf{x}) \\ & - \sum_j E_j \int d^3\mathbf{x} |v_j(\mathbf{x})|^2 + \sum_j E_j \hat{\alpha}_j^\dagger \hat{\alpha}_j, \end{aligned} \quad (1.43)$$

dabei sind die E_j die Energien der Quasiteilchen-Anregungen. Die makroskopische Kondensatwellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ und die Modenfunktionen $u_j(\mathbf{x})$ und $v_j(\mathbf{x})$ müssen dabei Lösungen bestimmter Gleichungen sein. Im Folgenden bezeichnen

$$n_c(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2 \quad (1.44)$$

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) = \langle \delta\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\delta\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle \quad (1.45)$$

$$n(\mathbf{x}) = n_c(\mathbf{x}) + \tilde{n}(\mathbf{x}) \quad (1.46)$$

die Kondensatdichte, die Dichte der Anregungen sowie die Gesamtdichte,

$$\tilde{m}(\mathbf{x}) = \langle \delta\hat{\Psi}(\mathbf{x})\delta\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \rangle \quad (1.47)$$

sei die so genannte *anomale* Dichte der Quasiteilchen-Anregungen.

Für die Kondensatwellenfunktion gilt dann die Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M} + V(\mathbf{x}) + U_0 [n_c(\mathbf{x}) + 2\tilde{n}(\mathbf{x})] \right) \psi(\mathbf{x}) + U_0\tilde{m}(\mathbf{x})\psi^*(\mathbf{x}) = \mu\psi(\mathbf{x}), \quad (1.48)$$

die auch als verallgemeinerte *Gross-Pitaevskii*-Gleichung bezeichnet wird (siehe Abschnitt 1.3.2). Die Modenfunktionen müssen die so genannten *Bogoliubov-de Gennes*-Gleichungen erfüllen [73]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u_j(\mathbf{x}) - U_0 [\psi^2(\mathbf{x}) + \tilde{m}(\mathbf{x})]v_j(\mathbf{x}) &= E_j u_j(\mathbf{x}) \\ \mathcal{L}v_j(\mathbf{x}) - U_0 [\psi^{*2}(\mathbf{x}) + \tilde{m}^*(\mathbf{x})]u_j(\mathbf{x}) &= -E_j v_j(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.49)$$

mit

$$\mathcal{L} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M} + V(\mathbf{x}) + 2U_0 n(\mathbf{x}) - \mu. \quad (1.50)$$

Hat man diese Gleichungen gelöst, so sind die Dichten $\tilde{n}(\mathbf{x})$, $\tilde{m}(\mathbf{x})$ bei der Temperatur T ($\beta = 1/(kT)$) durch

$$\tilde{n}(\mathbf{x}) = \sum_j (|u_j(\mathbf{x})|^2 + |v_j(\mathbf{x})|^2) N_{\text{Bose}}(E_j) + |v_j(\mathbf{x})|^2 \quad (1.51)$$

$$\tilde{m}(\mathbf{x}) = \sum_j u_j(\mathbf{x})v_j^*(\mathbf{x})(2N_{\text{Bose}}(E_j) + 1) \quad (1.52)$$

gegeben, mit dem Bose-Faktor $N_{\text{Bose}} = \frac{1}{e^{\beta E_j} - 1}$. Die Gleichungen (1.48, 1.49, 1.51, 1.52) bilden zusammen mit der Normierung

$$N = \int d^3\mathbf{x} n(\mathbf{x}) \quad (1.53)$$

der Gesamtdichte auf die Teilchenzahl ein geschlossenes System, dass iterativ gelöst werden kann. Vernachlässigt man dabei die anomale Dichte $\tilde{m}(\mathbf{x})$, so spricht man von der *Popov*-Näherung (HFB-Popov) [53, 73, 100]. Diese liefert für Temperaturen unterhalb von $0.6T_c$ Ergebnisse für die Quasiteilchenenergien E_j , die sehr gut mit den für kollektive Anregungen

gemessenen Anregungsfrequenzen übereinstimmen. Selbst wenn man die anomale Dichte hinzufügt [99], beschreiben die Ergebnisse für $T > 0.6T_c$ nur teilweise die experimentellen Resultate; es wird vermutet, dass die implizite Annahme einer statischen thermischen Wolke für diese Temperaturen nicht mehr gerechtfertigt ist. In diesem Zusammenhang spielen natürlich auch Dämpfungseffekte zwischen Kondensat und thermischer Wolke eine große Rolle, auf die hier aber nicht näher eingegangen werden soll.

Ein weitere Möglichkeit, Aussagen über das Anregungsspektrum zu gewinnen, besteht darin, auch die Quasiteilchendichte $\tilde{n}(\mathbf{x})$ in den Gleichungen (1.48) und (1.49) zu vernachlässigen [63]. Diese Näherung ist für schwach wechselwirkende Bosegase bei sehr kleinen Temperaturen $T \approx 0$ gerechtfertigt: Wie man aus Gl. (1.51) erkennt, liegen zwar selbst bei $T = 0$ noch angeregte Quasiteilchen vor, die durch den zweiten Summanden beschrieben werden. Dieser auch bei $T = 0$ nicht kondensierte Anteil

$$N - N_0 = \sum_j \int d^3\mathbf{x} |v_j(\mathbf{x})|^2 \quad (1.54)$$

wird als *quantum depletion* bezeichnet; wie Rechnungen in Übereinstimmung mit Experimenten zeigen [56], beträgt dieser bei schwach wechselwirkenden Gasen aber nur weniger als ein Prozent der Gesamtteilchenzahl, womit die Näherung, $\tilde{n}(\mathbf{x})$ zu vernachlässigen, gerechtfertigt ist. Diese Beobachtung entspricht auch dem analogen Resultat bei homogenen Gasen [64]

$$\frac{N - N_0}{N} \Big|_{T=0} = \frac{8}{3} \left(\frac{na_0^3}{\pi} \right)^{1/2}. \quad (1.55)$$

Hier erkennt man, dass der Parameter na_0^3 aus Gl. (1.37) entscheidend für die richtige theoretische Beschreibung dünner, schwach wechselwirkender Gase ist. Im Gegensatz zu diesen ist na_0^3 bei suprafluidem ^4He sehr groß, der Kondensatanteil liegt bei ^4He demgemäß auch nur bei etwa 9% [40, 158].

1.3.2 Gross-Pitaevskii-Gleichung

Vernachlässigt man in Gl. (1.48) die normale und anomale Dichte der nicht kondensierten Atome, so erhält man die *Gross-Pitaevskii-Gleichung* [76, 160]

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V(\mathbf{x}) + U_0 |\psi(\mathbf{x})|^2 \right) \psi(\mathbf{x}) = \mu \psi(\mathbf{x}) \quad (1.56)$$

für die Kondensatwellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$. Wie im vorherigen Abschnitt schon angedeutet wurde, lässt sich die Physik eines dünnen, schwach wechselwirkenden Bosegases bei Temperaturen um $T = 0$ gut allein mit dieser Gleichung beschreiben. Linearisiert man die zeitabhängige Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V(\mathbf{x}) + U_0 |\psi(\mathbf{x})|^2 \right) \psi(\mathbf{x}) \quad (1.57)$$

in den Fluktuationen $\delta\psi(\mathbf{x})$ um die Lösung der zeitunabhängigen Gl. (1.56), so erhält man (zunächst noch in etwas anderer Form) wieder die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen (1.49) in der oben beschriebenen Näherung.

Welche Rolle spielen nun die Wechselwirkungen zwischen Atomen für die Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung? Trotz der starken Verdünnung der Gase, die durch die Bedingung $na_0^3 \ll$

1 quantifiziert wird, kann sich die Kondensatwellenfunktion stark von der Grundzustandswellenfunktion im Fallenpotential $V(\mathbf{x})$ ohne Wechselwirkung unterscheiden. Hier und im Folgenden sollen vor allem die experimentell relevanten harmonischen Fallen mit $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2|\mathbf{x}|^2$ untersucht werden. Um den Einfluss der Mean-Field-Wechselwirkung zu studieren, vergleicht man die mittlere Wechselwirkungs- oder Mean-Field-Energie $E_{\text{mf}} = NU_0\bar{n}$, die durch den nichtlineare Term der Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben wird, mit der Grundzustandsenergie von N Teilchen im harmonischen Oszillator-Potential $E_{\text{ho}} = N\hbar\omega$. Schätzt man die mittlere Dichte mittels der typischen Länge $a_{\text{ho}} = \sqrt{\hbar/M\omega}$ des harmonischen Oszillators zu $\bar{n} = N/a_{\text{ho}}^3$ ab, so ergibt sich

$$\frac{E_{\text{mf}}}{E_{\text{ho}}} \approx N \frac{a_0}{a_{\text{ho}}}. \quad (1.58)$$

Da in typischen Experimenten $a_0/a_{\text{ho}} \approx 10^{-3}$ gilt, reichen schon wenige 1000 Atome aus, um den Mean-Field-Anteil der Gesamtenergie über die Oszillatorenergie dominieren zu lassen. Trotz der nur schwachen Wechselwirkung kann es also zu starken Wechselwirkungseffekten kommen, für typische Teilchenzahlen $N > 10^5$ lässt sich die Gross-Pitaevskii-Gleichung sogar direkt lösen: In der so genannten *Thomas-Fermi-Näherung* wird der kinetische Teil in Gl. (1.56) vernachlässigt und man erhält für die Wellenfunktion

$$\psi_{\text{TF}}(\mathbf{x}) = \max \left(\sqrt{\frac{\mu - V(\mathbf{x})}{U_0}}, 0 \right). \quad (1.59)$$

Aus der Normierung von $\psi(\mathbf{x})$ auf die Anzahl N der Teilchen ergibt sich dann auch das chemische Potential zu

$$\mu_{\text{TF}} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(15N \frac{a_0}{a_{\text{ho}}} \right)^{2/5}. \quad (1.60)$$

Die Lösung (1.59) führt zu einer Dichte-Verteilung

$$|\psi_{\text{TF}}(\mathbf{x})|^2 = \frac{1}{U_0} \left(\mu - \frac{1}{2}m\omega^2|\mathbf{x}|^2 \right), \quad (1.61)$$

die naheliegenderweise „invertierte Parabel“ genannt wird. Wie man in Abb. 1.1 erkennt, kann diese Kondensatdichteverteilung sehr viel weiter ausgedehnt sein als der Grundzustand des harmonischen Oszillators. Für den Radius des Kondensats erhält man aus Gl. (1.61) und (1.60)

$$r_{\text{TF}} = a_{\text{ho}} \left(15N \frac{a_0}{a_{\text{ho}}} \right)^{1/5}. \quad (1.62)$$

Die Vernachlässigung des kinetischen Terms in der Gross-Pitaevskii-Gleichung führt in TF-Näherung zu einem unphysikalischen Verhalten der Kondensatdichte bei r_{TF} . Die vollständige Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung besitzt hingegen keinen Knick sondern nimmt stetig differenzierbar ab.

Die bisherigen Resultate wurden der Einfachheit halber nur für radialsymmetrische harmonische Fallen angegeben, in allen Fällen gibt es auch Verallgemeinerungen auf im Experiment oft vorliegende zylindersymmetrische Fallen oder Fallen ohne eine Symmetrie (siehe dazu z.B. [45]). Auf die Beschreibung von mehreren Kondensaten verschiedener Spezies und deren Kopplung wird in Kapitel 3 eingegangen.

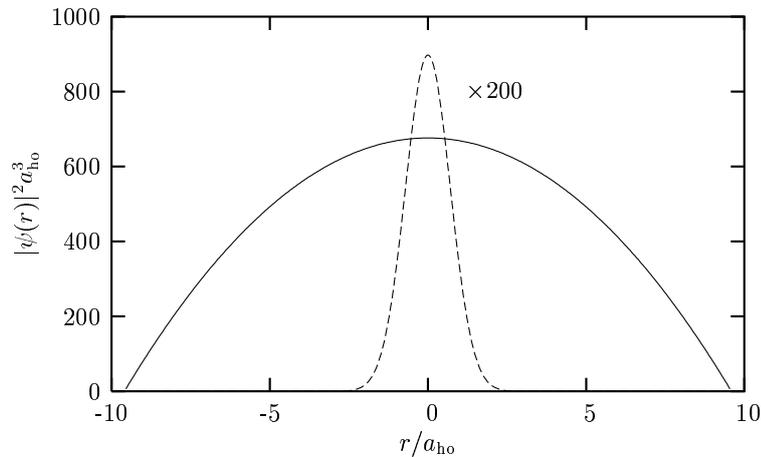


Abbildung 1.1: Dichteverteilung eines Bose-Einstein-Kondensats mit und ohne Wechselwirkung. Die radiale Dichteverteilung wurde in Thomas-Fermi-Näherung (durchgezogene Linie) für 10^6 ^{87}Rb -Atome mit der s -Wellen-Streulänge $a_0 = 110 a_{\text{Bohr}}$ berechnet, zum Vergleich wird das Dichteprofil des Grundzustandes eines idealen Bosegases gezeigt (gestrichelte Linie, um einen Faktor 200 nach unten skaliert), ebenfalls für $N = 10^6$ Atome. Die Fallenfrequenz beträgt $\omega = 2\pi \times 100$ Hz, die Oszillatorlänge hat dann den Wert $a_{\text{ho}} \approx 1.1 \mu\text{m}$.

1.4 Niedrigdimensionale Systeme

Die Physik der kondensierten Materie in Systemen, die (effektiv) weniger als drei Dimensionen aufweisen, unterscheidet sich oft signifikant von den aus der dreidimensionalen Welt bekannten Phänomenen, hierbei sei z.B. an den Quanten-Hall-Effekt und die damit verwandte Anyonen-Physik in zwei Dimensionen erinnert. Es liegt daher nahe, auch die Physik von schwach wechselwirkenden Bosegasen in ein und zwei Dimensionen näher zu untersuchen.

1.4.1 Homogene Systeme

Bose-Einstein-Kondensation bei endlicher Temperatur ist in homogenen Systemen für ein- und zweidimensionale Systeme nicht möglich. Für ideale Gase folgt dies aus der zu Abschnitt 1.1.1 analogen Betrachtung, bei der sich zeigt, dass im Gegensatz zu drei Dimensionen die Anzahl der Teilchen in angeregten Zuständen nicht beschränkt ist. Somit „kondensieren“ homogene Gase für $D \leq 2$ nur bei $T = 0$. Dies gilt auch für wechselwirkende Gase, wie Hohenberg [88] gezeigt hat. Mermin und Wagner [130] haben eine ähnliche Aussage für ferro- bzw. antiferromagnetische Modelle bewiesen. Das nach diesen Autoren benannte *Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem* besagt, dass in $D \leq 2$ eine spontane Symmetriebrechung nicht zur Ausbildung langreichweitiger Ordnung und damit auch nicht zu einem Bose-Einstein-Kondensat führen kann. Eine solche Ordnung würde – anschaulich gesprochen – bei $T > 0$ von energetisch niedrigliegenden, langwelligen thermischen Anregungen sofort zerstört werden.

Kosterlitz-Thouless Übergang

Das Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem verbietet für zweidimensionale Systeme nur die Existenz eines Phasenübergangs in eine Phase mit langreichweitiger Ordnung. Berezinskii [17],

Kosterlitz und Thouless [117] haben gezeigt, dass trotzdem ein Übergang in eine neue Phase existieren kann, in der die Dichtematrix $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ für $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ nur relativ langsam auf null abfällt. Statt eines exponentiellen Abfalls mit einer endlichen Korrelationslänge liegt ein algebraischer Abfall der Form

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-\frac{1}{2n\lambda_{\text{th}}^2}} \quad \text{für } |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty \quad (1.63)$$

vor, wobei n die Dichte (Teilchen pro Fläche) bezeichnet. Aufgrund der langsam abfallenden Korrelation zwischen zwei entfernten Punkten spricht man von lokalen *Quasikondensaten*, die sich nur über einen Teil des Gesamtsystems ausbreiten. Die Phasenkohärenz zwischen solchen Bereichen wird durch das Auftreten von Vortex-Antivortex-Paaren gestört, die für $T \rightarrow 0$ natürlich verschwinden, sodass die Quasikondensate zu einem das ganze System umfassenden Kondensat werden.

Am Phasenübergang, der auch *KT-Übergang* genannt wird, werden diese Paare aufgebrochen, in der Hochtemperaturphase liegt somit eine Art „Gas“ von Vortizes und Anti-Vortizes vor. Nelson und Kosterlitz [150] haben gezeigt, dass die suprafluide Dichte n_s von ihrem endlichen Wert unterhalb der Übergangstemperatur sprunghaft auf Null abfällt, für diesen Sprung gilt die universelle Beziehung

$$n_s \lambda_{\text{th}}^2 = 4, \quad (1.64)$$

die in suprafluiden ^4He -Filmen auch experimentell nachgewiesen werden [20] konnte. Aufgrund der topologischen Eigenschaften von Vortizes spricht man von einer topologischen Ordnung der suprafluiden Phase.

1.4.2 Oblate und prolate harmonische Fallen

Der Kosterlitz-Thouless-Übergang in homogenen zweidimensionalen Systemen ist nur ein Beispiel für vom 3D-Verhalten abweichende Phänomene in niedrigen Dimensionen. Die Untersuchungen von Bose-Einstein-Kondensaten haben gezeigt, dass auch in harmonischen Fallen interessante Effekte auftreten können. Im Gegensatz zum homogenen zweidimensionalen Fall tritt in einer solchen Falle Bose-Einstein-Kondensation eines idealen Gases bei einer endlichen Übergangstemperatur auf [9]

$$kT^{2D} = \hbar\omega \sqrt{\frac{N}{\zeta(2)}}, \quad \zeta(2) = \pi^2/6 \quad (1.65)$$

Shevchenko [177] konnte zeigen, dass in schwach wechselwirkenden Gasen nur bei Temperaturen $T \ll T^{2D}$ wirklich ein Bose-Einstein-Kondensat vorliegt. Der Übergang selber ist vielmehr ein KT-Übergang, an dem der suprafluide Anteil wie beim homogenen System sprunghaft ansteigt. Die Übergangstemperatur ist für schwach wechselwirkende Gase annähernd gleich T^{2D} .

Die experimentelle Untersuchung niedrigdimensionaler Systeme basiert naturgemäß auf dreidimensionalen Systemen, die in einer oder zwei Dimensionen in ihrer Ausdehnung stark reduziert sind. 1998 gelang z.B. der (indirekte) Nachweis eines KT-Übergangs [170] eines schwach wechselwirkenden Bosegases in einer Schicht spinpolarisierten Wasserstoffs, der auf

ein Helium-Substrat aufgebracht worden war. Der zweidimensionale Charakter des Wasserstoff resultiert dabei aus der Tatsache, dass es nur einen Bindungszustand für Wasserstoffatome auf einer Helium-Oberfläche gibt. In den Atomfallen, die zur Realisierung der Bose-Einstein-Kondensation in Alkaligasen verwendet werden, wurde eine ähnliche Situation bisher noch nicht erreicht. Allerdings existieren auf dem Weg zu extrem oblaten oder prolaten („zigarrenförmigen“) Fallen noch weitere interessante Effekte. In zigarrenförmigen Fallen ist es möglich, dass die Kondensation eines idealen Gases in den Grundzustand für endliche Teilchenzahlen in zwei Schritten abläuft. In [192] wird gezeigt, dass für $\omega_x = \omega_y \gg \omega_z$ drei verschiedene Szenarien möglich sind. Falls die transversale Fallenfrequenz $\omega_{x,y}$ viel größer ist als die Übergangstemperatur in drei Dimensionen

$$kT^{3D} = \hbar \left(\frac{\omega_x \omega_y \omega_z N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}, \quad (1.66)$$

so erfolgt schon bei $kT \approx \hbar\omega_{x,y} \gg kT^{3D}$ ein „Ausfrieren“ der transversalen Bewegung, mithin kann bei kT^{3D} keine Bose-Kondensation mehr einsetzen. Das weitere Verhalten wird nun durch die Übergangstemperatur eines endlichen eindimensionalen Gases im harmonischen Potential bestimmt, für die näherungsweise

$$kT^{1D} \approx \hbar\omega_z \frac{N}{\ln(2N)} \quad (1.67)$$

gilt. Für $T^{1D} > T^{3D}$ kondensiert das Gas bei $T = T^{1D}$ direkt in den Grundzustand des Fallenspotentials. Gilt $T^{3D} > T^{1D}$, so tritt der oben schon angedeutete Effekt auf: Bei $kT^{3D} > \hbar\omega_{x,y}$ kondensieren die Atome zunächst nur in den transversalen Grundzustand, d.h. die Anzahl $N_{1D} = \sum_{n_z=0}^{\infty} N_{0,0,n_z}$ der Atome mit Quantenzahlen $n_x = n_y = 0$ wird für $T < T^{3D}$ makroskopisch. Die Besetzung N_0 des absoluten Grundzustandes bleibt aber zunächst bei null, erst für $T \leq T^{1D}$ steigt auch sie wie bei einem echt eindimensionalen System an. Es gibt also zwei Stufen der Kondensation, die sich natürlich auch auf die im Experiment leicht messbaren longitudinalen und transversalen Dichteverteilungen auswirken. Es ist zu erwarten, dass auch ein schwach wechselwirkendes Gas dieses Verhalten zeigt, bisher gibt es dazu allerdings keine genaueren Untersuchungen. Die in Kapitel 4 vorzustellenden Monte-Carlo-Methoden ermöglichen eine solche Untersuchung. Es sei noch bemerkt, dass auch in oblaten, quasi-2D Fallen Zwei-Stufen-Kondensation auftreten kann, allerdings in einem 2D-Kastenpotential [192]. Experimente in dieser Richtung werden vielleicht in naher Zukunft möglich sein [69, 84, 156].

1.5 Bose-Einstein-Kondensation im Experiment

In der Zeit zwischen den grundlegenden Arbeiten von Bose und Einstein [27, 58, 59] in den 20er Jahren des letzten Jahrhunderts bis zu den Aufsehen erregenden Experimenten im Jahr 1995 [6, 28, 48] gab es nur wenige experimentelle Realisierungen der Bose-Einstein-Kondensation mit meist indirekten Nachweismethoden. Im ersten Teil dieses Abschnitts werden die wesentlichen Ergebnisse aus dieser Zeit zusammengefasst, Schwerpunkt bildet dabei das suprafluide ^4He . Auf das verwandte Phänomen der Supraleitung in Festkörpern wird ebenfalls kurz eingegangen. In Halbleitern konnte Bose-Einstein-Kondensation von Exzitonen, also von wasserstoffähnlichen Elektronen-Loch-Paaren, nachgewiesen werden. Nähere Erläuterungen zu diesem Thema finden sich in [75].

Neben den experimentell gesicherten Erkenntnissen wurden in der Theorie der Elementarteilchen Modelle entwickelt, die sehr eng mit den Begriffen Bose-Einstein-Kondensation und ODLRO verknüpft sind. Bisher konnten nur spärliche, indirekte experimentelle Beweise für diese Vorstellungen gefunden werden. Auch auf diese Phänomene wird im Folgenden eingegangen. Gemäß der Entwicklung in den letzten Jahren werden im Anschluss an diese Betrachtungen die Experimente mit atomaren Gasen ausführlicher beschrieben.

1.5.1 Vor 1995

Helium-4

Obwohl die Theorie der Bose-Einstein-Kondensation zunächst nur für ideale bzw. später für schwach wechselwirkende, verdünnte Gase formuliert wurde, waren Experimente zu diesem Phänomen über lange Zeit auf die kondensierte Materie beschränkt. Das prominenteste Beispiel hierfür ist der Übergang von Helium-4 von einer normalflüssigen in eine so genannte *suprafluide* Phase bei $T = 2.17\text{ K}$ [3, 109], die man heute ${}^4\text{He II}$ nennt. Die Suprafluidität drückt sich vor allem durch einen reibungsfreien Fluss über sehr lange Zeiten ohne jeden antreibenden Druck aus. Trägt man die Wärmekapazität am Phasenübergang als Funktion der Temperatur auf, so erkennt man ein singuläres Verhalten; gemäß der Form dieser Kurve spricht man auch vom λ -Übergang.

Eine eingehende Darstellung der Eigenschaften von suprafluidem Helium ist z.B. in [188] zu finden, im Folgenden soll die historische Entwicklung des Verständnisses der Suprafluidität von ${}^4\text{He}$ unter Berücksichtigung der in späteren Kapiteln zu diskutierenden Phänomene nur skizziert werden.

Schon bald nach der Entdeckung der Suprafluidität stellte London eine Verbindung zwischen der Bose-Einstein-Kondensation idealer Gase und ${}^4\text{He II}$ her [124, 125]. Seine Vorstellungen führten Tisza zum Zwei-Flüssigkeiten-Modell [190], das die zunächst paradox erscheinenden Eigenschaften von ${}^4\text{He II}$ erklärte: Neben dem schon erwähnten Fluss durch dünne Kapillare ohne Druckabfall ergaben direkte Messungen der Viskosität durchaus endliche Werte. In Analogie zu den Eigenschaften eines Kondensats eines idealen Bosegas schlug Tisza vor, dass ${}^4\text{He II}$ aus zwei Komponenten zusammengesetzt sei, einem normalflüssigen Anteil der Dichte ρ_n mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_n und einer suprafluiden Komponente ρ_s mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_s . Für den gesamten Teilchenstrom erhält man damit

$$\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s, \quad (1.68)$$

dabei ist alleine der suprafluide Anteil für den reibungslosen Fluss verantwortlich. Mithilfe dieses Modells wurde später eine spezielle Form von kollektiven Anregungen in ${}^4\text{He II}$ vorhergesagt, der so genannte *zweite Schall*. Diese Anregungen propagieren nicht wie der gewöhnliche *erste Schall* als Dichtewellen durch die Flüssigkeit sondern als Temperaturwellen, bei denen bei konstanter Dichte das Verhältnis aus suprafluidem und normalem Anteil oszilliert.

Da Helium kein ideales Bosegas ist, musste für eine Erklärung der Suprafluidität ein neues mikroskopisches Modell gefunden werden. Landau formulierte das Zwei-Flüssigkeiten-Modell neu [119, 120], indem er die normale Komponente durch ein Gas von so genannten Quasiteilchen mit Energien E_k beschrieb, die sich für kleine Wellenzahlen k wie Phononen verhalten. In diesem Modell lässt sich zeigen, dass unterhalb einer *kritischen Geschwindigkeit* $v_c = \min\{E_k/(\hbar k)\}$ der suprafluide Fluss durch Streuung an einem Hindernis und damit

durch Erzeugung von normalflüssigen Quasiteilchen nicht gestört werden kann. Diese Erklärung basiert gänzlich auf der Dispersionsrelation der elementaren Anregungen und bezieht sich nicht auf das Vorhandensein eines Bose-Einstein-Kondensats. Eine wirklich mikroskopische Erklärung für ein phononenartiges Spektrum bei kleinen Impulsen lieferte erst die Arbeit von Bogoliubov über schwach wechselwirkende Bosegase (siehe Abschnitt 1.3.1). Allerdings ist diese Theorie auf ${}^4\text{He}$ nur beschränkt anwendbar, da die Wechselwirkungen zwischen Heliumatomen nicht schwach sind (in dem Sinne, dass der Gasparameter $na^3 \ll 1$ wäre, flüssiges Helium ist kein dünnes Gas). Wie schon erwähnt, beträgt der Kondensatanteil in ${}^4\text{He}$ II bei $T = 0$ nur ca. 9%. Dieser Wert ist experimentell sehr schwer zu ermitteln, er wurde daher vor allem aus sehr genauen Pfadintegral-Monte-Carlo-Rechnungen [39] gewonnen. Der Zusammenhang zwischen suprafluidem Anteil ρ_s/ρ , der bei $T = 0$ gleich eins ist, und dem Kondensat, das bei $T = 0$ teilweise entvölkert sein kann, ist somit komplizierter als London dies wohl zunächst annahm. Das Auftreten von Suprafluidität kann durch Bose-Einstein-Kondensation erklärt werden, ist aber nicht notwendig daran gebunden. Eine Diskussion dieser Problematik findet sich z.B. in [97].

Eine für das Verständnis von ${}^4\text{He}$ II besonders wichtige Klasse von Experimenten sind die so genannten *Experimente mit rotierenden Eimern* (engl. *rotating bucket*), mit denen die Rotationseigenschaften von supraflüssigem Helium untersucht. Beschreibt man den suprafluiden Anteil mittels einer makroskopischen Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|e^{i\phi(\mathbf{x})}$, so folgt für das suprafluide Geschwindigkeitsfeld

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \phi(\mathbf{x}), \quad (1.69)$$

d.h. \mathbf{v}_s ist proportional zum Gradienten der Phase der makroskopischen Wellenfunktion (m ist die Masse des Heliumatoms). In einem topologisch einfach zusammenhängenden Gebiet ist \mathbf{v}_s somit rotationsfrei

$$\nabla \times \mathbf{v}_s = 0. \quad (1.70)$$

In einem rotierenden Eimer sollte aus diesem Grund $\mathbf{v}_s = 0$ gelten, die suprafluide Flüssigkeit rotiert also nicht mit dem Eimer. Im Experiment wird aber eine nicht verschwindende suprafluide Geschwindigkeit beobachtet, demgemäß gibt es Zustände mit $\nabla \times \mathbf{v}_s \neq 0$ zumindest an singulären Stellen, man nennt sie *Vortizes* (Wirbelfäden). Ein einzelner Vortex entspricht einem Wirbel in der Flüssigkeit mit $\nabla \times \mathbf{v}_s \neq 0$ in dessen Mitte. Fordert man, dass die Phase $\phi(\mathbf{x})$ der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ eindeutig definiert ist, so kann man mit Hilfe des Satzes von Stokes für Linienintegrale um das Vortexzentrum folgende Quantisierungsbedingung herleiten

$$\frac{m}{\hbar} \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v}_s = 2\pi\kappa, \quad \kappa \in \mathbb{Z}. \quad (1.71)$$

Für einen zylindersymmetrischen Vortex erhält man hieraus die suprafluide Geschwindigkeit

$$v_s(r) = \frac{\hbar}{m} \frac{\kappa}{r} \quad (1.72)$$

und somit einen quantisierten Drehimpuls $L = mrv_s = \hbar\kappa$ pro Heliumatom.

Die Eigenschaften von quantisierten Vortizes in ${}^4\text{He}$ II wurden experimentell eingehend untersucht (siehe z.B. [188]). Mittlerweile ist es mehreren Gruppen gelungen, Vortexzustände auch in gefangenen, dünnen Bosegasen zu erzeugen (siehe auch Abschnitt 1.5.2).

Supraleitung

Neben der Suprafluidität in Helium-4 gibt es noch einen weiteren „Super“-Effekt, die *Supraleitung*. Mit diesem Begriff bezeichnet man den widerstandslosen Fluss des elektrischen Stroms in einem Festkörper bei tiefen Temperaturen. Elektronen nahe der Fermi-Fläche erfahren eine effektive Wechselwirkung durch den Austausch von Phononen, diese führt für Elektronenpaare mit entgegengesetzten Impulsen und Spins zur Ausbildung einer schwachen Bindung, man spricht von *Cooper-Paaren* (siehe [123]). Diese Paare sind „suprafluid“, fließen also ohne elektrischen Widerstand. Bardeen, Cooper und Schrieffer entwickelten die mikroskopische Theorie zu diesem Effekt [16], die nach ihnen benannte BCS-Theorie. Supraleitung kann als Bose-Einstein-Kondensation von Cooper-Paaren aufgefasst werden, der Erwartungswert des aus Elektronoperatoren zusammengesetzten Paaroperators $\langle \hat{\Psi}_\uparrow(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_\downarrow(\mathbf{x}) \rangle$ hat einen endlichen Wert und dient als makroskopische Wellenfunktion. Die Kohärenz dieses Ordnungsparameters wurde durch die so genannten Josephson-Effekte [123] belegt.

In neueren Untersuchungen über gefangene, dünne Fermi-Gase zeigte sich, dass auch neutrale Atome Cooper-Paare ausbilden können [184]. In Kapitel 2.2 über Fermi-Gase wird dieses Phänomen etwas genauer beschrieben.

Kondensationsphänomene in der Elementarteilchenphysik

Die spontane Brechung von Symmetrien ist ein zentrales Thema in der Theorie der Elementarteilchen [169, 198]. Dieser Begriff hängt eng mit der Kondensation von Bosonen zusammen (siehe Abschnitt 1.2.2); es gibt eine Reihe von Modellen, bei denen die Brechung einer Symmetrie von der Kondensation bestimmter Elementarteilchen (oder von weniger elementaren Quasiteilchen) begleitet wird. Ein sehr prominentes Beispiel ist das Higgs-Boson, dessen Quantenfeld bei der Brechung der Eichsymmetrie der elektroschwachen Wechselwirkung einen endlichen Erwartungswert erhält, also „kondensiert“. Die physikalische Natur solcher Phasenübergänge soll an zwei Beispielen etwa näher erläutert werden.

Ein sehr wichtiges Konzept der Quantenchromodynamik (QCD) ist die Brechung der globalen chiralen Symmetrie. In einer reduzierten Version der QCD, in der man nur die zwei häufigsten und leichtesten Quarks, *up* und *down*, berücksichtigt, kann man deren Ruhemassen vernachlässigen. Dies führt zur so genannten *chiralen* Symmetrie, die links- in rechtshändige Quarks überführt. In der Natur ist diese Symmetrie aber nicht vorhanden – es gibt keine passenden Paare von Teilchen gleicher Masse und verschiedener Parität –, sie muss also gebrochen sein. Das zugehörige Kondensat nennt man *Quark-Kondensat*, es entspricht einer nicht direkt messbaren, endlichen Dichte von Quarks. Die Goldstone-Anregungen dieses Kondensats, die den Quasiteilchen aus Abschnitt 1.3.1 entsprechen, sind die drei Pionen π_0, π^\pm , die, wie man es für Goldstone-Bosonen erwartet, masselos sind (in Realität gilt dies nur näherungsweise, da schon die als masselos angenommenen Quarks sehr kleine Massen besitzen).

Ein weiteres Kondensationsphänomen, das eine der wichtigsten experimentell ungeklärten Fragestellungen der QCD betrifft, ist die Kondensation von chromo-magnetischen Monopolen. Dieser bisher nur theoretisch untersuchte Effekt wurde von t’Hooft und Mandelstam [127, 187] vorgeschlagen, um den dauernden Einschluss von Quarks (engl. *quark-confinement*) zu erklären. Der zugrunde liegende Mechanismus soll im Folgenden etwas näher erläutert werden. In herkömmlichen Supraleitern liegt, wie bereits erwähnt, ein Kondensat von elektrisch geladenen Teilchen, den Cooper-Paaren, vor. Diese sind für den so genannten Meissner-Effekt verantwortlich: Magnetische Felder werden aus einem Supraleiter verdrängt, sodass dieser selbst

feldfrei wird [188]. In Supraleitern zweiter Art kann zwar magnetischer Fluss eindringen, aber nur in Form von dünnen Flusslinien (Abrikosov-Vortizes) ganz ähnlich den Vortizes in rotierendem $^4\text{He II}$. Könnte man ein Paar aus einem magnetischen Monopol und einem Anti-Monopol in einen Supraleiter einbringen, so würde deren Dipolfeld zu einer dünnen Flusslinie zusammengeschnürt, die Energie dieses Paares wäre proportional zum Abstand der Monopole.

t'Hooft und Mandelstam haben ein duales Szenario zur Erklärung des quark-confinements vorgeschlagen. Wenn das QCD-Vakuum aus einem Kondensat von *chromo-magnetisch* geladenen Teilchen bestünde, so würden *chromo-elektrische* Felder zu Flusslinien zusammengeschnürt, das Potential zwischen chromo-elektrischen Ladungen (also Quarks) würde dann wie in Supraleitern zweiter Art linear vom Abstand abhängen, was dem typischen Potential für quark-confinement entspricht. Dieser Effekt wird *dualer Meissner-Effekt* genannt, man spricht auch von dualen Supraleitern. In den letzten Jahren gab es eine ganze Reihe von theoretischen Arbeiten zu diesem Thema [51]. Es ist gelungen, in Gitter-Eichtheorien magnetische Monopol-Operatoren zu konstruieren und deren Erwartungswerte mit Monte-Carlo-Rechnungen numerisch zu berechnen. Es zeigt sich, dass bei kleinen Temperaturen tatsächlich ein Kondensat vom Monopolen vorliegt und dass dieses für das lineare confinement-Potential verantwortlich ist. Bei einer bestimmten endlichen Temperatur verschwindet das Kondensat, man spricht vom *confinement-deconfinement*-Übergang. Oberhalb dieser Temperatur sollte es freie Quarks und Gluonen geben, im Übrigen ist auch die oben erwähnte chirale Symmetrie in diesem Bereich wieder hergestellt.

1.5.2 Bose-Einstein-Kondensation in atomaren Gasen

Historie

Bose-Einstein-Kondensation ist ein rein quantenstatistischer Effekt, sie wurde für ein ideales Bosegas vorhergesagt und die theoretische Analyse ist, wie in Kapitel 1.3 dargelegt, vor allem für schwach wechselwirkende Gase schon vor 40-50 Jahren sehr weit vorangetrieben worden. Dem gegenüber stehen die experimentellen Arbeiten, die sich bis 1995 fast ausschließlich mit stark wechselwirkenden Bosonen in kondensierter Materie beschäftigten, da keine anderen Systeme zur Verfügung standen. Schon sehr früh [85, 186] wurde allerdings auf die Möglichkeit hingewiesen, dass spin-polarisierter atomarer Wasserstoff bis $T = 0$ gasförmig bleiben könnte und deshalb in verdünnter Form ein idealer Kandidat für Bose-Einstein-Kondensation sei. Seit Anfang der 80er Jahre war man in der Lage, spin-polarisierten Wasserstoff einzufangen und zu stabilisieren, es mussten allerdings zunächst noch neue Kühltechniken entwickelt werden, um die Phasenraumdichte zu erhöhen (die technische Entwicklung während der 80er und 90er Jahre wird z.B. in [43, 111] beschrieben). Dabei spielten zwei Techniken eine wesentliche Rolle: Zum einen gelang es, in magnetischen Fallen die so genannte *Verdampfungskühlung* zu realisieren, die salopp gesprochen wie das Kühlen von Kaffee in einer Tasse durch „Wegblasen“ des heißen Wasserdampfs funktioniert. Zum anderen wurde in den 80er Jahren das Einfangen und Kühlen atomarer Wolken durch Laser sehr stark weiter entwickelt [47]. Allerdings erreichte man mit keiner der beiden Methoden die für Bose-Einstein-Kondensation nötigen Phasenraumdichten in der Größenordnung von eins. Für die Kühlung mit Lasern zeigten sich fundamentale Grenzen für die erreichbaren niedrigen Temperaturen, außerdem begrenzt die Reabsorption spontan emittierter Photonen die maximal erreichbare Dichte der atomaren Wolke.

Erst die Kombination beider Techniken, also die Laserkühlung von Atomen in magneto-optischen Fallen und die sich daran anschließende Verdampfungskühlung in einer magnetischen

Falle brachte den Durchbruch: 1995 erreichten drei Gruppen Bose-Einstein-Kondensation mit Alkaliatomen; die JILA-Gruppe um Cornell und Wieman an der University of Colorado in Boulder arbeitete mit Rubidium [6], Wolfgang Ketterle am Massachusetts Institute of Technology (MIT) mit Natrium [48], nur die Gruppe von Hulet an der Rice-University [29] verwendete mit Lithium Atome, die im Gegensatz zu den Rubidium- und Natrium-Isotopen am JILA bzw. MIT eine negative Streulänge besitzen. Aus diesem Grund sind Lithium-Bose-Einstein-Kondensate mit mehr als einigen tausend Atomen instabil. Die weitaus größere Anzahl von experimentellen Ergebnissen wurde mit Rubidium und Natrium erzielt, deren positive Streulänge beliebig große Kondensate ermöglicht. Mittlerweile werden in vielen Labors Kondensate mit einigen Millionen Atomen erzeugt.

1998 wurde Bose-Einstein-Kondensation auch in spin-polarisiertem Wasserstoff erreicht [67]. Im Gegensatz zu den Alkaliexperimenten sind die Nachweis- und Manipulationstechniken bei diesen Experimenten noch sehr eingeschränkt; im Folgenden werden deshalb nur die Techniken für Alkaliatome kurz umrissen.

Techniken zur Herstellung und Nachweis

Seit den ersten erfolgreichen Experimenten haben eine Vielzahl von experimentellen Gruppen Bose-Einstein-Kondensation realisiert (siehe [43]). Die neueren Experimente arbeiten überwiegend mit ^{87}Rb , die Einfang- und Kühltechniken ähneln sich in den meisten Aufbauten. Am Beispiel des Experiments der Hänsch-Gruppe in München soll der prinzipielle Aufbau eines Bose-Einstein-Kondensation-Experiments erläutert werden [22].

Optisches Kühlen Zu Beginn liegen im Experiment nur Rubidium-Atome aus einem „Dispenser“ vor, deren Temperatur ungefähr bei Zimmertemperatur liegt. Um zu einem Bose-Einstein-Kondensat zu gelangen, muss die Phasenraumdichte $n\lambda_{\text{th}}^3$ um ungefähr 20 Größenordnungen anwachsen.

In einem ersten Schritt werden Rubidium-Atome aus dem Hintergrundgas in einer magneto-optischen Falle (MOT) auf Temperaturen um $100\ \mu\text{K}$ abgekühlt. Auf diese Art werden ca. 10^7 Atome gefangen und anschließend mittels verstimmten Lasern optisch in einen Ultrahochvakuum-Bereich transferiert, wo sie in einer zweiten MOT gefangen werden. Dieser Vorgang wird mehrmals wiederholt bis sich ca. 10^9 Atome in der UHV-MOT befinden. Diese werden dann durch Sub-Dopplerkühlen auf etwa $40\ \mu\text{K}$ abgekühlt, zu diesem Zeitpunkt hat sich die Phasenraumdichte um 14 Größenordnungen erhöht, mehr ist mit Techniken der Laserkühlung nicht erreichbar.

Um mittels Verdampfungskühlen die Bedingungen für Kondensation zu erreichen, werden die Atome in eine magnetische Falle „umgeladen“. Diese wird in der Regel durch die gleichen Spulen gebildet, wie sie auch für die MOT zum Einsatz kommen, hinzu kommen weitere Spulen.

Magnetische Fallen Mittlerweile werden in den meisten Experimenten so genannte Ioffe-Fallen verwendet, deren Magnetfeld im Prinzip aus einem Quadrupolfeld und einem überlagerten Offsetfeld zusammengesetzt ist. In Abb. 1.2 sind die Spulen der so genannten QUIC-Trap (Quadrupole-Ioffe-Configuration-Trap) [60] schematisch dargestellt. Die Quadrupolspulen werden auch für die UHV-MOT verwendet, sodass sich die vorgekühlten Atome nach Abschalten der Kühllaser schon in der magnetischen Falle befinden.

Das reine magnetische Quadrupolfeld kann schon als Falle für neutrale Atome mit einem magnetischen Moment μ fungieren: Ein magnetisches Moment besitzt in einem Magnetfeld \mathbf{B} die

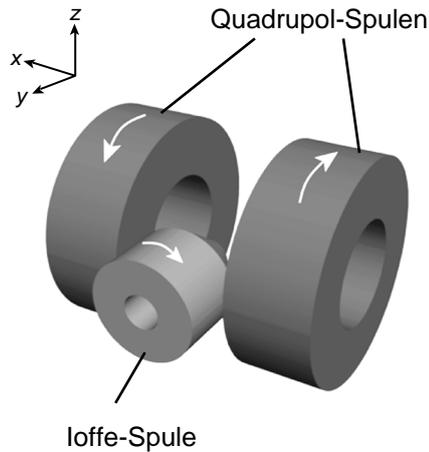


Abbildung 1.2: QUIC-Trap ².

Energie

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (1.73)$$

Ein räumlich variierendes Magnetfeld führt also zu einem inhomogenen Potential, in dem Atome mit einem magnetischem Moment gefangen werden können. Dazu muss man allerdings berücksichtigen, dass ein Atom im Hyperfeinzustand $|F, m_F\rangle$ eine Larmorpräzession um das lokale Magnetfeld ausführt, die durch die Bewegung des Atoms gestört werden kann. Nur wenn die Geschwindigkeit \mathbf{v} eines Atoms klein genug ist, erfolgt die Bewegung adiabatisch, d.h. es kommt zu keiner Änderung der magnetischen Quantenzahl m_F . Die Energie des Atoms hängt dann nur noch vom Betrag des lokalen Magnetfeldes ab

$$E(\mathbf{x}) = g_F m_F \mu_B B(\mathbf{x}), \quad (1.74)$$

wobei mit g_F der Landé-Faktor und mit μ_B das Bohrsche Magneton bezeichnet werden. Die Energie von Zuständen mit $g_F \cdot m_F > 0$ ist umso kleiner, je kleiner $B(\mathbf{x})$ ist, sie können also in einem Feldminimum gefangen werden.

Der Betrag des Magnetfeldes einer Quadrupolfalle besitzt in der Fallenmitte ein Minimum, da dort aber sogar $B = 0$ gilt, wird das erwähnte Adiabasie-Kriterium für Atome mit nicht-verschwindender Geschwindigkeit verletzt. Es kann an dieser Stelle zu Majorana-Spin-Flips kommen, d.h. die magnetische Quantenzahl eines Atoms m_F ändert sich. Das Atom spürt danach ein anderes Potential, falls $g_F \cdot m_F$ nun negativ ist, wird es aus dem Bereich der Fallenmitte herausbeschleunigt und geht damit verloren.

Um diesen Effekt zu verhindern, überlagert man dem Quadrupolfeld ein Offsetfeld, sodass das Magnetfeld im Potentialminimum nicht mehr verschwindet. In der QUIC-Falle erzeugt die Ioffe-Spule (Abb. 1.2) dieses Feld, der Aufbau ist damit wesentlich einfacher als bei früheren Fallen-Typen.

Ioffe-Fallen besitzen im Bereich des Feldminimums ein harmonisches Potential, das in der Regel in der Richtung des Offsetfeldes schwächer gekrümmt ist als senkrecht dazu. Die Fallen sind also *zigarrenförmig*.

²Diese Abbildung wurde dem Autor freundlicherweise von Immanuel Bloch zur Verfügung gestellt.

Verdampfungskühlen Für den letzten Schritt bis zur Bose-Einstein-Kondensation wird die Technik der Verdampfungskühlung (engl. *evaporative cooling*) eingesetzt. Dazu wird mittels optischem Pumpen zunächst ein Großteil der gefangenen Atome in einen magnetischen Unterzustand $|F, m_F\rangle$ gebracht; bei ^{87}Rb im Grundzustand hat man dabei die Wahl zwischen den drei Zuständen $|F = 2, m_F = 1, 2\rangle$ und $|F = 1, m_F = -1\rangle$, die in einer magnetischen Falle gefangen werden können ($F = 2 : g_{F=2} = \frac{1}{2}$, $F = 1 : g_{F=1} = -\frac{1}{2}$). Anschließend beginnt das Verdampfungskühlen. Diese Methode basiert auf der einfachen Beobachtung, dass sich ein Gas, dem man die energiereichsten Atome entzieht, durch Rethermalisieren auf eine niedrige Temperatur abkühlt. Die Rethermalisierung basiert auf elastischen Stößen der restlichen Atome untereinander, entscheidend ist also die Stoßrate, die proportional zur Dichte und zu \sqrt{T} , der Wurzel der Temperatur des Gases ist. In einem harmonischen Fallenpotential kann die mittlere Dichte trotz des Teilchenverlustes beim Verdampfen schneller anwachsen als \sqrt{T} abfällt, da sich die restlichen Atome bei kleineren Temperaturen immer mehr in der Fallenmitte ansammeln. Die Stoßrate steigt also beim Verdampfen an, man spricht auch von *runaway evaporation*.

In Experiment beseitigt man die energiereichen Atome durch Einstrahlen eines Radiofrequenzfeldes. Wie in einem Elektronenspinresonanz-Experiment führt dies zu einer Änderung der magnetischen Quantenzahl m_F von Atomen, die der Resonanzbedingung $\hbar\omega_{\text{RF}} = |g_F|\mu_B B(\mathbf{x})$ gehorchen. Die Resonanzflächen mit konstantem $B(\mathbf{x})$ sind gemäß des harmonischen Potentials Ellipsoide, durch Ändern der Radiofrequenz ω_{RF} kann man also wie mit einem Messer verschiedene Schalen in der atomaren Wolke herausschneiden. In Abb. 1.3 ist schematisch skizziert, wie gefangene Atome im Zustand $|F = 1, m_F = -1\rangle$ durch Absorption von RF-Photonen in die ungefangenen Zustände $|F = 1, m_F = 0, 1\rangle$ transferiert werden. Wie aus der

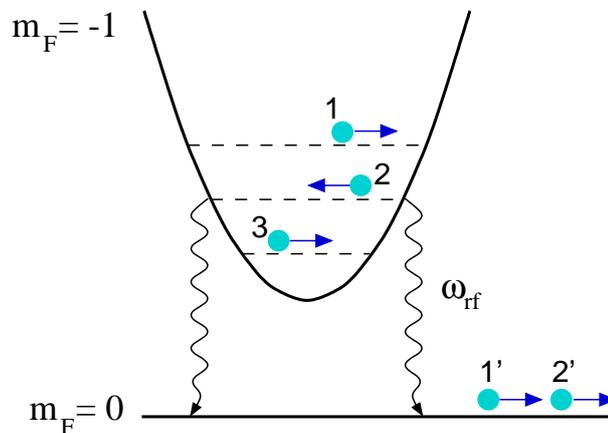


Abbildung 1.3: Verdampfungskühlen mittels eines Radiofrequenzfeldes. Durch Absorption der Radiofrequenz ändern gefangene Atome im Spinzustand $m_F = -1$ ihren Spin nach $m_F = 0$, in dem sie das magnetische Fallenpotential nicht mehr spüren und die Falle verlassen können. Dies ist nur für Atome mit einer genügend großen Energie möglich (im Bild die Atome 1 und 2). Die verbleibenden Atome rethermalisieren bei einer niedrigeren Temperatur durch elastische Stöße. Senkt man die Frequenz ω_{RF} langsam ab, so sinkt auch die Temperatur der verbleibenden Atome und die Phasenraumdicke wächst an.

Abbildung zu erkennen ist, werden bei größeren Radiofrequenzen hochenergetische Atome verdampft, verringert man die Frequenz, so werden immer niederenergetischere Atome entfernt;

durch Absenken der Radiofrequenz ω_{RF} verringert sich die Temperatur kontinuierlich. Da dabei auch die Dichte anwächst, kann man auf diese Art die fehlenden sechs Größenordnungen in der Phasenraumdichte überwinden um die Bedingung (1.10) für Bose-Einstein-Kondensation zu erreichen.

Nachweismethoden Zum Nachweis der Bose-Einstein-Kondensation in einer Atomfalle verwendet man optische Abbildungstechniken. Dabei werden vor allem zwei Methoden eingesetzt, um die Dichteverteilung der atomaren Wolke zu bestimmen. Zum einen werden Absorptionsmessungen mit resonantem Laserlicht durchgeführt, man betrachtet sozusagen den „Schatten“ der Wolke und schließt daraus auf eine zweidimensionale Dichteverteilung. Die zweite Methode basiert auf der Verwendung von nicht-resonantem Licht, analog zur Technik der Phasenkontrastmikroskopie. Dieses Verfahren zerstört im Gegensatz zu den Absorptionsmessungen das Bose-Einstein-Kondensat nicht, man kann mehrere Messungen an der gleichen Wolke durchführen. Die räumliche Auflösung beider Techniken ist allerdings auf mehrere Mikrometer begrenzt, sodass Kondensate nur recht grob abgebildet werden können. Dieses Problem kann man umgehen, indem man die Atomfalle abschaltet und die kalten Atome damit frei expandieren lässt. Bildet man nach einer gewissen Flugzeit die expandierte Wolke ab, so ist die gemessene Dichteverteilung proportional zur ursprünglichen Impulsverteilung in der Falle. Die Impulsverteilung des Kondensats ist gegenüber der des thermischen Anteils bei Impuls null stark überhöht, dieses Signal wird für $T \rightarrow 0$ sehr gut detektierbar. Durch Anpassen einer bimodalen Fit-Funktion für die Dichteverteilung an die gemessenen Daten werden die Temperatur und der Kondensatanteil N_0/N bestimmt.

Frühe Experimente Die Realisierung von Bose-Einstein-Kondensation mit gefangenen Atomen ermöglichte zum ersten Mal die experimentelle Überprüfung der in Abschnitt 1.3 beschriebenen theoretischen Modelle für schwach wechselwirkende Gase. Die bis 1998 erzielten theoretischen und experimentellen Resultate werden in [45] ausführlich verglichen, neben den Messungen der thermodynamischen Eigenschaften sind auch die Resonanzfrequenzen der kollektiven Anregungen in sehr guter Übereinstimmung mit der Theorie, zumindest für Temperaturen unterhalb $0.6T_c$. Das Konzept zur Untersuchung kollektiver Anregungen der Atomwolken ist im Übrigen relativ einfach, man beobachtet die Reaktion der Atome auf periodische Änderungen des Fallenpotentials, die z.B. durch Modulation von Spulenströmen der Magnetfalle erzeugt werden.

Des Weiteren wurden auch die Kohärenzeigenschaften von Bose-Einstein-Kondensaten näher untersucht. Die lokalen Fluktuationen eines Kondensates sind gegenüber denen eines thermischen Gases unterdrückt, die lokale Dichtekorrelation n -ter Ordnung $g^{(n)}(0)$ ist für ein Kondensat um einen Faktor $n!$ kleiner als bei thermischen Wolken [111, Kapitel 7]. Dieser Austausch-effekt reduziert in Folge die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Streuprozessen, an denen n Atome beteiligt sind. Messungen der Mean-Field-Energie (elastische Zweikörperstöße) und der Verlusten aufgrund von inelastischen Dreikörperstößen haben diese Vorhersage bestätigt. Um auch die räumliche Kohärenz eines Bose-Einstein-Kondensats zu beweisen, wurden in der Gruppe um Ketterle eindrucksvolle Interferenzexperimente durchgeführt [8]. Dabei wurde eine zigarrenförmige Ioffe-Falle mithilfe des Dipolpotentials eines blauerstimmten Lasers in zwei Hälften geteilt, in denen dann zwei unabhängige Bose-Einstein-Kondensate erzeugt wurden. Nach Öffnen der Falle und Abschalten des Lasers expandierten beide Kondensate. Im Überlappbereich kam es zur Interferenz, wobei die Struktur der Interferenzstreifen in her-

vorrager Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen auf Grundlage der Gross-Pitaevskii-Gleichung [145, 165, 181, 196] war. Diese Experimente belegten in spektakulärer Weise, dass auch makroskopische physikalische Objekte (die Ausdehnung der Wolken beträgt nach der Expansion ca. 1 mm) ihre Welleneigenschaften durch Interferenz zeigen können.

Atomlaser

Mit dem Begriff *Atomlaser* wird – in Anlehnung an die Eigenschaften eines optischen Lasers – eine Apparatur bezeichnet, die in der Lage ist, einen kontinuierlichen, kohärenten Strahl von Atomen einer wohl definierten Energie zu produzieren. Wiseman hat in [205] genauer analysiert, welche Kriterien ein solcher Atomlaser erfüllen sollte. Neben den offensichtlichen Eigenschaften (*gerichteter* Atomstrahl, Monochromatizität) fordert er, dass Phasen- und Intensitätsfluktuationen klein sind, dass also der Strahl eines Atomlasers in erster und zweiter Ordnung kohärent ist (siehe auch [157]).

Die inhärente Kohärenz von Bose-Einstein-Kondensaten bietet die Möglichkeit, durch einen geeigneten Auskoppelmechanismus einen kohärenten Atomstrahl zu erzeugen. Das erste Experiment in dieser Richtung wurde 1997 wiederum in der MIT-Gruppe durchgeführt [132]. Dabei wurde mithilfe von Radiofrequenzpulsen mehrmals hintereinander ein Teil eines gefangenen Bose-Einstein-Kondensats in einen ungefangenen Spinzustand überführt. Dieser Anteil wurde dann durch das Schwerefeld der Erde aus der Falle heraus nach unten beschleunigt. Da der Auskoppelmechanismus kohärent ist, sind auch die einzelnen Pulse kohärent zueinander.

Dieser ersten Realisierung folgten mittlerweile einige andere Experimente, in der Münchner Hänsch-Gruppe wurde z.B. kontinuierliches Auskoppeln aus einem Rubidium-Kondensat demonstriert [23]. Allen bisherigen Experimenten fehlt allerdings ein wesentliches Element eines Atomlasers: Sie sind nicht wirklich kontinuierlich, da sie immer nur ein zuvor erzeugtes Bose-Einstein-Kondensat entleeren. Ein kontinuierlicher Nachfüllmechanismus konnte bisher nicht realisiert werden, es gibt aber einige Lösungsvorschläge zu diesem Problem.

Auf diese Vorschläge und die bisherigen Experimente mit Atomlasern wird in Kapitel 3 näher eingegangen; dort finden sich auch die theoretischen Ergebnisse, die im Rahmen dieser Dissertation auf diesem Gebiet erzielt wurden.

Neuere Entwicklungen

Die Untersuchung von Bose-Einstein-Kondensaten atomarer Gase ist ein relativ junges, sich sehr schnell entwickelndes Gebiet der Physik. Aus der Vielfalt der bearbeiteten Themen soll hier eine kleine Auswahl kurz diskutiert werden, auf die im Rahmen dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden kann, die aber die Entwicklung des letzten Jahres und vielleicht der näheren Zukunft skizziert.

Stimulierte Lichtstreuung Zunächst ist dabei die Weiterentwicklung optischer Methoden zur Manipulation von Bose-Einstein-Kondensaten zu erwähnen. Analog zur Untersuchung von Anregungen in Festkörpern mittels Neutronenstreuung wurden Methoden entwickelt, welche die Messung der dynamischen Strukturfunktion $S(\Delta\mathbf{q}, \Delta\omega)$ ermöglichen. Dabei wird mittels zweier leicht verstimmter, gepulster Laser ein Ramanübergang induziert; Photonen aus dem ersten Laser regen Kondensatatomte kurzzeitig an, die dann durch stimulierte Emission von Photonen in die Mode des zweiten Laserpulses wieder in das Kondensat zurücktransferiert werden. Gemäß der durch die Verstimmung der Laser eingestellten Frequenzdifferenz $\Delta\omega$ und

der durch die Strahlrichtung der Laser vorgegebenen Impulsdifferenz $\Delta\mathbf{q}$ kann man auf diese Weise definiert Quasiteilchen im Kondensat anregen und die Strukturfunktion $S(\Delta\mathbf{q}, \Delta\omega)$ vermessen. Diese Methode wird als *Bragg-Spektroskopie* bezeichnet, in [110] findet sich eine Zusammenfassung der Experimente. Mithilfe dieser Technik konnte unter anderem nachgewiesen werden, dass die erzeugten Bose-Einstein-Kondensate über ihre gesamte Ausdehnung kohärent sind. Des Weiteren wurde mit solchen Bragg-Pulsen demonstriert, dass ein kleines Kondensat beim Durchqueren einer Atomwolke kohärent verstärkt wird [110], d. h. analog zur bosonischen Stimulierung bei optischen Lasern gibt es auch eine Art *Materiewellenverstärkung* bei Atomen.

Stimmt man die Laser in der eben beschriebenen Methode so ab, dass statt des Kondensats ein anderer Zustand erreicht wird (meist ein anderer Hyperfein- oder Zeeman-Zustand), so spricht man von stimulierten Ramanübergängen. Auf diese Art lassen sich z.B. zwei gefangene Zustände koppeln. Ist der Zielzustand nicht gefangen, so kann man einen Auskoppelmechanismus für einen Atomlaser realisieren [81], bei dem der Impulsübertrag $\Delta\mathbf{q}$ die Strahlrichtung und -geschwindigkeit bestimmt.

Rotationseigenschaften Die Rotationseigenschaften von Bose-Einstein-Kondensaten im Allgemeinen und speziell die Erzeugung von Vortizes erfahren seit einiger Zeit ein starkes Interesse. In Analogie zu den Heliumexperimenten mit „rotierenden Eimern“ versucht man z.B., die Dynamik von Vortizes in Abhängigkeit der Rotationsfrequenz einer rotierenden anisotropen Falle zu untersuchen. Bisher ist es zwei Gruppen gelungen, Vortizes zu erzeugen: In Boulder wurde mittels eines rotierenden Laserstrahls und eines Mikrowellenfeldes eine Kopplung zweier Hyperfeinniveaus hergestellt, bei der Drehimpuls auf den zweiten Zustand übertragen wird [129,203]. Nach einiger Zeit liegen zwei ^{87}Rb -Kondensate vor, ein ruhendes Kondensat im ursprünglichen Zustand $|F = 1, m_F = -1\rangle$ und ein Kondensat im Zustand $|F = 2, m_F = 1\rangle$ mit einem Vortex, das aufgrund der abstoßenden Mean-Field-Wechselwirkung zwischen den beiden Hyperfeinzuständen um das ruhende $F = 1$ -Kondensat rotiert. An der École Normale Supérieure in Paris hingegen erzeugt man mit dem Dipolpotential eines rotierenden Laserstrahls ein rotierendes Fallenpotential [126]; „rührt“ man schneller als eine kritische Frequenz, so wird beim evaporativen Kühlen direkt ein Vortex erzeugt, bei größeren Rotationsfrequenzen kann sogar ein Kondensat mit mehreren Vortizes entstehen. Die Messung der räumlich variierenden Phase des Kondensats hat eindeutig das Vorliegen von Vortizes belegt, mittlerweile konnte auch der Drehimpuls und die Präzession eines Vortex gemessen werden.

Eine weitere interessante Entwicklung betrifft die Messung der Suprafluidität von gefangenen Bose-Einstein-Kondensaten. Ein Bose-Einstein-Kondensat bei kleiner Temperatur $T \ll T_c$ ist fast vollständig suprafluid, die Größe des suprafluiden Anteils hängt neben der Temperatur auch von der Anisotropie der Atomfalle ab, in der sich das Kondensat befindet [185]. Der normalfluide Anteil wird in Fallen mit kleinen Anisotropien in der xy -Ebene durch das Trägheitsmoment für Rotationen um die z -Achse beschrieben (siehe dazu auch Kapitel 4). Aufgrund theoretischer Vorhersagen [79, 208] über die Existenz und die Oszillationsfrequenzen der aus der Kernphysik bekannten so genannten *scissors mode* („Scherenschwingung“) ist erstmals eine Aussage über die Suprafluidität eines Bose-Einstein-Kondensats möglich [128].

Ultrakalte Moleküle Eine weitere sehr interessante Entwicklung ist die Erzeugung und Charakterisierung ultrakalter Moleküle. Bisher wurden nur atomare Bose-Einstein-Kondensate untersucht, es gibt aber eine Reihe von Überlegungen, wie man auch Kondensate von Mo-

lekülen erzeugen könnte (siehe z.B. [202]). Aufgrund ihrer komplexeren Struktur können Moleküle nur schwer mittels Lasertechniken gekühlt werden, eine interessante Alternative kalte Moleküle zu erzeugen besteht darin, sie direkt aus kondensierten Atomen zusammzusetzen. Bei Dreikörperstößen in Bose-Einstein-Kondensaten passiert dies auf unkontrollierte Weise: Zwei Atome bilden ein Dimer, die dabei frei werdende überschüssige Energie wird von einem dritten Atom in Form von kinetischer Energie übernommen. Dieser Verlustmechanismus wird sogar noch verstärkt, wenn man die Streueigenschaften durch ein äußeres Magnetfeld verändert. In der Nähe einer *Feshbach-Resonanz* [102] wechselt beim Ändern der Stärke eines angelegten Magnetfeldes nicht nur die s -Wellen-Streulänge a_0 ihr Vorzeichen, auch die Raten für Mehrkörperstöße ändern sich dramatisch.

Es gibt mehrere Vorschläge, wie man die Molekülbildung in einem atomaren Bose-Einstein-Kondensat kontrolliert ablaufen lassen kann. Neben zeitabhängigen Magnetfeldern [135] kann man auch Laserpulse mit transientser Frequenz (*chirped pulses*) [107] verwenden, um in einem adiabatischen Prozess Dimere zu erzeugen. Ein erstes Experiment wurde in der Gruppe von Heinzen durchgeführt [206]: Durch einen stimulierten Ramanübergang wurden ^{87}Rb -Atome zu einem Rubidium-Dimer photoassoziiert. Zwar wurden nur wenige Moleküle erzeugt, aber es konnte erstmals die Wechselwirkung zwischen Molekülen und einem atomaren Kondensat gemessen werden. Die verwendete Methode eröffnet des Weiteren völlig neue Möglichkeiten für die genaue Bestimmung von Bindungsenergien. Die Autoren schlagen auch vor, durch einen stimulierten Ramanübergang in einen Zustand mit nicht verschwindendem Impuls in Analogie zu den Atomlaser-Experimenten am NIST [81] eine kohärente Quelle von Molekülen zu realisieren, sozusagen einen „Moleküllaser“.

2

Quantenstatistische Eigenschaften von gefangenen, idealen Fermigasen

Ebenso wie die Physik schwach wechselwirkender Bosegase konnten die Eigenschaften von schwach wechselwirkenden, entarteten Fermigasen lange Zeit nur theoretisch untersucht werden (siehe z.B. §6 in [123]). Das wichtigste Modellsystem für elektrisch neutrale Fermionen ist flüssiges ^3He . Aufgrund der hohen Dichte spielen bei ^3He ähnlich wie beim bosonischen ^4He Wechselwirkungen eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Zur Beschreibung dieser Wechselwirkungseffekte entwickelte Landau die Theorie der Fermi-Flüssigkeiten, die die Eigenschaften von entartetem ^3He sehr gut beschreibt, solange die Temperatur nicht unter der Übergangstemperatur zur supraflüssigen Phase liegt.¹

Elektronen in Metallen können mit einigen Modifikationen ebenfalls als Fermi-Flüssigkeiten angesehen werden. Allerdings modifiziert das periodische Potential des Kristallgitters das Verhalten von Elektronen im Vergleich zu einem freien Gas erheblich. Die Wechselwirkungsenergie aufgrund der Coulombabstoßung zwischen Elektronen hingegen spielt relativ zur kinetischen Energie nur eine kleine Rolle [152], da letztere bei den hohen Teilchendichten im Festkörper recht groß ist (Quantendruck aufgrund des Pauli-Prinzips). Aus diesem Grund war Sommerfelds Modell freier Elektronen im Festkörper recht erfolgreich, es konnte aber natürlich nicht die auf der Kristallstruktur basierenden Phänomene erklären.

In diesem Kapitel werden theoretische Untersuchungen zu gefangenen, ultrakalten Fermigasen diskutiert. Im folgenden Abschnitt werden die grundlegenden Wechselwirkungseigenschaften solcher elektrisch neutraler Gase beschrieben. Der darauffolgende Abschnitt legt die im Rahmen der vorliegenden Dissertation erzielten Ergebnisse dar. Im Anschluss daran werden die neuesten experimentellen und theoretischen Ergebnisse im Bereich ultrakalter Fermigase zusammengefasst, dazu zählt insbesondere die erstmalige Realisierung eines entarteten neutralen Fermigases in der Gruppe von D. Jin am NIST in Boulder [50].

¹Bei sehr niedrigen Temperaturen können ^3He -Atome in Analogie zur Supraleitung von Elektronen Cooper-Paare bilden. Die zugehörige Phase ist superfluid, aufgrund der komplizierteren magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen ^3He -Atomen gibt es allerdings zwei verschiedene suprafluide Phasen A und B.

2.1 Wechselwirkung in atomaren Fermigasen

In Kapitel 1.3 wurde dargelegt, dass für die Wechselwirkung zwischen Atomen in ultrakalten Bosegasen nur der s -Wellen-Beitrag der Streuamplitude berücksichtigt werden muss. Dieses Erkenntnis resultiert aus der Tatsache, dass die elastische Streuung von der kinetischen Energie eines Atoms relativ zum Stoßpartner und damit von der Temperatur im Gas abhängt. Betrachtet man den Streuvorgang im Schwerpunktsystem der beiden stoßenden Atome, so findet man, dass die Partialwelle zum Bahndrehimpuls l nur bis zum Radius $r_l(E) \approx \frac{\hbar l}{\sqrt{2M E_{\text{kin}}}}$ an das Streuzentrum heranreicht. Besitzt nun das Wechselwirkungspotential eine endliche Reichweite r_0 , so werden bei kleiner kinetischer Energie nur Partialwellen zu kleinen Bahndrehimpulsen eine Phasenverschiebung erleiden, denn nur für $r_l(E) < r_0$ „spürt“ die einlaufende Partialwelle das Potential. Für ultrakalte Bosegase folgt aus dieser Betrachtung, dass nur s -Wellen wirklich gestreut werden.

Die gleichen Betrachtungen führen im für entartete Fermigase relevanten Temperaturbereich ebenfalls zu dem Schluss, dass nur s -Wellenstreuung vorliegen kann. Für identische Fermionen im gleichen Spinzustand ist s -Wellenstreuung allerdings aufgrund des Pauli-Prinzips verboten (siehe §62 und §137 in [121]); die Ortswellenfunktion eines Paares identischer Fermionen muss antisymmetrisch unter Vertauschung der Teilchen sein, d.h. der relative Bahndrehimpuls l muss ungerade sein. Der Beitrag der p -Wellen ($l = 1$) zur elastischen Streuung ist aus den oben genannten Gründen sehr klein, sodass spinpolarisierte Fermionen bei tiefen Temperaturen als nahezu nicht wechselwirkend angenommen werden können. Die Fermi-Temperatur liegt für experimentelle Parameter, die denen von Bose-Experimenten entsprechen, bei wenigen μK [35], sodass für ein entartetes Fermigas Temperaturen von wenigen hundert Nanokelvin erreicht werden müssen. Schaleneffekte wie in Atomen oder Atomkernen treten bei noch kleineren Temperaturen unterhalb 20 nK auf. Solche Erscheinungen sind Gegenstand der vorliegenden Arbeit, auf sie wird im folgenden Abschnitt näher eingegangen.

Fermionen in verschiedenen Spinzuständen (also voneinander unterscheidbare Fermionen) sind vom Pauli-Prinzip nicht betroffen, sie unterliegen der s -Wellenstreuung. Man kann also analog zu den Experimenten mit mehreren Hyperfein- oder Zeeman-Zuständen von Bosonen [82, 83] auch Gemische mehrerer Fermion-Spezies untersuchen. In [95, 184] wird diese Möglichkeit erstmals für das fermionische ${}^6\text{Li}$ analysiert. Für eine positive Streulänge a_0 erwartet man natürlich ein Mischungs- bzw. Entmischungsverhalten ähnlich dem von bosonischen Gemischen [136, 183]. Für eine negative Streulänge wie im Falle von ${}^6\text{Li}$ wird in [95, 184] die Möglichkeit der Bildung von Cooper-Paaren durch die attraktive Wechselwirkung diskutiert. Ganz analog zum BCS-Übergang in eine supraleitende oder suprafluide Phase bei Elektronen oder ${}^3\text{He}$ würden Cooper-Paare fermionischer Atome unterhalb einer Übergangstemperatur T_c , die für die üblichen Parameter der Dichte für ${}^6\text{Li}$ in der Größenordnung von 100 nK liegt, eine suprafluide Phase bilden. Details und neuere Erkenntnisse zu diesem Thema werden in Abschnitt 2.3 dargestellt.

2.2 Mesoskopisches ideales Fermigas in einer Falle

Im Lichte der Experimente mit Bosonen in harmonischen Atomfallen liegt es nahe, auch die Eigenschaften von fermionischen Atomen in solchen Fallen zu untersuchen. Wie schon bei den Bosonen sind hier Alkaliatome wiederum sehr gute Kandidaten, da für diese die Methoden zur Laserkühlung am weitesten entwickelt sind. Die theoretischen und experimentellen Anstren-

gungen haben sich bisher vor allem auf ${}^6\text{Li}$ und ${}^{40}\text{K}$ konzentriert, die im Folgenden beschriebenen theoretischen Betrachtungen behandeln vor allem das fermionische Lithium-Isotop.

Der Kernspin von ${}^6\text{Li}$ beträgt $I = 1$, sodass der Grundzustand eine Hyperfeinstruktur mit den Gesamtspins $F = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ besitzt, also insgesamt sechs Zustände aufweist (siehe Abb. 2.1). Von

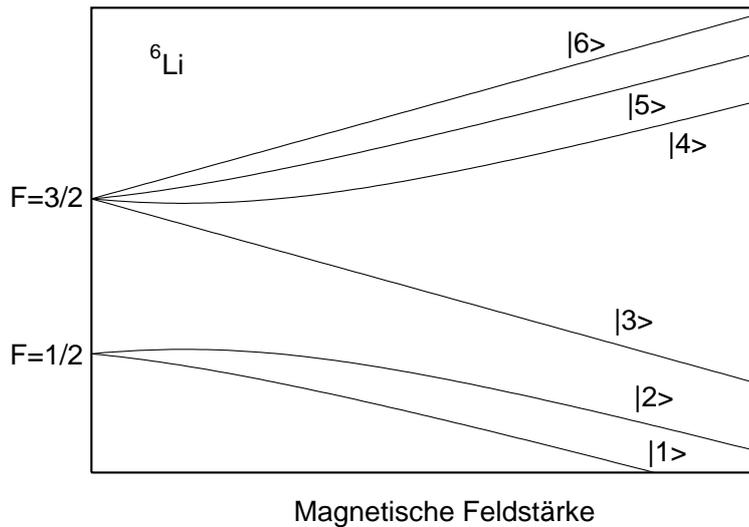


Abbildung 2.1: Hyperfeinstruktur von ${}^6\text{Li}$ als Funktion der Magnetfeldstärke. Die Zustände $|4\rangle$, $|5\rangle$, $|6\rangle$ und auch $|2\rangle$ sind *low field seekers*, können also in einer magnetischen Falle gefangen werden. Von besonderem Interesse ist hier der doppelt polarisierte Zustand $|6\rangle = |m_I = 1, m_S = \frac{1}{2}\rangle$.

diesen können nur die Zustände $|2\rangle$, $|4\rangle$, $|5\rangle$ und $|6\rangle$ in einer Magnetfalle gefangen werden (siehe Kap. 1.5.2). Fängt man nur eine der vier Spezies in einer Falle, so gibt es – wie im vorherigen Abschnitt dargelegt – praktisch keine Wechselwirkung zwischen den Atomen. Am geeignetsten erscheint hierfür der doppelt spinpolarisierte Zustand $|6\rangle = |m_I = 1, m_S = \frac{1}{2}\rangle$, da er am stabilsten gegen Verluste durch inelastische, spinändernde Zweikörperstöße ist [95].

In den folgenden Abschnitten werden die thermodynamischen Eigenschaften eines idealen Fermigases in einer harmonischen Falle bestimmt [174], das als Modell für ein gefangenes Gas aus ${}^6\text{Li}$ -Atomen im Zustand $|6\rangle$ dient. Butts and Rokhsar haben in [35] (siehe aber auch [154]) eine ähnliche Situation untersucht. Sie verwenden die semiklassische Thomas-Fermi-Näherung, bei der über den klassischen Phasenraum integriert wird. Diese Näherung ist im Limes sehr großer Teilchenzahlen exakt. Im Gegensatz dazu konzentrieren sich die hier vorzustellenden Rechnungen auf den Bereich kleiner Teilchenzahlen, bei denen auch Schaleneffekte wie bei Elektronen in der Atomhülle oder bei Nukleonen im Atomkern auftreten können. Die Rechnungen basieren auf der exakten numerischen Summation über Quantenzustände ohne weitere Näherungen und ermöglichen Aussagen über chemisches Potential, Wärmekapazität und Dichteverteilungen in Abhängigkeit von der Temperatur. Da im Experiment oft anisotrope Fallen verwendet werden, werden neben isotropen auch axialsymmetrische harmonische Potentiale betrachtet.

2.2.1 Fermionen in einer isotropen Falle

Entartungen und die Fermi-Energie

Zunächst soll eine isotrope harmonische Falle mit dem Potential

$$V = \frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2) \quad (2.1)$$

und der Frequenz ω untersucht werden. Die Entartung von Eigenzuständen mit der Energie

$$E_\nu = (\nu + 3/2)\hbar\omega \quad (2.2)$$

beträgt

$$g_\nu = \frac{1}{2}(\nu + 1)(\nu + 2), \quad (2.3)$$

sie ist also gleich der Anzahl einfacher Partitionen der Zahl ν in die Summe dreier ganzer Zahlen $\nu = \nu_x + \nu_y + \nu_z$. g_ν gibt die Entartung einer Schale der Energie E_ν an, somit ist die Zahl S_α aller Quantenzustände bis zur Energie E_α durch die Summe über alle Schalen $0 \leq \nu \leq \alpha$ gegeben

$$\sum_{\nu=0}^{\alpha} g_\nu = S_\alpha. \quad (2.4)$$

Für diese Summe erhält man

$$S_\alpha = \frac{1}{6}(\alpha + 1)(\alpha + 2)(\alpha + 3), \quad (2.5)$$

also die Folge $\{S_\alpha\} = \{1, 4, 10, 20, 35, 56, \dots\}$. Da hier nur Fermionen einer Spinorientierung betrachtet werden, wird jeder Zustand nur mit einem Fermion besetzt.

Um den Aufwand für die folgenden Rechnungen zu beschränken, wird das großkanonische Ensemble verwendet. Für ein ideales Bosegas wurde schon in Kapitel 1.1.3 darauf hingewiesen, dass Rechnungen in verschiedenen statistischen Ensembles zu unterschiedlichen Ergebnissen führen können [87, 161, 201]. Diese Abweichungen sind aber in der Regel kleiner als die Unterschiede zwischen dem wechselwirkenden und dem idealen Bosegas. Da Fermionen einen Zustand nur maximal einmal besetzen können, treten Probleme mit großen Fluktuationen wie bei Bosonen im großkanonischen Ensemble hier nicht auf. Letzteres kann somit verwendet werden, ohne auf die Unterschiede zum kanonischen Ensemble, das für in einer Falle isolierte Teilchen eher angebracht erscheint, näher einzugehen.

Im großkanonischen Ensemble ist die thermische Besetzung eines Zustands mit Energie E_ν bei einer Temperatur $kT = 1/\beta$ durch die Fermi-Dirac-Statistik gegeben

$$n_\nu = \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta\hbar\omega\nu) + 1}, \quad (2.6)$$

wobei die Fugazität z aus der Bedingung

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} g_\nu n_\nu = N \quad (2.7)$$

bestimmt werden kann. Definiert man die Fugazität durch $z = \exp \beta(\mu - (3/2)\hbar\omega)$, wobei μ das chemische Potential bezeichnet, so muss man in numerischen Rechnungen die Nullpunktenergie des harmonischen Potentials nicht mehr explizit berücksichtigen. N ist die Gesamtzahl der Teilchen in der Falle.

Für eine gegebene Teilchenzahl kann nun die Fermi-Energie durch

$$E_F = (\nu_F + 3/2)\hbar\omega \quad (2.8)$$

definiert werden. Dabei bezeichnet ν_F die Schale, bis zu der bei Temperatur $T = 0$ Fallenzustände mit Atomen besetzt sind. Am absoluten Nullpunkt ($\beta \rightarrow \infty$) wird die Fermi-Dirac-Verteilung zu einer Stufenfunktion $\theta(\nu_F - \nu)$. Im Fall eines mesoskopischen Teilchenensembles hat die Gleichung (2.7) bei $T = 0$

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} g_{\nu} \theta(\nu_F - \nu) = N \quad (2.9)$$

nur für $N \in \{S_{\alpha}\}$ eine Lösung. Für $N \notin \{S_{\alpha}\}$ definiert man die kleinste ganze Zahl $\nu_F = \lceil x_F \rceil$, die größer (oder gleich) ist als die reelle Lösung der Gleichung $S_{x_F} = N$

$$x_F = A + \frac{1}{3A} - 2, \quad (2.10)$$

wobei A durch

$$A = \left(3N + \sqrt{9N^2 - 1/27} \right)^{1/3} \quad (2.11)$$

gegeben ist. Es lässt sich zeigen, dass $E_F = \hbar\omega(\lceil x_F \rceil + 3/2)$ für die Fermi-Energie für große N mit dem Resultat der Thomas-Fermi-Näherung [35]

$$\tilde{E}_F = \hbar\omega(6N)^{1/3} \quad (2.12)$$

übereinstimmt.

Berechnung des chemischen Potentials

Der Fugazität bzw. dem chemische Potential kommt eine zentrale Bedeutung für die Berechnung der Eigenschaften eines idealen Fermigases zu. Sie werden bei gegebener Temperatur und fester Teilchenzahl durch numerisches Lösen von Gl. (2.7) berechnet. Diese Ergebnisse sind dann im Gegensatz zur Thomas-Fermi-Näherung exakt. Sie werden im Folgenden für gewisse Limites diskutiert.

Abb. 2.2 zeigt die Abhängigkeit des chemischen Potentials μ von der Atomanzahl N bei kleinen Temperaturen. Die durchgezogene Linie bezeichnet die Thomas-Fermi-Näherung Gl. (2.12). Die drei anderen Kurven wurden numerisch durch Lösen von Gl. (2.7) erhalten, wobei die Summe bei genügend hohem ν abgebrochen wurde, da die Besetzung sehr hoher Schalen nur noch wenig zu N beiträgt. Diese Kurven zeigen ein stufenförmiges Verhalten, das bei höheren Temperaturen zunehmend ausgeschmiedet wird. Die Stufen werden, wie später noch gezeigt werden wird, für eine anisotrope Falle in kleinere Stufen aufgebrochen. Hier tritt immer dann eine neue Stufe auf, wenn eine Schale mit Fermionen aufgefüllt ist und ν_F zur nächst höheren ganzen Zahl springt. μ konvergiert für $T \rightarrow 0$ gegen einen „Plateau“-Wert $(\nu_F + 3/2)\hbar\omega$ solange

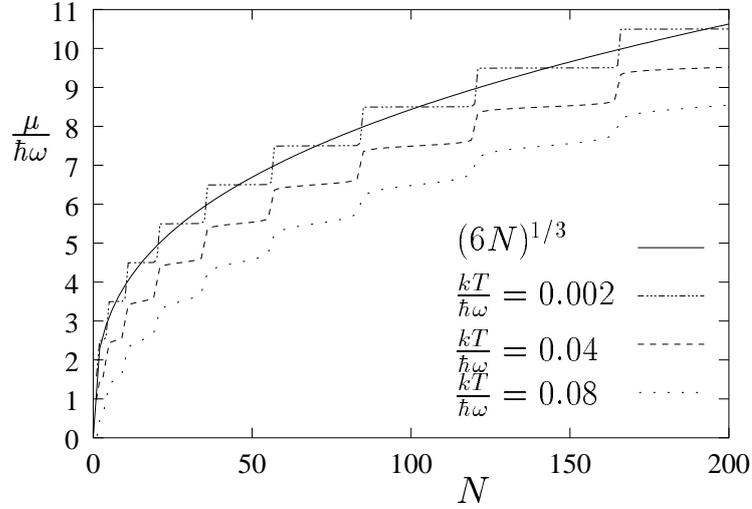


Abbildung 2.2: Das chemische Potential $\mu(N)$ zeigt ein stufenartiges Verhalten, das der stetigen Thomas-Fermi-Näherung aus Gl. (2.12) folgt (durchgezogene Linie). Die gestrichelte bzw. gepunktete Kurve ist vertikal um -1 bzw. -2 verschoben.

N nicht mit einer der „magischen“ Zahlen S_α übereinstimmt. Wenn allerdings eine Schale gerade abgeschlossen ist ($N = S_{\nu_F}$), so nimmt μ den Wert $\mu = (\nu_F + 2)\hbar\omega$ an, der sehr nahe am Wert der Thomas-Fermi-Näherung bei S_{ν_F} liegt (durchgezogene Linie in Abb. 2.2). Wie man durch eine asymptotische Entwicklung zeigen kann, schneiden sich die beiden Kurven tatsächlich ungefähr bei $N = S_\alpha$ bzw. bei $N = (S_\alpha + S_{\alpha-1})/2$, also bei halber Auffüllung der Schalen.

Diese Information wird etwas detaillierter aus Abb. 2.3 ersichtlich, in der die Temperaturabhängigkeit von μ für Teilchenzahlen um $N = S_7 = 120$ gezeigt wird. Bei $T = 0$ nähert sich die Kurve für $N = 119$ dem Plateau-Wert $\mu/\hbar\omega = 7 + 3/2$, wohingegen die Kurve für $N = 121$ den Wert $\mu/\hbar\omega = 8 + 3/2$ erreichen muss. Für $N = S_7$ nimmt $\mu/\hbar\omega$ allerdings den Wert $7 + 2 = 9$ an, liegt also genau zwischen den benachbarten Energieeigenwerten. Eine Erklärung hierfür wird weiter unten gegeben.

Die Temperaturabhängigkeit von μ kann im Limes großer oder kleiner Temperaturen analytisch berechnet werden. Der Bereich hoher Temperatur in Abb. 2.3 wird gut durch die Sommerfeld-artige Formel [35]

$$\tilde{\mu}(T) = \tilde{E}_F \left(1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{kT}{\tilde{E}_F} \right)^2 \right) \quad (2.13)$$

beschrieben, wobei der Vorfaktor $\pi^2/3$ den üblichen Faktor $\pi^2/12$ des bekannten Resultats für Fermionen in einem Kasten ersetzt [64]. Man bemerke, dass das exakte Ergebnis für $N = 119$ für hohe Temperaturen gut durch die Sommerfeld-Näherung für $N = 120$ beschrieben wird.

Das Tieftemperaturregime kann in Analogie zum Verhalten des chemischen Potentials von Elektronen in intrinsischen Halbleitern analysiert werden. Zunächst sollen nur die „magischen“ Besetzungszahlen $N \in \{S_\alpha\}$ betrachtet werden. Sei $N_>(T)$ die Zahl von Atomen, die in Zuständen oberhalb E_F angeregt sind und $N_<(T)$ die Anzahl unbesetzter Zustände („Löcher“)

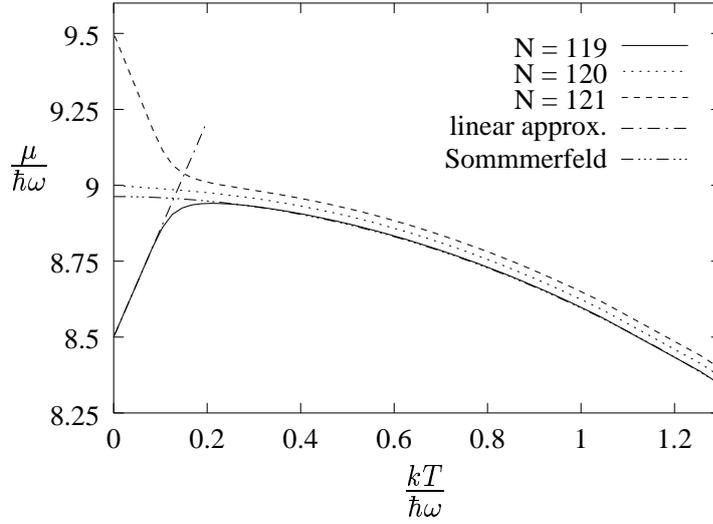


Abbildung 2.3: Diese Abbildung zeigt das Verhalten von $\mu(T)$ in einer isotropen Falle. Die Sommerfeld-Naherung wurde zwar fur $N = S_7 = 120$ berechnet, sie stimmt aber sehr gut mit der numerischen Kurve fur $N = 119$ uberein. Dieses Verhalten tritt auch fur andere Werte von N auf.

bei E_F oder darunter:

$$N_{>}(T) = \sum_{\nu=\nu_F+1}^{\infty} \frac{g_{\nu}}{z^{-1} \exp(\beta \hbar \omega \nu) + 1} \quad (2.14)$$

$$N_{<}(T) = \sum_{\nu=0}^{\nu_F} g_{\nu} \left(1 - \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \hbar \omega \nu) + 1} \right). \quad (2.15)$$

Fur kleine Temperaturen, also fur

$$kT \ll E_{\nu_F+1} - \mu \quad \text{und} \quad kT \ll \mu - E_F, \quad (2.16)$$

kann man die Anzahl von „Teilchen“ und „Lochern“ durch

$$N_{>}(T) \approx \Sigma_{>} e^{-\beta(E_{\nu_F+1} - \mu)} \quad (2.17)$$

$$N_{<}(T) \approx \Sigma_{<} e^{-\beta(\mu - E_F)}, \quad (2.18)$$

nahern, dabei sind

$$\Sigma_{>} = \sum_{\nu=\nu_F+1}^{\infty} g_{\nu} e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\nu_F+1})} \quad (2.19)$$

$$\Sigma_{<} = \sum_{\nu=0}^{\nu_F} g_{\nu} e^{-\beta(E_F - E_{\nu})} \quad (2.20)$$

Boltzmann-Summen uber alle Schalen uber bzw. unter der Fermi-Kante. Kombiniert man die obigen Gleichungen, so erhalt man

$$N_{>}(T) \cdot N_{<}(T) = \Sigma_{>} \Sigma_{<} e^{-\beta \hbar \omega}. \quad (2.21)$$

Aus dieser Bedingung kann man das chemische Potential bestimmen. Da für $N \in \{S_\alpha\}$ die Fermi-Schale bei $T = 0$ vollständig besetzt ist, muss in diesem Fall $N_>(T)$ gleich $N_<(T)$ sein und man erhält aus Gl. (2.17–2.21) das Verhalten bei tiefen Temperaturen

$$\mu(T) = \hbar\omega(\nu_F + 2) - \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{\Sigma_>}{\Sigma_<} \right). \quad (2.22)$$

$\mu(0)$ liegt also in der Mitte der „Lücke“ zwischen E_F und $E_F + \hbar\omega$ (vgl. Abb. 2.3, $E_F = 8.5 \hbar\omega$, $N = S_7$). Dies ist in völliger Übereinstimmung mit intrinsischen Halbleitern, bei denen das Valenzband bei $T = 0$ vollständig gefüllt ist und das chemische Potential in der Mitte der *Bandlücke* liegt. μ fällt mit steigender Temperatur langsam mit der Steigung $\ln(\Sigma_>/\Sigma_<)$ linear ab.

Wenn andererseits $N \notin \{S_\alpha\}$ gilt, so kann man $\mu(T)$ durch die folgende Betrachtung berechnen. Für sehr tiefe Temperaturen wird die Fermi-Funktion gut durch $n_\nu = 1$ für $\nu < \nu_F$ bzw. $n_\nu = 0$ für $\nu > \nu_F$ beschrieben. Für die Zahl besetzter Zustände in der Fermi-Schale

$$\Delta N = \frac{g_{\nu_F}}{z^{-1} \exp(\beta \hbar\omega \nu_F) + 1} \quad (2.23)$$

gilt dann ungefähr $\Delta N = N - S_{\nu_F-1}$. Unter der Annahme, dass ΔN für sehr kleines T konstant bleibt, so kann man Gl. (2.23) nach dem chemischen Potential auflösen

$$\mu(T) = \hbar\omega \left(\nu_F + \frac{3}{2} \right) - kT \ln \left(\frac{g_{\nu_F}}{\Delta N} - 1 \right). \quad (2.24)$$

Dieser Ausdruck ist linear in T für nicht verschwindendes ΔN , wobei die Steigung bei $\Delta N = g_{\nu_F}/2$ ihr Vorzeichen wechselt. Wenn also die höchste besetzte Schale weniger als halb voll ist ($\Delta N < g_{\nu_F}/2$), so nimmt $\mu(T)$ linear von $\mu(0) = E_{\nu_F}$ aus ab; wenn sie mehr als zur Hälfte besetzt ist, steigt $\mu(T)$ linear. Das genaue Ergebnis nähert sich dann der Sommerfeld-Kurve. Der Bereich ΔT , in dem die lineare Näherung gültig ist, kann grob durch

$$\frac{\hbar\omega}{2} = k\Delta T \ln(g_{\nu_F} - 1) \quad (2.25)$$

abgeschätzt werden, da die maximale Abweichung $\hbar\omega/2$ von der Sommerfeld-Näherung bei $\Delta N = 1$ erreicht wird. Für $\nu_F = 7$ erhält man z.B. $k\Delta T/\hbar\omega \leq 0.14$, dies stimmt gut mit Abb. 2.3 überein. Für größere Werte von ΔN wird die Steigung kleiner und der Gültigkeitsbereich kann größer werden.

Spezifische Wärme

Die Unstetigkeit des chemischen Potentials zeigt sich am dramatischsten in der spezifischen Wärme $C(T)$. Diese kann man aus der mittleren Energie

$$U(T) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{g_\nu \hbar\omega \nu}{z^{-1} \exp(\beta \hbar\omega \nu) + 1} \quad (2.26)$$

durch ableiten berechnen:

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T}. \quad (2.27)$$

Die übliche Sommerfeld-Näherung für kleine Temperaturen liefert

$$\frac{\tilde{C}(T)}{Nk} = \frac{\pi^2}{(6N)^{1/3}} \frac{kT}{\hbar\omega}, \quad (2.28)$$

das klassische Hochtemperaturergebnis beträgt natürlich $C_{\text{klass.}}/Nk = 3$. Hier soll $C(T)$ für endliches N aus der Summe über Quantenzustände berechnet und mit der Sommerfeld-Formel verglichen werden.

In Abb. 2.4 finden sich numerische Ergebnisse für verschiedene Teilchenzahlen, die Ordinate wurde bereits mit der Skalierung $(6N)^{1/3}$ aus Gl. (2.28) versehen. Im Limes ultratiefer Temperaturen erkennt man, dass das exakte Ergebnis bei endlichen N vom Sommerfeld-Resultat aus Gl. (2.28) abweicht. Für höhere Temperaturen nähert sich die spezifische Wärme $C(T)$ dieser semiklassischen Kurve.

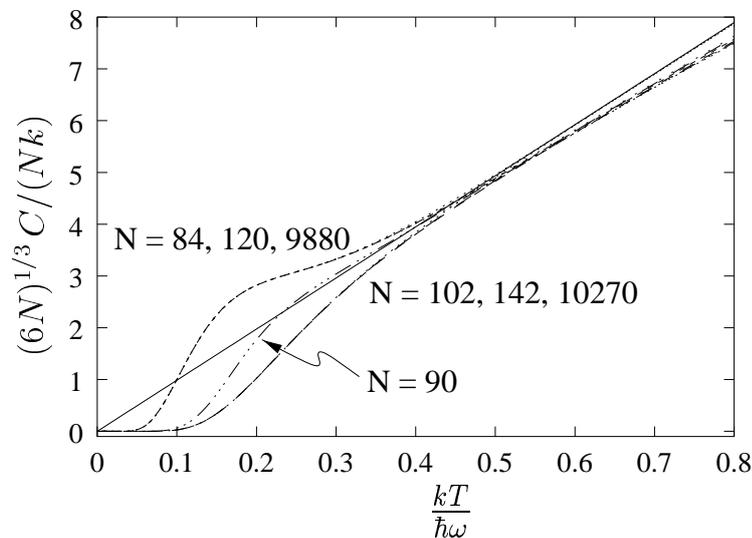


Abbildung 2.4: Spezifische Wärme pro Atom $C(T)/(Nk)$, skaliert mit $(6N)^{1/3}$. Die lineare Kurve (durchgezogen) stellt das Sommerfeld-Resultat Gl. (2.28) dar. Die Abweichung bei großen Werten von $kT/\hbar\omega$ vom linearen Verhalten tritt nur für kleine N auf, weil aufgrund des Äquipartitionstheorems für hohe Temperaturen $(6N)^{1/3} C(T)/(Nk) \rightarrow 3(6N)^{1/3}$ gilt. Bei kleinen T und für vollständig gefüllte Schalen ($N = 84, 120, 9880$) bzw. für halb gefüllte Schalen ($N = 102, 142, 10270$) ist die Kurve für die skalierte spezifische Wärme $(6N)^{1/3} C(T)/(Nk)$ universell. $N = 90$ repräsentiert eine beliebige andere Besetzung.

Bei sehr kleinem T bleibt $C(T)$ zunächst bei null statt linear anzusteigen. Dies ist konsistent mit der Annahme, dass ΔN (siehe Gl. (2.23)) sich zunächst nicht ändert, was ja schon durch den Vergleich von Gl. (2.24) mit der exakten, numerischen Lösung bestätigt wurde.

Für sehr kleine T sind aufgrund der Energielücke keine Zustände oberhalb der Fermi-Energie besetzt, die Gesamtenergie erhöht sich zunächst nicht für steigende Temperatur und es gilt $C(T) = 0$. Wie man aus Abb. 2.4 entnimmt, scheint diese Erklärung auch für abgeschlossene Schalen ($N = 84, 120, 9880$) richtig zu sein, für die Gl. (2.24) gar nicht gilt. Man bemerke, dass der Bereich, in dem $C(T)$ verschwindet, mit dem Gültigkeitsbereich für die lineare Näherung von $\mu(T)$ übereinstimmt.

Bei mittleren Temperaturen tritt eine stark nicht-monotone Abhängigkeit der spezifischen Wärme von N auf und zwar ungefähr bei solchen Temperaturen, bei denen die lineare Näherung

Gl. (2.24) gerade nicht mehr gilt. Der Ursprung dieses Verhaltens wird aus Abb. 2.5 erkennbar. Jedes mal, wenn eine Schale abgeschlossen wird, nimmt $C(N)$ ein Maximum an. An diesen

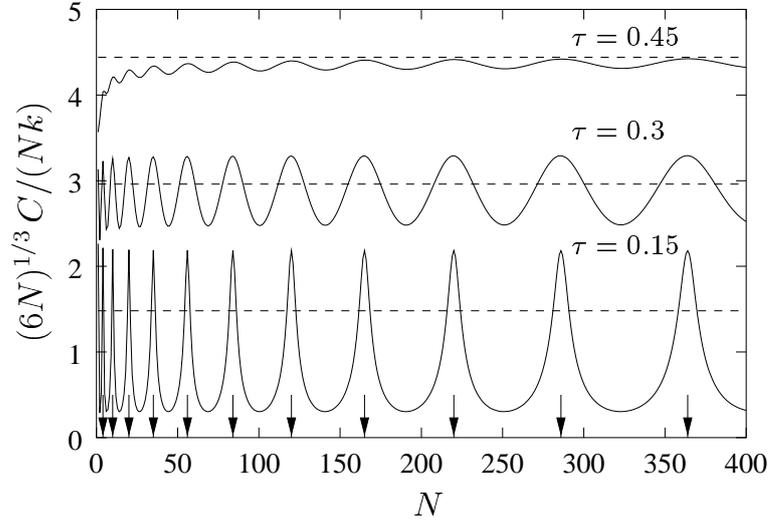


Abbildung 2.5: Skalierte spezifische Wärme als Funktion der Teilchenzahl bei verschiedenen Temperaturen. $\tau = kT/\hbar\omega$ bezeichnet die Temperatur in Einheiten der Energieabstände in der Falle. Die Pfeile bezeichnen die Schalenabschlüsse bei $N = S_\nu$ für $\nu = 1, \dots, 11$ ($N = 4, 10, 20, 35, 56, 84, 120, 165, 220, 286, 364$). Die gestrichelten Linien repräsentieren die Sommerfeld-Näherung aus Gl. (2.28).

Stellen kann das System eine neue, völlig leere Schale auffüllen. Im Gegensatz dazu treten die Minima bei halb vollen Schalen auf, wenn ein weiteres Atom leicht ohne Erhöhung der Energie in die Fermi-Schale eingebaut werden kann. Abb. 2.6 zeigt die N -Abhängigkeit der Wärmekapazität ohne Reskalierungen.

In Abb. 2.4 gibt es noch ein anderes interessantes Detail: Die beiden Grenzkurven für vollständig gefüllte Schalen ($N = 84, 120, 9880$) bzw. für halb gefüllte Schalen ($N = 102, 142, 10270$) hängen nicht von der Schalennummer ν_F ab. Bis etwa $kT/\hbar\omega \approx 0.5$ scheint die Funktion $(6N)^{1/3}C/(Nk)$ nicht explizit von N abzuhängen, sondern nur von der relativen Füllung der Fermi-Schale. Der Grund hierfür ist, dass sich der Verlauf von $\mu(T)$ in Abb. 2.3 um jeden Wert für ν_F wiederholt.

Dichteverteilungen

Dichteverteilungen in Fallen können im Experiment recht einfach gemessen werden (siehe Kap.1.5.2). In einer isotropen Falle erwartet man radial symmetrische Verteilungen. Die radialen Wellenfunktionen $u_{n_r,l}$ (siehe z.B. Kap. 6 in [21]) werden durch eine radiale Quantenzahl n_r und durch den Drehimpuls l indiziert. Zu diesen gehören die Energien $E_{n_r,l} = \hbar\omega(2(n_r - 1) + l + 3/2)$, daher $\nu = 2(n_r - 1) + l$. Um die Gesamtdichte zu berechnen, muss man die Quadrate der Wellenfunktionen mit Gewichten n_ν aufsummieren

$$\rho(r) = \sum_{\nu=0}^{\infty} n_\nu(T) \sum_{n_r=1}^{[\nu/2]+1} \frac{2l+1}{4\pi} |u_{n_r,l}(r)|^2, \quad (2.29)$$

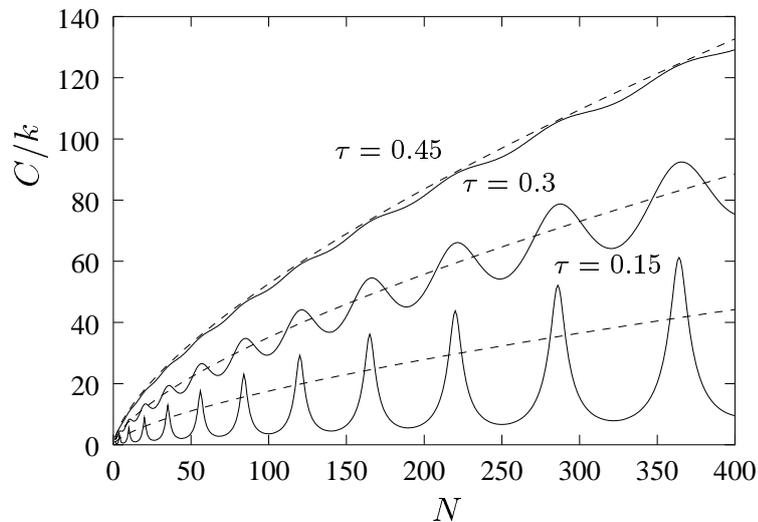


Abbildung 2.6: Spezifische Wärme als Funktion der Teilchenzahl bei verschiedenen Temperaturen. Wieder gilt $\tau = kT/\hbar\omega$.

dabei ist $l = \nu - 2(n_r - 1)$. Der Faktor $(2l + 1)/(4\pi)$ rührt von der Summation über die energetisch entarteten magnetischen Untereinstände mit $m = -l, \dots, l$ her. Die Dichte $\rho(r)$ wird in Abb. 2.7 für verschiedene Teilchenzahlen und Temperaturen dargestellt und mit dem Ergebnis bei $T = 0$ aus der Thomas-Fermi-Näherung [35] (siehe auch Gl. (2.35), $\lambda = 1$) verglichen. Dabei werden alle Längen mit der Breite des Grundzustands des harmonischen Oszillators $a_{\text{ho}} = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$ skaliert.

Für $N = 120$ (geschlossene Schale, $\nu_F = 7$) erkennt man ein zentrales Minimum, das bei $N = 142$ (halb volle Schale, $\nu_F = 8$) wieder verschwunden ist. Diese Schale wird bei $N = 165$ vollständig gefüllt, dort wiederum besitzt $\rho(r)$ ein Maximum bei $r = 0$. Diese N -Abhängigkeit der Dichte bei $r = 0$ hängt mit der Art zusammen, wie Fermi-Schalen mit ungeradem Index zu $\rho(0)$ beitragen: Sie enthalten nur Wellenfunktionen mit ungeradem Drehimpuls und diese verschwinden am Ursprung wegen ihrer ungeraden Parität. Die Kurven für $kT = 0.1\hbar\omega$ sind praktisch identisch mit denen für $T = 0$. Die Minima und Maxima sind bei $kT = 0.25\hbar\omega$ noch sichtbar, verschwinden aber für $kT > \hbar\omega$. Für nicht zu hohe Temperaturen nähert sich die Dichte dem Thomas-Fermi Ergebnis. Interessanterweise stimmt $\rho(r)$ für eine halb gefüllte Fermi-Schale ($N = 142$) sehr gut mit dieser Näherung überein.

2.2.2 Der anisotrope Fall

Chemisches Potential und Wärmekapazität

In Experimenten werden normalerweise Fallen verwendet, die zumindest eine kleine Anisotropie besitzen (siehe Kap. 1.5.2). In diesem Kapitel sollen aus diesem Grund deformierte Fallen mit dem Potential

$$V = \frac{M\omega^2}{2} \left(x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2 \right), \quad (2.30)$$

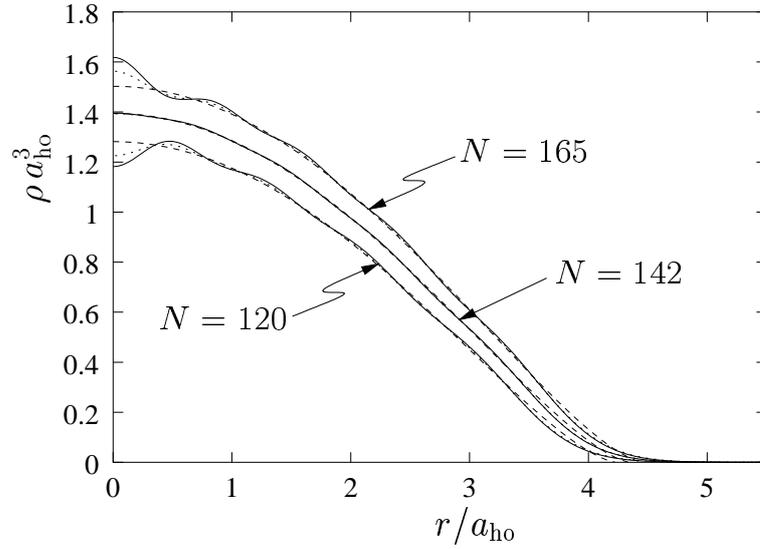


Abbildung 2.7: Räumliche Dichte ρ in einer isotropen Falle als Funktion des Abstandes von der Fallmitte für verschiedene Fermionenzahlen und Temperaturen. Der Skalierungsparameter $a_{ho} = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$ ist die Breite des Grundzustands des harmonischen Oszillators. Die durchgezogenen Linien bezeichnen $kT = 0.1\hbar\omega$, die gepunkteten $kT = 0.25\hbar\omega$ und die gestrichelten gehören zur Thomas-Fermi Näherung bei $T = 0$.

untersucht werden, d.h. die Flächen konstanter Energie sind entweder prolate (zigarrenförmige) oder oblate Ellipsoide. Die Eigenwerte des Hamiltonoperators sind dann

$$E_{\nu_r, \nu_z} = \hbar\omega \left(\nu_r + 1 + \lambda \left(\nu_z + \frac{1}{2} \right) \right), \quad (2.31)$$

wobei ν_r und ν_z die radialen bzw. longitudinalen Anregungen abzählen. Für festes ν_r gibt es $g_{\nu_r} = \nu_r + 1$ entartete Zustände mit unterschiedlichen Anregungen in die beiden symmetrischen, transversalen Richtungen (g_{ν_r} gleich der Anzahl an Partitionen von $\nu_r = \nu_x + \nu_y$). Die Zustände gleicher Energien werden mit (ν_r, ν_z) bezeichnet.

Die hier interessierenden Größen sind in ihrer N -Abhängigkeit bei Temperatur null komplizierter als im isotropen Fall. So macht es z.B. nur bei oblaten Fallen ($\lambda > 1$) Sinn, von Schalenabschlüssen zu reden, weil es nur dort energetisch sinnvoll ist, zunächst die transversalen Schalen mit der Entartung $g_{\nu_r} > 1$ aufzufüllen, bevor ein energetisch höher gelegener longitudinaler Zustand besetzt wird. Allerdings treten diese neuen Strukturen bedingt durch die kleineren Entartungsfaktoren nur auf kleineren Skalen der Teilchenzahl auf und sind im Experiment aufgrund der endlichen Messgenauigkeit der Atomzahl u.U. nicht gut aufzulösen.

Für $\lambda < 1$ (Zigarrenform) kann man alle Zustände bis zu einer Anregung (α_r, α_z) zählen

$$S_{\alpha_r, \alpha_z} = \sum_{\nu_r=0}^{\alpha_r + [\alpha_z \lambda]} g_{\nu_r} \left(\left[\frac{\alpha_r - \nu_r}{\lambda} \right] + \alpha_z + 1 \right), \quad (2.32)$$

hierbei bezeichnet $[x]$ die größte ganze Zahl kleiner oder gleich x . Somit sind $N = S_{\alpha_r, \alpha_z}$ Teilchen nötig, um alle Zustände bis zur Energie E_{α_r, α_z} zu besetzen. Für $\lambda > 1$ gibt es einen analogen Ausdruck. Im Allgemeinen kann man die exakte Fermi-Energie nur durch Aufsuchen

des niedrigsten Zustandes (ν_r, ν_z) mit $N \leq S_{\nu_r, \nu_z}$ bestimmen. Die Form der Thomas-Fermi-Näherung aus Gl. (2.12) ändert sich im Übrigen nur geringfügig [35]:

$$\tilde{E}_F = \hbar\omega(6N\lambda)^{1/3}. \quad (2.33)$$

Die Sommerfeld-Formel aus Gl. (2.13) für das chemische Potential gilt in dieser Form auch für anisotrope Fallenpotentiale.

Im Folgenden werden einige Ergebnisse für anisotrope Fallen diskutiert. Dabei soll der Schwerpunkt auf stark deformierten, zigarrenförmigen Fallen ($\lambda \ll 1$) liegen. Die Rechnungen orientieren sich an der Fallengeometrie aus [133] ($\omega = 2\pi \times 250\text{Hz}$, $\lambda = 0.076$). Zunächst wird die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials bei sehr tiefen Temperaturen betrachtet. Der Graph von $\mu(T)$ in Abb. 2.8 für 1000 Teilchen zeigt eine sehr verblüffende Eigenschaft:

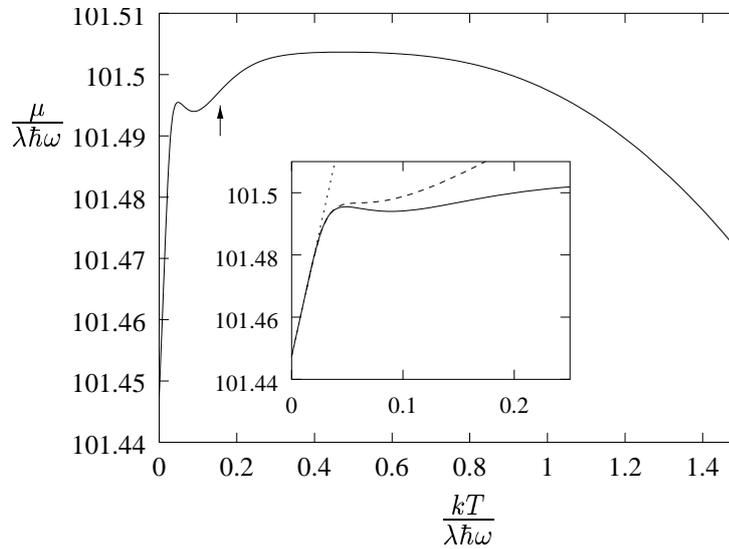


Abbildung 2.8: Chemisches Potential $\mu(T)$ für eine zigarrenförmige Falle mit $\lambda = 0.076$ und $N = 1000$. Der Pfeil bezeichnet die Energiedifferenz zwischen dem Fermi-Zustand und dem nächst höheren Zustand. Im Einschub werden die lineare und die nächst höhere Näherung für $\mu(T)$ dargestellt. Letztere berücksichtigt im Gegensatz zur linearen Näherung auch die Besetzung der Zustände direkt über und unter der Fermi-Kante. Der höchste besetzte Zustand ist $(5, 22)$, die zugehörige Fermi-Energie beträgt $E_F = 101.447\lambda\hbar\omega$.

Er startet bei $T = 0$ linear gemäß Gl. (2.24), nimmt dann aber ein lokales Maximum an. Der höchste besetzte Zustand bei $T = 0$ ist der Zustand $(5, 22)$; er ist sechsfach entartet ($g_{\nu_r} = 6$) und bietet bei $N = 1000$ noch Platz für $\Delta N = S_{5,22} - N = 5$ weitere Fermionen. Der nächst höhere Zustand ist $(6, 9)$. Eine Korrektur zur linearen Näherung, die diesen Zustand berücksichtigt, zeigt grundsätzlich, dass dieser Zustand für das lokale Maximum verantwortlich ist (siehe kleine Grafik in Abb. 2.8). Tatsächlich entspricht die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen ungefähr der Temperatur $kT = 0.157\hbar\omega\lambda$, bei der das Maximum auftritt (vgl. Pfeil in Abb. 2.8). Bei dieser Temperatur wird also der nächst höhere Zustand oberhalb der Fermi-Kante thermisch erreichbar.

Wie im isotropen Fall beginnt die spezifische Wärme von der Sommerfeld-Näherung abzuweichen, wenn die lineare Näherung für $\mu(T)$ nicht mehr gültig ist. Wenn man T in diesem Bereich

festhält, kann man wieder den Graph von $(6N\lambda)^{1/3} C/(Nk)$ als Funktion der Teilchenzahl auftragen (Abb. 2.9). Dieser besitzt Strukturen auf zwei verschiedenen Skalen der Teilchenzahl, die komplizierter sind als im isotropen Fall (siehe Abb. 2.5). Die großen Sprünge treten im-

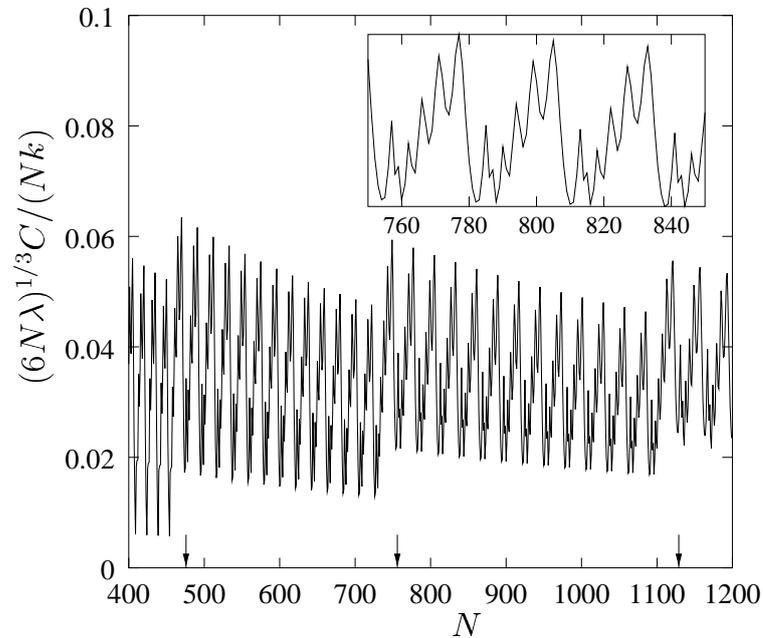


Abbildung 2.9: Skalierte spezifische Wärme für eine zigarrenförmige Falle als Funktion von N bei $kT/\hbar\omega = 0.044$. Die Pfeile markieren $N = S_{\alpha_r,0}$ ($\alpha_r = 5, 6, 7$). Die kleine Grafik zeigt den Bereich $750 < N < 850$ etwas genauer.

mer dann auf, wenn genug Fermionen vorhanden sind, um eine neue Schale des transversalen (radialen) Potentials zu füllen. Die Pfeile in Abb. 2.9 bezeichnen die entsprechenden Werte $N = S_{\alpha_r,0}$ für $\alpha_r = 5, 6, 7$. Zwischen zwei solchen Teilchenzahlen (z.B. $S_{\alpha_r,0}, S_{\alpha_r+1,0}$) gibt es 13 größere Maxima, die den $1/\lambda \approx 13$ longitudinalen Zuständen entsprechen, die bei $T = 0$ aufgefüllt werden müssen, bevor die nächste transversale Schale erreicht wird. Die feinere Substruktur (siehe kleine Grafik in Abb. 2.9) lässt sich ebenfalls erklären: Wenn man beim Zustand $(\alpha_r, 0)$ startet, so ist der nächste Zustand $(0, [\alpha_r/\lambda] + 1)$, der von $(1, [(\alpha_r - 1)/\lambda] + 1)$ gefolgt wird, usw. Es sollten also α_r Maxima auftreten, bevor $(\alpha_r, 1)$ erreicht wird. Ist $1/\lambda$ ganzzahlig, so verschwindet diese Substruktur, weil regelmäßige Entartungen auftreten.

Dichteverteilungen

Zur Berechnung der Dichteverteilung in einer zigarrenförmigen Falle wird deren transversale Symmetrie ausgenutzt. Man verwendet radiale Wellenfunktionen $\tilde{u}_{n_r,|m|}(r)$ des zweidimensionalen harmonischen Oszillators ($r^2 = x^2 + y^2$) mit der Drehimpuls-Quantenzahl $|m| = \nu_r - 2n_r$. Die Bewegung in longitudinaler Richtung wird durch die Wellenfunktionen $\psi_{n_z}(z)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators beschrieben und man erhält für die

Dichte

$$\rho(r, z) = 2 \sum_{\nu_r, \nu_z=0}^{\infty} n_{\nu_r, \nu_z}(T) \sum_{n_r=0}^{[\nu_r/2]} |\tilde{u}_{n_r, \nu_r-2n_r}(r) \cdot \psi_{n_z}(z)|^2, \quad (2.34)$$

wobei der Faktor 2 hier die zweifache Entartung der Zustände mit gegebenem $|m|$ berücksichtigt. $n_{\nu_r, \nu_z}(T)$ ist die Besetzungszahl gemäß der Fermi-Dirac-Statistik Gl. (2.6). Die hier berechneten numerischen Ergebnisse werden wieder mit der Thomas-Fermi-Näherung bei $T = 0$ verglichen

$$\rho_{\text{TF}}(r, z) = \frac{N\lambda}{R_{\text{F}}^3} \frac{8}{\pi^2} \left(\frac{r^2 + \lambda^2 z^2}{R_{\text{F}}^2} \right)^{3/2}, \quad (2.35)$$

hierbei ist $R_{\text{F}} = (48N\lambda)^{1/6} a_{\text{ho}}$ der so genannte „Fermi-Radius“ der Dichteverteilung.

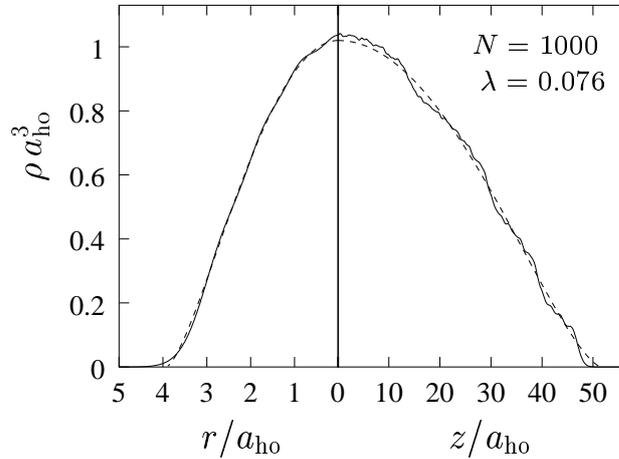


Abbildung 2.10: Dichteverteilung ρ für eine zigarrenförmige Falle. Im linken Teil ist die Dichte in transversaler Richtung bei $z = 0$ dargestellt, der Graph rechts gehört zur Dichte in longitudinaler Richtung auf der Symmetrieachse ($x = y = 0$). Die durchgezogenen Linien repräsentieren das numerische Ergebnis für $T \rightarrow 0$, die gestrichelten Kurven gehören zur Thomas-Fermi-Näherung Gl. (2.35). Der „Fermi-Radius“ in longitudinaler Richtung ist etwa $1/\lambda \approx 13$ mal größer als in transversaler Richtung.

Die Diskussion der Dichteprofile soll hier auf die Dichten $\rho(r, 0)$ in der Symmetrieebene bzw. $\rho(0, z)$ auf der Symmetrieachse der Falle beschränkt werden (siehe Abb. 2.10). In transversaler Richtung zeigt die Dichte bei $T = 0$ nur sehr kleine Abweichungen von der Thomas-Fermi-Dichte aus Gl. (2.35). Im Gegensatz dazu besitzt die longitudinale Verteilung (rechter Teil der Abb. 2.10) Oszillationen um die Thomas-Fermi-Kurve. Diese beruhen vor allem auf dem stufenförmigen Verhalten der Besetzungszahlen N_{ν_z} der Oszillatorzustände in longitudinaler Richtung, die beim Auffüllen eines neuen transversalen Zustandes auftreten. Die Stufen in N_{ν_z} haben eine Breite von $1/\lambda$. Des Weiteren fällt N_{ν_z} viel langsamer ab (mittlere Steigung $\propto -\lambda$) als die Besetzungszahlen $N_{\nu_{x,y}}$ für die transversalen Zustände (mittlere Steigung $\propto -1/\lambda$). Somit ist der Beitrag höherer Oszillatorzustände zum longitudinalen Dichteprofil größer als der entsprechende Beitrag zum transversalen Profil, sodass man die Maxima und Minima der höheren Zustände im ersten Fall in der Dichte erkennen kann, im zweiten aber nicht.

Die Fermi-Dirac-Statistik führt in den hier nicht näher besprochenen oblaten Fallen zu ganz ähnlichen Effekten wie in prolaten. Das Verhalten der beiden Dichteprofile vertauscht sich, die im vorherigen Absatz diskutierten Oszillationen tauchen dann im transversalen Dichteprofil auf und verschwinden im longitudinalen.

2.2.3 Résumé

Die in den letzten Abschnitten vorgestellten Rechnungen zeigen, dass bemerkenswerte quantenstatistische Schaleneffekte in gefangenen Fermigasen bis zu etwa $N = 1000$ Teilchen beobachtbar sein sollten. Für größere Teilchenzahlen sind die semiklassischen Überlegungen in [35, 154] ausreichend.

In *realen* Fermigasen gibt trotz der Pauli-Unterdrückung der s -Wellenstreuung immer noch Beiträge zur Atom-Atom-Wechselwirkung aus der erlaubten p -Wellenstreuung, z.B. aufgrund der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Diese werden im Experiment zu einer zusätzlichen Abhängigkeit des chemischen Potentials von der Teilchenzahl führen, wodurch die Stufen (z.B. in Abb. 2.2) ausgeschmiert werden. Dieser Effekt wird vor allem von dem Verhältnis der Wechselwirkungsenergie zum Abstand der Energieniveaus $\hbar\omega$ in der Falle abhängen. Somit sollten die Stufen in $\mu(N)$ in sehr steilen Fallen besonders gut sichtbar werden.

In [32] haben Bruun und Burnett das hier untersuchte System auf zwei gefangene, unterscheidbare Fermion-Spezies erweitert, die durch s -Wellenstreuung miteinander wechselwirken können. Befinden sich gleich viele Atome jeder Sorte in der Falle, so findet man ganz ähnliche Ergebnisse wie im hier diskutierten Fall. Es zeigt sich, dass für realistische Parameter für die Falle und für die s -Wellenstrecklänge trotz der vorhandenen Wechselwirkung die Stufen im chemischen Potential auch noch bei mehreren zehntausend Teilchen in der Falle erkennbar bleiben.

Für eine Beobachtung der vorhergesagten Effekte müssen sehr kleine Temperaturen erreicht werden, für eine Falle mit $\omega = 2\pi \times 250$ Hz [133] z.B. unter 5 nK. Erscheint dieser Temperaturbereich für Bosonen noch erreichbar, so wurden in Experimenten mit Fermionen [50] bisher jedoch nur Temperaturen bis 400 nK erreicht. Allerdings befanden sich dabei über hunderttausend Atomen in der Falle, sodass der hier interessierende Temperaturbereich mit weniger als tausend Fermionen hoffentlich nicht zu weit von den experimentellen Möglichkeiten entfernt ist.

2.3 Neuere Entwicklungen

Neben den Untersuchungen an idealen, mesoskopischen Fermigasen [174] gibt es mittlerweile eine ganze Reihe weiterer Erkenntnisse über die Eigenschaften gefangener fermionischer Atome. Um dieses Kapitel abzuschließen, wird der aktuelle Stand der Forschung auf diesem Gebiet im Folgenden anhand einiger Beispiele skizziert und erläutert.

Fermionische Gemische

Bei der Behandlung von Gemischen verschiedener Spinzustände eines fermionischen Atoms stehen die Berechnung der kollektiven Anregungen und deren Dämpfung im Vordergrund [32, 33, 194]. Dabei muss man zwischen dem *hydrodynamischen* und dem so genannten *kollisionsfreien* Bereich im Phasendiagramm unterscheiden: Falls die Zeit zwischen Stößen von

Atomen und damit die Lebensdauer τ einer Anregung klein ist verglichen mit der Oszillationsperiode in der Falle ($\omega\tau \ll 1$), so spricht man von hydrodynamischen Oszillationen, die den gewöhnlichen Schallschwingungen entsprechen. Gilt hingegen $\omega\tau \gg 1$, so spricht man vom kollisionsfreien Regime. In Fermigasen bei $T = 0$ sind Stöße durch das Pauli-Prinzip immer unterdrückt, es liegt also stets ein kollisionsfreies Regime vor. Die zugehörigen kollektiven Anregungen werden nur durch den Quantendruck bestimmt, in völliger Analogie zum so genannten *nullten Schall* in der Theorie der Fermi-Flüssigkeiten [152]. Bei Temperaturen weit jenseits der Fermi-Temperatur verhält sich ein Fermigas ebenfalls kollisionsfrei, da die Wechselwirkungen relativ zur kinetischen Energie vernachlässigt werden können. Hydrodynamisches Verhalten ist zwischen den beiden Extremen zu finden, für ${}^6\text{Li}$ mit seiner großen Streulänge ($a \approx -2160 a_{\text{Bohr}}$) reicht der hydrodynamische Bereich für 10^6 Atome hinunter bis zu $T \approx 0.1 T_{\text{F}}$ [33], ${}^{40}\text{K}$ ist für experimentell realistische Parameter immer in einem kollisionsfreien Regime.

Fermi-Bose-Gemische

Will man ein entartetes Fermigas erzeugen, so muss man natürlich die dazu notwendigen, tiefen Temperaturen durch einen Kühlprozess erreichen. Die bei Bosonen erfolgreich eingesetzte Verdampfungskühlung (siehe Kapitel 1.5.2) kann prinzipiell auch für Fermionen verwendet werden, dabei gibt es allerdings zwei Probleme: Zunächst einmal wechselwirken Fermionen einer Spezies, wie in Kapitel 2.1 beschrieben, fast nicht. Es gibt somit keine thermalisierenden, elastischen Stöße, die aber für das Verdampfungskühlen notwendig sind. Dies lässt sich umgehen, indem man zwei fermionische Spezies verwendet, die durchaus untereinander elastisch stoßen können (*sympathetisches Kühlen*). Dabei tritt aber das zweite Problem zu Tage: Bei Temperaturen unterhalb der Fermi-Temperatur ist ein großer Teil der bei einem elastischen Stoß erreichbaren Endzustände schon besetzt, diese so genannte *Fermi-Blockade* unterdrückt wiederum die Rate für elastische Stöße. Diese Blockade kann man zumindest teilweise dadurch aufheben, dass man eine der beiden fermionischen Atomsorten durch eine bosonische ersetzt.

Ganz analog zu bosonischen Gemischen [144] ist es von Interesse, die thermodynamischen Eigenschaften, Dichteprofile und kollektiven Anregungen zu untersuchen. In [138, 153] wurden zunächst die Dichteverteilungen solcher Gemische bei $T = 0$ berechnet. Stoßen sich Bosonen und Fermionen zu stark ab, so kommt es zu einer Separation der beiden Komponenten: In radialsymmetrischen Fallen bilden die Fermionen entweder eine Wolke um ein zentrales Bose-Kondensat oder Bosonen kondensieren außerhalb einer zentralen entarteten Wolke aus Fermionen. In langen zigarrenförmigen Fallen kann es sogar zu einer Brechung der Spiegelsymmetrie $z \rightarrow -z$ kommen, sodass sich die Fermionen auf einer Seite der Falle und die Bosonen auf der anderen Seite niederlassen.

Die Untersuchungen bei $T = 0$ wurden in [4, 193] mithilfe semiklassischer Mean-Field-Methoden auf $T > 0$ erweitert. Dabei werden das Fermigas, der kondensierte und der nicht-kondensierte Anteil der Bosonen als drei Flüssigkeiten aufgefasst, die über ihre lokale Dichte miteinander wechselwirken. Die Ergebnisse sind von Relevanz für die Experimente in Florenz [38, 189] mit einem ${}^{39}\text{K}$ - ${}^{40}\text{K}$ -Gemisch; neben Dichteprofilen wurde die im Experiment nach Expansion frei werdende *Release-Energy* berechnet.

Suprafluide Fermigase

Kühlt man ein Gemisch aus zwei attraktiv wechselwirkenden fermionischen Atomsorten (negative s -Wellenstreuungslänge) unter eine kritische Temperatur T_c ab, so können je zwei Atome in völliger Analogie zur BCS-Theorie der Supraleitung von Elektronen ein Cooper-Paar bilden. In [184] wurde erstmals darauf hingewiesen, dass ${}^6\text{Li}$ ein guter Kandidat für solche Experimente sein könnte, da die s -Wellenstreuungslänge $a \approx -2160 a_{\text{Bohr}}$ für Stöße zwischen zwei der sechs Hyperfeinzustände (siehe Kap. 2.2) sehr groß ist. Die Übergangstemperatur liegt für identische Anzahlen von Atomen beider Sorten für typische experimentelle Parameter bei 50–200 nK [31, 95] und erscheint – verglichen mit den tiefsten Temperaturen in Bosegasen – erreichbar, wenn auch zunächst noch das im vorherigen Abschnitt angesprochene Kühlproblem gelöst werden muss. Da nur Fermionen auf der Fermi-Fläche Cooper-Paare bilden, nimmt T_c für nicht identische Teilchenanzahlen (bei gleicher Masse) exponentiell ab, weil sich dann die Fermi-Flächen gegeneinander verschieben. Dieses Verhalten stellt wiederum ein experimentelles Problem dar, da die Teilchenzahl nur schwer genau zu kontrollieren ist.

Die Dichteverteilung eines suprafluiden Fermigases in einer harmonischen Falle wurde in [95] berechnet. Da nur ein geringer Teil der Fermionen an der Fermi-Kante überhaupt Cooper-Paare bildet, unterscheiden sich die Dichteprofile normaler und suprafluider Wolken nur sehr wenig voneinander. Aus diesem Grund unterscheiden sich die Anregungsfrequenzen eines suprafluiden Fermigases ebenfalls nur wenig von denen des normalen Gases [95], sodass die bei Bose-Einstein-Kondensaten so erfolgreichen Messungen dieser Frequenzen hier nicht zum Nachweis der suprafluiden Phase dienen können. Der Vergleich der niederenergetischen kollektiven Anregungen im suprafluiden Gas [15] mit den Anregungen im hydrodynamischen Bereich eines normalen Fermigases [33] bestätigt diese Aussage. Neben diesen kollektiven Anregungen der Fermi-Wolke gibt es aber noch weitere Anregungen, die durchaus von der Präsenz der suprafluiden Phase abhängen können. In [14] wird gezeigt, dass es in diesem Fall neue Einteilchenanregungen gibt, deren Wellenfunktionen im äußeren Bereich der eigentlichen Wolke lokalisiert sind. Sie ähneln damit den Oberflächenanregungen von Bose-Einstein-Kondensaten [44].

Da der Nachweis der suprafluiden Phase mittels Messung kollektiver Anregungen schwer ist, wurden auch alternative Methoden vorgeschlagen. Dabei handelt es sich vor allem um Verfahren, bei denen entweder Fremdatome oder Licht an einem Fermigas gestreut werden. Liegen keine Cooper-Paare vor, so führt das Pauli-Prinzip zu einer Unterdrückung der spontanen Emission von Licht [34] bzw. zu einer Verschiebung der Resonanzlinie und einer Verkleinerung ihrer Breite [168]. Die Bewegung eines Fremdatoms wird durch die Pauli-Blockade weniger gedämpft als in einem Boltzmann-Gas [62].

Bei einem suprafluiden Fermigas hingegen wird Licht relativ zum normalen Fermigas zumindest in gewisse Richtungen stärker gestreut [166, 167, 197]. Dies liegt am bosonischen Charakter der Cooper-Paare, die gerade den für die Streuung an Fermigasen wichtigen Bereich um das chemische Potential modifizieren. Die Resonanzlinie der Lichtstreuung wird in der suprafluiden Phase verbreitert und erleidet eine größere Verschiebung als im normalfluiden Fall [167], beide Effekte könnten zur Identifizierung des BCS-Übergangs verwendet werden.

Experimente mit entarteten Fermigasen

Schon seit einiger Zeit gibt es Versuche, fermionische Isotope von Alkali-Elementen mit optischen und magnetischen Mitteln zu fangen und zu kühlen [195]. Erst im letzten Jahr gab es dabei große Fortschritte, so wurde in [137] erstmals Sub-Dopplerkühlen bis $15 \mu\text{K}$ an ${}^{40}\text{K}$

realisiert. Um unter die Fermi-Temperatur (ca. $1 \mu\text{K}$ bei den verwendeten Teilchenzahlen) zu gelangen, muss also auf jeden Fall Verdampfungskühlen eingesetzt werden, wozu aufgrund der oben dargelegten Probleme mehr als eine Fermion-Spezies benötigt wird.

In [50] haben de Marco und Jin zum ersten mal über Experimente mit zwei gefangenen Spin-zuständen von ^{40}K berichtet, bei denen die Fermi-Temperatur T_F deutlich unterschritten werden konnte. Ein Gas von etwa 7×10^5 Atomen konnte auf $T \approx 0.5 T_F$ sympathetisch abgekühlt werden, wobei die Starttemperatur für die Verdampfungskühlung bei $150 \mu\text{K}$ lag. Die Gesamtenergie aus Gl. (2.26) für ein Fermigas ist aufgrund des Pauli-Verbots höher als im klassischen Boltzmann-Gas, der Verlauf dieser Größe mit fallender Temperatur konnte im Experiment eindrucksvoll bestätigt werden. Auch die Analyse der Impulsverteilung zeigte die für Fermionen gegenüber klassischen Teilchen verbreiterte Kurve, da durch das Pauli-Prinzip höherenergetische Zustände besetzt werden müssen.

Neben den Experimenten am fermionischen Kalium gibt es auch erste Untersuchungen mit Lithium. Die geringe Masse der Lithiumatome macht eine effiziente Laserkühlung aufgrund der hohen Rückstoßenergien schwierig. In [134] wird ein Experiment mit einem Fermi-Bose-Gemisch aus ^6Li und ^7Li vorgestellt. Es ist bisher gelungen, ca. 10^9 Atome jeder der beiden Spezies zu fangen und bis auf 0.7 mK abzukühlen. Die Phasenraumdicke liegt dann bei etwa 10^{-6} , dies könnte ausreichend hoch sein, um mit sympathetischem Verdampfungskühlen in den Bereich der Fermi-Entartung zu gelangen.

Abschließend bleibt zu bemerken, dass die experimentelle Entwicklung bei der Untersuchung entarteter gefangener Fermigase erst an ihrem Anfang steht. Die Realisierung eines suprafluiden Fermigases aus schwach wechselwirkenden neutralen Fermionen darf vor dem Hintergrund der theoretischen Arbeiten durchaus innerhalb der nächsten Jahre erwartet werden.

3

Atomlaser

Herkömmliche kontinuierliche Laser erzeugen sehr monochromatisches Licht hoher Kohärenz. Durch diese Eigenschaften haben optische Laser zunächst die wissenschaftlichen, dann aber auch die technischen Anwendungsbereiche der Optik revolutioniert. Motiviert durch diesen Erfolg ist es ein zentrales Ziel der Atomoptik, die sich seit der Erfindung und Entwicklung der Laserkühlung von Atomen in den 80er Jahren des letzten Jahrhunderts ebenfalls stürmisch entwickelt hat, kohärente Atomstrahlen zu erzeugen, die für die wissenschaftliche Forschung ein ähnlich breites Anwendungspotential wie Laser haben sollten.

Für Apparaturen, die solche kohärenten Atomstrahlen erzeugen, hat sich in den letzten Jahren der Begriff *Atomlaser* etabliert; dies nicht zuletzt aufgrund der in vielen Realisierungsvorschlägen erkennbaren Analogie zum optischen Laser.

Die Bose-Einstein-Kondensaten inhärente Kohärenz bietet für die Erzeugung kohärenter Atomstrahlen einen sehr guten Ausgangspunkt. 1997 gelang es der Ketterle-Gruppe am MIT erstmals, einen gepulsten, kohärenten Atomstrahl mittels starker Radiofrequenz-Pulse aus einem Bose-Einstein-Kondensat auszukoppeln [132]. Andere Gruppen [5, 24, 81] haben den Auskoppelmechanismus verfeinert¹; die Gruppe um Hänsch konnte erstmals wirklich kontinuierliches Auskoppeln mit einem schwachen Radiofrequenzfeld demonstrieren [24]. All diesen Experimenten fehlt allerdings eine wesentliche Eigenschaft: Sie produzieren nur für eine kurze Zeit (< 0.2 s) einen Atomstrahl, weil sie nur ein bestehendes Bose-Einstein-Kondensat leeren ohne es kohärent nachzufüllen. Für einen solchen Nachlademechanismus gibt es einige Vorschläge, die in Abschnitt 3.1.1 kurz vorgestellt werden. Zuvor wird im nächsten Abschnitt auf die Definition eines Atomlasers und die Analogie zu optischen Lasern eingegangen.

3.1 Was ist ein Atomlaser?

Welche Eigenschaften muss eine Apparatur besitzen, um als Atomlaser bezeichnet zu werden? Dieser Frage ist Wiseman in [205] sehr detailliert nachgegangen (siehe auch [157]). Er stellte Kriterien auf, die sich vor allem auf die Eigenschaften des produzierten Atomstrahls beziehen. Der Atomstrahl soll eine kohärente Materiewelle sein, die soweit wie möglich durch eine klassische Welle mit definierter Intensität und Phase beschrieben werden kann. Diese Forderung schließt gepulste Laser zunächst aus, erleichtert aber die mathematische Formulierung der Definition eines Atomlasers. Sie bezieht sich nur auf Bosonen, da das Pauli-Prinzip die Besetzung

¹Für weitere Details siehe Kap. 3.1.2

einer Bewegungsmode mit mehr als einem Fermion verbietet.

Wisemans Definition umfasst vier Forderungen:

1. Der Atomstrahl soll gerichtet sein, d.h. man sollte überhaupt von einem Strahl sprechen können.
2. Der Atomstrahl soll monochromatisch sein, also einer Welle mit einer festen Frequenz ω entsprechen. Genauer gesagt, soll die mittlere Schwankung $\delta\omega$ viel kleiner als die Frequenz selber sein $\delta\omega \ll \omega$.
3. Die Intensitätsfluktuationen, die quantenmechanischen oder thermischen Ursprungs sein können, sollen klein gegen die mittlere Intensität sein, sodass er Atomstrahl in zweiter Ordnung kohärent ist.
4. Die Phasenfluktuationen sollen ebenfalls klein sein, d.h. die Materiewelle soll auch in erster Ordnung kohärent sein. Anders formuliert heißt dies, dass die Kohärenzzeit τ_{koh} , die mittels der zeitlichen Korrelationsfunktion erster Ordnung definiert wird, groß ist gegen die inverse Intensität I , also $\tau_{\text{koh}}I \gg 1$.

Wiseman zeigt weiter, dass die vierte Bedingung äquivalent ist zu der recht anschaulichen Forderung, dass der Atomstrahl entartet sein muss, d.h. dass viele bosonische Atome wenige Bewegungsmoden bevölkern oder dass die de Broglie-Wellenlänge viel größer ist als der mittlere Abstand von Atomen.

Die obigen Forderungen können so oder ähnlich auch für optische Laser gelten. Neben dieser Analogie der Strahleigenschaften ist aber auch die Terminologie für den schematischen Aufbau von Atomlasern von ihren optischen Vorläufern übernommen worden. Dem optischen Resonator, der ein diskretes Modenspektrum ermöglicht, entspricht bei Atomen die (meist harmonische) Atomfalle. Das Bose-Einstein-Kondensat in einer Falle wird demgemäß als Lasermode bezeichnet, mittels eines Auskoppelmechanismus (analog den teildurchlässigen Spiegeln für Licht) wird diese zu einem Atomstrahl ausgekoppelt.

Um den Teilchenverlust beim Auskoppeln auszugleichen, werden einer so genannte „Quellmode“ (sozusagen das *aktive Medium*), die meist aus einer Gruppe hochliegender Zustände der Atomfalle besteht, von außen Atome zugeführt, die z.B. aus einem vorgekühlten Strahl stammen. Aus dieser Quellmode müssen dann auf irreversible Weise Atome in die Lasermode transferiert werden.

3.1.1 Vorschläge für Nachlademechanismen

Beim Nachladen des Bose-Einstein-Kondensats müssen Atome aus der Quellmode durch einen Kühlprozess in die Kondensatmode transferiert werden. Dieser Prozess soll *stimuliert* ablaufen, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit von der Quelle in die Lasermode soll proportional zu deren Besetzung sein, um genau diesen Übergang zu favorisieren. Diese so genannte *bosonische Stimulierung* wurde experimentell durch die Verstärkung einer kleinen Wolke aus bosonischen Atomen beim Durchgang durch ein Bose-Einstein-Kondensat in eindrucksvoller Weise gezeigt [103]. Für die physikalische Realisierung dieses Prozesses gibt es zwei Arten von Vorschlägen: Optische Verfahren, die auf der bosonisch verstärkten spontanen Emission von Photonen beim Übergang von angeregten Atomen in der Quellmode in die Lasermode beruhen, und Verfahren, die auf Verdampfungskühlen basieren. Erst kürzlich wurden diese beiden Methoden kombiniert [18].

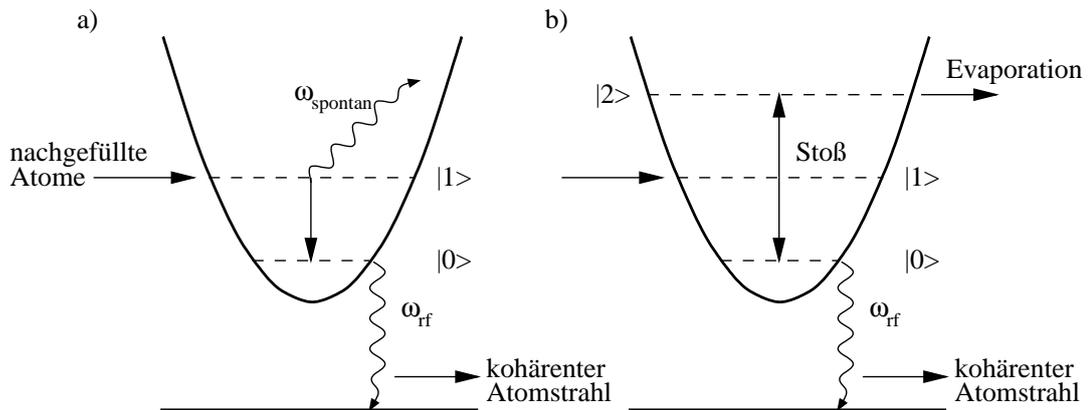


Abbildung 3.1: Schema eines Atomlasers. Aus einem kalten Atomstrahl werden Atome inkohärent in die Quellmode $|1\rangle$ („aktives Medium“) nachgefüllt. In Bild a) handelt es dabei um angeregte Atome, die durch Bose-stimulierte spontane Emission in den Grundzustand, also die Lasermode $|0\rangle$ (Bose-Einstein-Kondensat), übergehen. Andere Prozesse, die als Verlustkanäle wirken, werden der Übersichtlichkeit halber nicht gezeigt. Bild b) beschreibt einen Atomlaser, der auf elastischen Stößen von Grundzustandsatomen und evaporativem Kühlen beruht. Die nachgefüllten Atome erreichen die Falle bereits im Grundzustand und führen in der Quellmode elastische Stöße aus. Dabei gelangt ein Stoßpartner durch Bose-Verstärkung in das Bose-Einstein-Kondensat, der andere erreicht ein energetisch höheres Niveau $|2\rangle$, von dem aus er durch Verdampfungskühlen aus der Falle entfernt wird. Der Auskoppelmechanismus kann in beiden Fällen der gleiche sein.

Spontane Emission In Abb. 3.1 a) wird das Schema eines auf optischer Kühlung basierenden Atomlasers gezeigt [140, 155, 180]. Angeregte Atome aus einem vorgekühlten Atomstrahl gelangen in den Fallenbereich und werden durch optisches Kühlen abgebremst. Sie besetzen dort die Quellmode und fungieren so als aktives Medium. Ein schon erzeugtes Bose-Einstein-Kondensat im elektronischen Grundzustand bildet die Lasermode. Durch spontane Emission von Photonen wechseln Atome in das Kondensat, wobei dessen starke Besetzung den Übergang bosonisch verstärkt.

Wesentliches Problem dieses Ansatzes ist die Reabsorption der spontan emittierten Photonen, die zu einem Verlust von Atomen in der Lasermode führt. Eine Möglichkeit, dies zu umgehen, besteht in der Verwendung langer, dünner Kondensate, bei denen spontan emittierte Photonen nur sehr kurze Wege durch das Kondensat zurücklegen. In einem kürzlich erschienenen Artikel [18] wird vorgeschlagen, Atome aus dem Pumpstrahl zunächst mit einem intensiven, fokussierten Laser anzuregen. Das Spektrum der spontan emittierten Photonen wird aufgrund des starken Laserfelds in zwei Maxima aufgespalten (Autler-Townes-Dublett), sodass diese Photonen außerhalb des fokussierten Lasers nicht mehr resonant reabsorbiert werden können. Der Fokus des Lasers liegt im Bereich der thermischen Wolke um das Kondensat, die auf diese Weise als Quellmode fungiert. Die Population des Bose-Einstein-Kondensats wird dann durch Stöße zwischen Atomen dieser Mode erhöht, bei denen durch Bose-Verstärkung ein Atom in das Kondensat, das andere in einen höher gelegenen Zustand übergeht.

Evaporatives Kühlen Die zweite Methode, einen Atomlaser kontinuierlich nachzuladen, beruht ausschließlich auf solchen binären Stößen (vgl. Abb. 3.1 b)) [89, 204, 205]. Atome in der Quellmode, die sich im elektronischen Grundzustand befinden, führen elastische Stöße mitein-

ander aus, die durch die s -Wellenstreuung beschrieben werden. Die Rate für einen Stoß, bei dem ein Partner in das mit N Teilchen besetzte Kondensat übergeht und der andere in einen energetisch höher liegenden Fallenzustand (in Abb. 3.1 b) ist dies der Zustand $|2\rangle$), ist proportional zur Besetzung $N+1$, d.h. dieser Übergang erfährt Bose-Verstärkung. Das noch gefangene Atom in $|2\rangle$ kann die Atomwolke aufheizen und muss noch beseitigt werden. Dies wird wie im Bild angedeutet durch Verdampfungskühlen mittels eines Radiofrequenzfeldes erreicht (vgl. Kap. 1.5.2).

3.1.2 Auskoppelmethode und Experimente

Da zur Realisierung eines kontinuierlichen Nachladevorgangs größere experimentelle Hürden zu überwinden sind, haben sich die bisherigen Experimente zu Atomlasern vor allem mit Mechanismen zur kohärenten Auskopplung von Atomen aus der Lasermode in den freien Raum befasst.

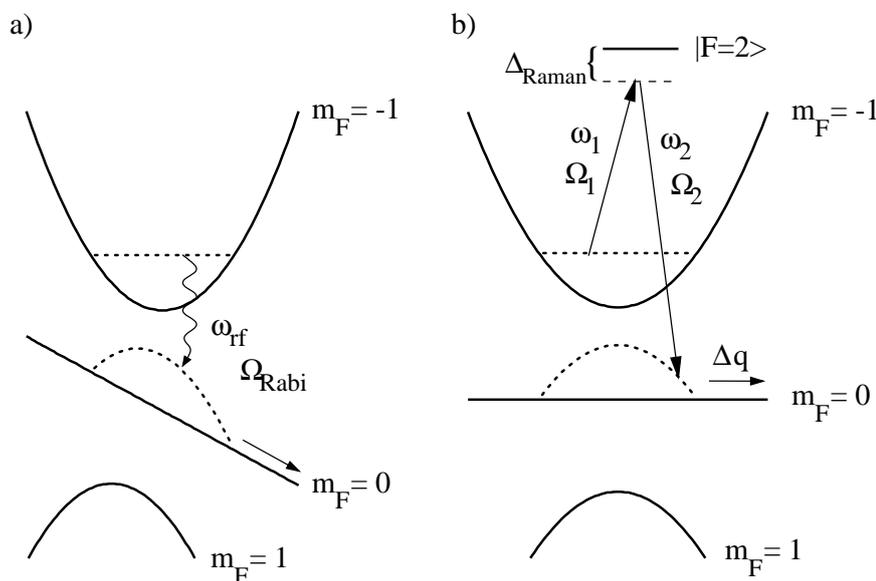


Abbildung 3.2: Auskoppelmethode für einen Atomlaser. In beiden Grafiken werden die Fallenzustände für ^{87}Rb -Atome im Hyperfeinzustand $|F=1\rangle$ dargestellt mit einem Bose-Kondensat im magnetischen Unterzustand $|m_F = -1\rangle$. Die gestrichelten Linien deuten die effektiven Potentiale aufgrund des Mean-Field-Potentials dieses Kondensats an. In Bild a) wird ein Radiofrequenz-Koppler skizziert. Durch Einstrahlen eines Radiofrequenzfeldes geeigneter Frequenz ω_{RF} wird ein Übergang $|m_F = -1\rangle \rightarrow |m_F = 0\rangle$ induziert. Ω_{Rabi} bezeichnet die Rabifrequenz des Übergangs. Im Zustand $|m_F = 0\rangle$ sind die Atome frei, sie fallen aufgrund des Gravitationsfeldes der Erde beschleunigt nach unten (in der Grafik nach rechts). Bild b) beschreibt einen Raman-Auskoppler. Hier werden zwei Laser mit den Frequenzen $\omega_{1,2}$ eingestrahlt, die einen Ramanübergang über einen Hilfszustand mit $F=2$ induzieren. Die Impulsdifferenz $\mathbf{p} = \Delta\mathbf{q}$ der beiden Laser wird dabei auf die ausgekoppelten Atome übertragen, sodass dem resultierenden Atomstrahl eine beliebige Richtung gegeben werden kann. $\Omega_{1,2}$ sind die zugehörigen Rabifrequenzen, Δ_{Raman} bezeichnet die Ramanverstimmung gegenüber dem oberen Zustand.

Wie bereits angemerkt, gelang es der Gruppe um Ketterle 1997 erstmals, einen gepulsten kohärenten Atomstrahl aus einem Bose-Einstein-Kondensat zu erzeugen [132]. Allerdings entsprach dieses Experiment noch eher einem Ein- und Ausschalten des Fallenzustands, bei dem

während der Ausphase ein Teil des Kondensats aus der Falle nach unten fällt. Der Auskoppler wurde mithilfe eines Radiofrequenzfeldes realisiert, das wie beim Verdampfungskühlen (siehe Seite 27) eine Änderung des Gesamtdrehimpulses der Atome induziert, sodass diese nicht mehr im Potential der Falle gefangen sind (vgl. Gl. (1.74)), also ausgekoppelt werden. In [11] wurde ein solcher Radiofrequenz-Auskoppler erstmals theoretisch beschrieben, weitere numerische Untersuchungen finden sich in [145, 146, 181, 209]. In Abb. 3.1.2 a) ist der Auskoppelprozess schematisch dargestellt.

In [5] beschreiben Anderson und Kasevich ein weiteres Experiment mit einem kohärenten Auskoppelmechanismus, in dem ein Bose-Einstein-Kondensat zunächst adiabatisch in ein vertikal orientiertes optisches Gitter umgeladen wurde. Die sich dabei in den Potentialmulden des Gitters ansammelnden Atomwolken sind untereinander kohärent und beginnen sofort, aus dem optischen Potential heraus nach unten zu fallen. Dabei interferieren sie und bilden analog zu einem modengekoppelten Laserstrahl einen gepulsten Atomstrahl, der über seine gesamte Länge kohärent ist.

Eine dritte Methode zum kohärenten Auskoppeln wurde von Moy *et al.* [140] vorgeschlagen. Sie basiert auf einem stimulierten Ramanübergang vom Bose-Einstein-Kondensat in einen ungefangenen Zustand (siehe Abb. 3.1.2 b)). In Bill Phillips' Gruppe wurde ein solcher Raman-Atomlaser realisiert [81]; der Ramanübergang wurde dabei mit gepulsten Lasern induziert, die analog zu Experimenten mit stimulierter Lichtstreuung (siehe Seite 29) verwendet wurden. Der Vorteil dieser Methode ist, dass man den ausgekoppelten Atomen einen Impuls $\mathbf{p} = \Delta\mathbf{q}$ mitgeben kann, der sich aus der Impulsdifferenz $\Delta\mathbf{q}$ der beiden Laser ergibt. Auf diese Weise kann man die Richtung des Atomstrahls vorgeben, was beim Radiofrequenz-Auskoppler, wo die Atome nur nach unten fallen, nicht möglich ist. In [55] wird die Theorie des Raman-Auskopplers sehr ausführlich beschrieben.

Die erste experimentelle Demonstration eines wirklich kontinuierlichen Auskopplers gelang der Gruppe um T.W. Hänsch mittels eines schwachen Radiofrequenzfeldes [24]. Auch hier fehlt ein kontinuierlicher Nachlademechanismus, durch die kleine Auskoppelrate sind immerhin Strahlzeiten bis ca. 100 ms möglich. Mit diesem Atomlaser konnte z.B. zum ersten Mal die räumliche Korrelationsfunktion (oder Einteilchendichtematrix, siehe Seite 11) eines Bose-Einstein-Kondensates gemessen werden [22, 24]. Die Untersuchungen in dieser Arbeit konzentrieren sich vor allem auf die theoretische Beschreibung und Analyse von Radiofrequenz-Atomlasern, wie sie in der Hänsch-Gruppe eingesetzt werden.

3.2 Theoretische Modellierung

In diesem Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen beschrieben, die für die Untersuchung der Eigenschaften von Atomlasern im Folgenden relevant sind. Dabei werden die im Rahmen der Dissertation erzielten Ergebnisse [171–173] vorgestellt und vertieft.

Die Dynamik eines gefangenen Bose-Einstein-Kondensats, das durch eine Radiofrequenz oder durch einen stimulierten Ramanübergang ausgekoppelt wird, kann durch einen Vielteilchen-Hamiltonoperator beschrieben werden, der neben dem kinetischen Anteil, dem äußeren Potential und dem effektiven Potential für s -Wellenstreuung auch einen Anteil enthält, der die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld beschreibt

(siehe auch Abschnitt 1.2.1) [106, 145]:

$$\begin{aligned}
\hat{H}(t) = & \sum_j \int d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_j(\mathbf{x}) \right\} \hat{\Psi}_j(\mathbf{x}) \\
& + \frac{U_0}{2} \sum_{j,j'} \int d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{j'}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{j'}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_j(\mathbf{x}) \\
& + \sum_{j,j'} \int d^3\mathbf{x} \left\{ \hbar \lambda_{j'}(\mathbf{x}, t) \delta_{j,j'+1} \right. \\
& \left. + \hbar \lambda_j^*(\mathbf{x}, t) \delta_{j,j'-1} \right\} \hat{\Psi}_j^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{j'}(\mathbf{x}). \tag{3.1}
\end{aligned}$$

Hierbei sind die $\hat{\Psi}_j(\mathbf{x})$ Feldoperatoren für die verschiedenen vorkommenden Zeeman- oder Hyperfeinzustände, die hier zunächst noch unspezifiziert bleiben. V_j bezeichnet das äußere Potential für den Zustand j , das sich aus dem Fallenpotential und dem im Folgenden zu berücksichtigenden Gravitationspotential zusammensetzt. $U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_0}{M}$ ist die Wechselwirkungsstärke der s -Wellenstreuung aus Gl. (1.39); vereinfachend wird hier angenommen, dass sie für alle Streuprozesse zwischen Atomen in verschiedenen Zuständen j und j' gleich ist, was zumindest für das hier interessierende ^{87}Rb gerechtfertigt ist. Weiterhin ist $\lambda_j(\mathbf{x}, t)$ eine effektive Rabifrequenz, welche die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld beschreibt. Dabei fließt die Annahme ein, dass nur benachbarte Zustände ($j' = j \pm 1$) durch Laser oder Radiofrequenzfelder miteinander gekoppelt werden.

Ein Raman-Auskoppler wird durch

$$\lambda_j(\mathbf{x}, t) = \frac{\Omega_1 \Omega_2}{\Delta_{\text{Raman}}} e^{i(\Delta\mathbf{q}\cdot\mathbf{x} - \Delta\omega t)} \tag{3.2}$$

beschrieben [106, 140], wobei $\Omega_{1,2}$ die Rabifrequenzen der beiden beteiligten Laserfelder mit den Frequenzen ω_1 bzw. ω_2 sind (vgl. Abb. 3.1.2). $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ ist die durch den Ramanprozess übertragene Energie, $\Delta\mathbf{q}$ der übertragene Impuls. Die Ortsabhängigkeit von $\lambda_j(\mathbf{x}, t)$ ermöglicht es, die Richtung des ausgekoppelten Strahls durch Vorgabe von $\Delta\mathbf{q}$ zu ändern.

Im Gegensatz dazu ist $\lambda_j(\mathbf{x}, t)$ beim Radiofrequenz-Auskoppler, auf den sich Betrachtungen im Folgenden konzentrieren werden, nicht ortsabhängig; die Richtung des Atomstrahls wird nur durch die Wirkung der Potentiale (Falle und Gravitation) vorgegeben. Der Index j bezeichnet in diesem Fall die Zeeman-Unterstufen eines Hyperfeinstrukturzustandes, die wie gewöhnlich mit dem Index m_F bezeichnet werden:

$$\lambda_{m_F}(\mathbf{x}, t) = \Omega_{m_F} 2 \cos(\omega_{\text{RF}} t). \tag{3.3}$$

ω_{RF} ist hierbei die Frequenz des Radiofeldes (vgl. Abb. 3.1.2). Für die Rabifrequenz Ω_{m_F} , die von der Stärke B_{RF} des Radiofeldes abhängt, erhält man (falls der Gesamtdrehimpuls aller Zustände den Wert F hat) folgenden Ausdruck²

$$\hbar \Omega_{m_F} = \sqrt{F(F+1) - m_F(m_F+1)} \frac{|g_F| \mu_B B_{\text{RF}}}{2}. \tag{3.4}$$

²Der Wurzelfaktor resultiert aus den Matrixelementen der Drehimpulsoperatoren F_{\pm} des Gesamtdrehimpulses.

Gekoppelte Gross-Pitaevskii-Gleichungen

In Kapitel 1.3.1 wurde durch Mean-Field-Betrachtungen die Gross-Pitaevskii-Gleichung für ein gefangenes Bosegas hergeleitet. In analoger Weise kann man die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung durch Berechnung der Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren $\hat{\Psi}_{m_F}(\mathbf{x}, t)$ im Heisenbergbild ableiten. Verwendet man wieder die Aufspaltung aus Gl. (1.41) in eine makroskopische Wellenfunktion und einen Fluktuationsoperator, so erhält man unter Vernachlässigung aller Fluktuationsoperatoren in den Heisenberg-Gleichungen die *gekoppelten* Gross-Pitaevskii-Gleichungen für die makroskopischen Wellenfunktionen $\psi_{m_F}(\mathbf{x}, t)$ für einen Atomlaser mit Radiofrequenz-Auskoppler:

$$i\hbar\dot{\psi}_{m_F}(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M} + V_{m_F}(\mathbf{x}) + \tilde{U}_0|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} \psi_{m_F}(\mathbf{x}, t) + \sum_{m'_F=-F}^F \left\{ \hbar\Omega_{m'_F}\delta_{m_F, m'_F+1} + \hbar\Omega_{m_F}\delta_{m_F, m'_F-1} \right\} 2\cos(\omega_{\text{RF}}t)\psi_{m'_F}(\mathbf{x}, t), \quad (3.5)$$

wobei $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \sum_{m_F=-F}^F |\psi_{m_F}(\mathbf{x}, t)|^2$ die Gesamtdichte aller Zustände bezeichnet. Diese Größe ist hier und im Folgenden auf 1 normiert, deshalb geht in die Wechselwirkungskonstante $\tilde{U}_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_0 N_0}{M}$ zusätzlich die Anzahl der Atome in der Falle ein.

Die explizite Zeitabhängigkeit der Kopplungsterme kann durch die Transformation $\psi_{m_F} \rightarrow e^{-im_F\omega_{\text{RF}}t}\psi_{m_F}$ beseitigt werden [182]. Dabei entstehen Faktoren der Form $(1 + e^{\pm 2i\omega_{\text{RF}}t})$, die im Sinne der *Rotating Wave Approximation* durch 1 genähert werden können. An dieser Stelle ist es sinnvoll, die Potentiale V_{m_F} genauer zu spezifizieren. Sie setzen sich aus einem Fallenanteil und dem Gravitationspotential zusammen:

$$V_{m_F}(\mathbf{x}) = \text{sgn}(g_F)m_F V_{\text{off}} + \text{sgn}(g_F)m_F V_{\text{ho}}(\mathbf{x}) - Mgz \quad (3.6)$$

mit dem Offset-Potential $V_{\text{off}} = |g_F|\mu_B B_{\text{off}}$ im Mittelpunkt einer magnetischen Falle. Das Fallenpotential selbst wird als harmonisch angenommen

$$V_{\text{ho}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}M \left\{ \omega_{\parallel}^2 x^2 + \omega_{\perp}^2 (y^2 + z^2) \right\} \quad (3.7)$$

mit einer longitudinalen Frequenz ω_{\parallel} in x-Richtung und einer transversalen Frequenz ω_{\perp} . In Experimenten werden meist magnetische Fallen vom Ioffe-Typ eingesetzt, für die $\omega_{\perp} > \omega_{\parallel}$ gilt; sie sind also zigarrenförmig. Da die z-Achse hier nach unten zeigt, erhält der Gravitationsterm mit der Erdbeschleunigung g ein negatives Vorzeichen.

Mit diesen Bezeichnungen und der Rotating Wave Approximation ergeben sich die Gleichungen

$$i\hbar\dot{\psi}_{m_F}(\mathbf{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M} + \text{sgn}(g_F)m_F V_{\text{ho}}(\mathbf{x}) - Mgz + m_F\hbar\Delta + \tilde{U}_0|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right\} \psi_{m_F}(\mathbf{x}, t) + \sum_{m'_F} \left\{ \hbar\Omega_{m'_F}\delta_{m_F, m'_F+1} + \hbar\Omega_{m_F}\delta_{m_F, m'_F-1} \right\} \psi_{m'_F}(\mathbf{x}, t), \quad (3.8)$$

mit der Verstimmung $\hbar\Delta = \hbar\omega_{\text{RF}} + \text{sgn}(g_F)V_{\text{off}}$.

Dieses System aus gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen für die am Auskoppelprozess beteiligten Zeeman-Zustände hat sich, wie schon die Gross-Pitaevskii-Gleichung für ein einzelnes Kondensat, als sehr geeignet erwiesen, um die Vorgänge in einem Atomlaser zu beschreiben und vorherzusagen [11, 12, 209]. Es ist in seiner Anwendung allerdings auf Temperaturen weit unterhalb der kritischen Temperatur für Bose-Einstein-Kondensation beschränkt, formal sogar auf $T = 0$, da thermische Anregungen nicht berücksichtigt werden. Burnett und Mitarbeiter haben in [41, 106] (siehe auch [98]) die in Kap. 1.3.1 vorgestellte Hartree-Fock-Bogoliubov-Theorie auf Atomlaser mit Auskoppelmechanismus erweitert. Auf diese Art lassen sich Phänomene bei $T > 0$ beschreiben, wie sie z.B. in einem Experiment zur Messung der Korrelationsfunktion in einem Bose-Einstein-Kondensat [24] auftreten.

Die Eigenschaften der Lösungen von Gl. (3.8) wurden mittlerweile in einer ganzen Reihe von Arbeiten untersucht. Neben den Untersuchungen der vorliegenden Arbeit wurde z.B. in [55, 191] die Theorie mit den Experimenten mit Raman-Koppler [81] verglichen. Ein wesentlicher Parameter ist dabei die Stärke der Kopplung, die durch die Rabifrequenzen Ω_{m_F} beschrieben wird. Der Limes starker Kopplung wurde in [72] genauer analysiert. Stark heißt hier, dass Ω_{m_F} größer ist als das chemische Potential des anfänglichen Bose-Einstein-Kondensats, sodass das ganze Kondensat Rabioszillationen zwischen den gekoppelten Zeeman-Zuständen ausführt, ohne dass Atome wirklich ausgekoppelt werden.³ Das erste Experiment am MIT [132] wurde mit solchen starken Radiofrequenzpulsen betrieben, erst am Ende eines Pulses konnten dort Atome, die sich gerade in einem ungefangenen Zustand befanden, den Bereich der Falle verlassen. Mittlerweile ist es möglich, sehr schwache Auskoppelstärken $\Omega_{m_F} < \omega_{\perp, \parallel}$ ⁴ zu realisieren [23], man erhält einen stetigen Atomstrahl, dessen Intensität mit der Zeit langsam abnimmt. Dieses Regime ist natürlich von besonderem Interesse, da es der Definition von Wiseman (Abschnitt 3.1) schon recht nahe kommt. Verschiedene Autoren [98, 113, 164] haben auf der Basis gekoppelter Gross-Pitaevskii-Gleichungen einen phänomenologischen Pumpmechanismus für Atome in Form eines antihermiteschen Terms im Hamiltonoperator eingeführt und die Dynamik des resultierenden Systems untersucht. Diese Vorgehensweise entspricht den Ratengleichungen für optische Laser. Dabei zeigte sich unter anderem, dass es auch bei Atomlasern ein Schwellenverhalten gibt [113].

Um quantenmechanische Fluktuationen untersuchen zu können, muss man über Ratengleichungen hinaus gehen und die vollen bosonischen Felooperatoren betrachten. In [92–94, 104, 141] werden Methoden verwendet, die auf Mastergleichungen basieren und die denen bei optischen Lasern ähneln, um z.B. die ultimative spektrale Linienbreite des ausgekoppelten Atomstrahls zu bestimmen. Jack *et. al.* [104] haben gefunden, dass die Auskoppeldynamik nicht in allen Fällen durch eine Markov-Näherung für die Kopplung an das Kontinuum der Moden des ausgekoppelten Strahls vereinfacht werden kann.

Reduktion auf eine Dimension

Die Gleichungen (3.8) stellen ein recht komplexes System aus mehreren⁵ partiellen Differentialgleichungen in drei Dimensionen dar, die nur numerisch lösbar sind. Sie vollständig numerisch zu lösen erfordert einen hohen Rechenaufwand, den man natürlich vermeiden möchte. Ein

³Diese Rabioszillationen werden in [181] genauer betrachtet.

⁴Diese Bedingung garantiert, dass kollektive Anregungen des Bose-Einstein-Kondensats, deren Energien im Bereich $\hbar\omega_{\perp, \parallel}$ liegen, durch den Auskoppelprozess nur sehr schwach angeregt werden.

⁵Genauer: $2F + 1$ Gleichungen im Hyperfeinzustand $|F\rangle$.

oft beschrittener Weg ist die Reduzierung der Anzahl räumlicher Dimensionen. Radiofrequenz-Atomlaser (RF-Atomlaser) besitzen eine Vorzugsrichtung: Bedingt durch die Gravitation fallen alle ausgekoppelten Atome nach unten. Zwar sind die in Experimenten häufig verwendeten magnetischen Ioffe-Fallen in einer der beiden horizontalen Richtungen weiter ausgedehnt als in die beiden anderen (siehe Gl. (3.7)). Es hat sich aber trotzdem als sehr sinnvoll herausgestellt [11, 146, 182], eine eindimensionale Näherung für die Beschreibung von RF-Atomlaser zu wählen, bei der nur die *vertikale* z -Achse berücksichtigt wird. Per Konvention zeigt diese hier nach *unten*. Die Potentialterme in Gl. (3.8) werden nun zu effektiven Potentialen zusammengefasst, dabei muss man eine effektive Stärke g_{1D} für die Mean-Field-Wechselwirkung einführen⁶

$$V_{\text{eff},m_F}(z, t) = \text{sgn}(g_F) m_F \frac{1}{2} M \omega_z^2 z^2 + m_F \hbar \Delta - Mgz + g_{1D} |\psi(z, t)|^2, \quad (3.9)$$

sodass die gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen in einer Dimension dann

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\psi}_{m_F}(z, t) = & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{eff},m_F}(z, t) \right\} \psi_{m_F}(z, t) \\ & + \sum_{m'_F} \left\{ \hbar \Omega_{m'_F} \delta_{m_F, m'_F+1} + \hbar \Omega_{m_F} \delta_{m_F, m'_F-1} \right\} \psi_{m'_F}(z, t) \end{aligned} \quad (3.10)$$

lauten. Die effektive Mean-Field-Kopplung g_{1D} ergibt sich aus der Forderung, dass das chemische Potential für das anfängliche Bose-Einstein-Kondensat in der Falle in der eindimensionalen Näherung den gleichen Wert wie in drei Dimensionen haben soll. Wie man aus Gl. (1.61, 1.62) erkennen kann, ist dann auch die Ausdehnung des Kondensats in z -Richtung in einer Dimension die gleiche wie in dreien. Man erhält damit [171]

$$g_{1D} = \frac{2}{3} \left(\frac{\omega_{\parallel}}{\omega_z} \right)^{\frac{3}{5}} \left(\frac{15Na_0}{a_z} \right)^{\frac{3}{5}} |m_{F,\text{Falle}}|^{\frac{2}{5}} \hbar \omega_z a_z, \quad (3.11)$$

mit der üblichen Definition der Oszillatorlänge $a_z = \sqrt{\hbar/M\omega_z}$. $m_{F,\text{Falle}}$ bezeichnet die magnetische Quantenzahl des anfänglichen Kondensats. Zur Lösung der gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen werden numerische Verfahren eingesetzt, die im nächsten Kapitel erläutert werden.

In Abb. 3.3 ist eine solche numerisch erhaltene Lösung von Gl. (3.10) für ^{87}Rb im Hyperfeinstrukturzustand (HFS-Zustand) $F = 1$ dargestellt. Der Zustand $m_F = -1$ ist in der Falle gefangen ($m_{F,\text{Falle}} = -1$), die Zustände $m_F = 0, 1$ sind frei. Für schwache RF-Kopplung $\Omega_{m_F} < \omega_z$ stellt sich nach einiger Zeit ein quasistationärer Zustand ein, bei dem der Auskoppelprozess vor allem an einer Stelle abläuft, die in der vollen dreidimensionalen Situation einer Schale konstanten Magnetfeldbetrags in der Falle entspricht. Die eingeschobene Grafik zeigt die effektiven Potentiale V_{eff,m_F} , die sich alle an einem Punkt schneiden ($m_F = 1$ ist nicht dargestellt). Sie wurden mithilfe der Thomas-Fermi-Näherung gewonnen (Kap. 1.3.2), sodass das Mean-Field-Potential $g_{1D} |\psi|^2$ dem invertierten Fallenpotential des $m_F = -1$ -Zustandes gleicht. Dies führt zu einem von z unabhängigen effektiven Potential $V_{\text{eff},-1}$ in der Falle. Die Gravitation führt im Übrigen zu einer Verlagerung des harmonischen Potentials der gefangenen Zustände nach unten (engl. *sag*), das Potentialminimum liegt nicht mehr in der Fallmitte bei $z = 0$ sondern bei $z_{m_F,\text{sag}} = g/(|m_F|\omega_z^2)$.

⁶Im Folgenden wird oft $\omega_z = \omega_{\perp}$ verwendet.

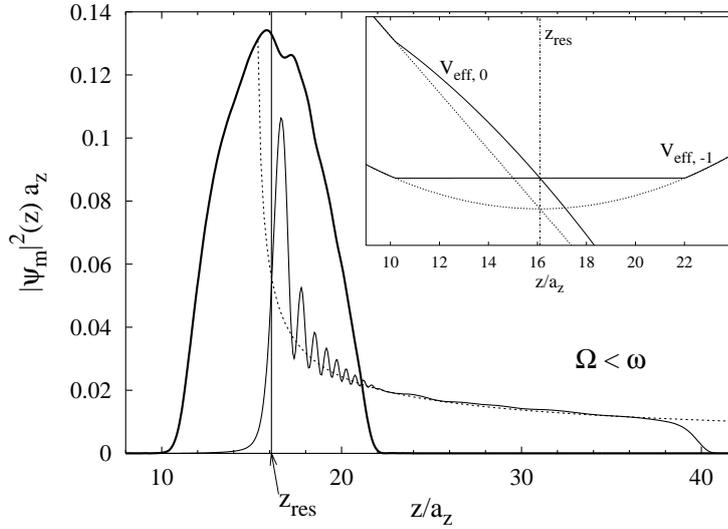


Abbildung 3.3: Darstellung der Dichteverteilungen für $m_F = -1, 0$ ($F = 1$) in der Falle bei schwacher RF-Kopplung. Der gefangene Zustand (dick gezeichnete Kurve) wird durch das Auskoppeln fast nicht beeinflusst; der ausgekoppelte Zustand ($m_F = 0$, dünne Linie, um einen Faktor 20 vergrößert) kann durch eine Airy-Funktion genähert werden (gepunktet), deren Betrag sich aus der Auskoppelrate ergibt (siehe Kap. 3.4.2). Die kleine Abbildung enthält eine Darstellung der effektiven Potentiale, die gestrichelten Kurven ergeben sich durch Vernachlässigung des Mean-Field-Anteils.

Der Schnittpunkt der effektiven Potentiale hängt von der Verstimmung Δ ab

$$z_{\text{res}} = \pm \sqrt{2\Delta/\omega_z} a_z \quad (3.12)$$

und gibt die Stelle an, an der Atome aus dem Kondensat resonant ausgekoppelt werden. Aus der Bedingung, dass z_{res} im Bereich des Kondensats ($z_{\text{sag}} - z_{\text{TF}} \leq z_{\text{res}} \leq z_{\text{sag}} + z_{\text{TF}}$ ⁷) liegen muss, damit überhaupt Atome ausgekoppelt werden, erhält man eine Bedingung für die möglichen Werte der Verstimmung Δ . Normalerweise liegt nur der Resonanzpunkt z_{res} mit positivem Vorzeichen im Bereich des Kondensats, sodass es im Gegensatz zur analogen Situation ohne Gravitation [145, 181] nur einen Resonanzpunkt gibt.

Es ist im Übrigen nicht offensichtlich, dass der Punkt maximaler Auskopplung mit dem Schnittpunkt der effektiven Potentiale übereinstimmt. Bei schwacher Kopplung zwischen zwei Potentialen liegt der Resonanzpunkt normalerweise am klassischen Umkehrpunkt des freien Zustands (analog zur Photodissoziation bei Molekülen). Dieser hängt aber im Allgemeinen von der Energie ab. Nur wenn man den Mean-Field-Beitrag in V_{eff,m_F} berücksichtigt, fallen der klassische Umkehrpunkt für die ausgekoppelten Atome im $m_F = 0$ -Zustand und der Schnittpunkt z_{res} der Potentiale zusammen, wie aus Abb. 3.3 ersichtlich wird.

3.2.1 Numerische Methode

Schon im vorherigen Abschnitt wurde angedeutet, dass man die gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen (3.10) auf numerischem Wege lösen muss, wenn man mit experimentellen Daten vergleichen will. Dazu wurden in der Literatur eine Reihe von Verfahren verwendet (z.B.

⁷ $z_{\text{TF}} = r_{\text{TF}}$, siehe Gl. (1.62)

Crank-Nicholson-Verfahren [162], Entwicklung nach Orthonormalbasen [54]). In der vorliegenden Arbeit wurde die auf schnellen Fouriertransformationen basierende *Split-Operator-Methode* [116] eingesetzt, die im Folgenden erläutert wird. Weitere Details zu den verwendeten numerischen Methoden finden sich in [145, 181].

Realzeitpropagation

Für eine numerische Lösung von Gl. (3.10) gilt es, eine möglichst leicht zu berechnende Form für den Propagator $U(t_0, t)$ zu finden, mit dem man zunächst nur formal eine Lösung angeben kann:

$$\psi(z, t) = U(t_0, t)\psi(z, t_0). \quad (3.13)$$

Für $U(t_0, t)$ gilt

$$U(t_0, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')} + O((t - t_0)^3), \quad (3.14)$$

wobei der Hamiltonoperator $H(t)$ hier noch ohne die RF-Kopplung benachbarter Zustände betrachtet wird. Es gilt also mit V_{eff} aus Gl. (3.9)

$$H(t) = T + V_{\text{eff}}(t), \quad \text{mit} \quad T = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (3.15)$$

H hängt somit indirekt über das zur Dichteverteilung proportionale Mean-Field-Potential von der Zeit ab. Für kleine Zeitdifferenzen $\Delta t = t - t_0$ kann man den Propagator $U(t_0, t_0 + \Delta t)$ nun durch die so genannte *Split-Operator-Methode* nähern [13]

$$U(t_0, t_0 + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} V_{\text{eff}}(t_0) \Delta t / 2} e^{-\frac{i}{\hbar} T \Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} V_{\text{eff}}(t_0) \Delta t / 2} + O(\Delta t^3), \quad (3.16)$$

die die Fehlerordnung in Δt der obigen Näherung (3.14) erhält.

Diese Näherung kann nun für ein effizientes iteratives Verfahren zur Berechnung von $\psi(z, t)$ verwendet werden. Man repräsentiert die Wellenfunktion auf einem Raumgitter mit den Punkten z_j ($j \in \{0 \dots N_{\text{Gitter}} - 1\}$) durch die Werte $\psi(z_j, t)$. Die Anwendung des Operators $X = \exp(-\frac{i}{\hbar} V_{\text{eff}}(t_0) \Delta t / 2)$ auf diese Wellenfunktion erfolgt durch einfache Multiplikation für jeden Gitterpunkt (X ist ein Multiplikationsoperator im Ortsraum). Um $Y = \exp(-\frac{i}{\hbar} T \Delta t)$ anzuwenden, wechselt man nun mittels einer Fouriertransformation \mathcal{F} in den Impulsraum, denn dort ist der Operator T für die kinetische Energie diagonal ($\tilde{\mathcal{F}} = \mathcal{F}^{-1}$):

$$\tilde{\mathcal{F}} Y \mathcal{F} = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2 k^2}{2M}}, \quad k = \frac{2\pi}{L} j, \quad j \in \{0 \dots N_{\text{Gitter}} - 1\} \quad (3.17)$$

L : Gitterlänge

Y kann dann ebenfalls durch Multiplikation an jedem Punkt des *Fouriergitters* auf eine Wellenfunktion angewendet werden. $\psi(z, t_0 + n\Delta t)$ berechnet man dann auf folgende Art:

$$\psi(z, t_0 + n\Delta t) = X \underbrace{\tilde{\mathcal{F}} Y \mathcal{F} X^2 \dots X^2 \tilde{\mathcal{F}} Y \mathcal{F}}_{n \text{ mal } \tilde{\mathcal{F}} Y \mathcal{F}, \text{ dazwischen jeweils } X^2} X \psi(z, t_0). \quad (3.18)$$

Man erkennt, dass man nur zu Beginn und am Ende der Berechnung den Operator X anwenden muss, dazwischen reicht es, eine Abfolge der Operatoren X^2 und $\tilde{\mathcal{F}} Y \mathcal{F}$ zu verwenden.

Diese Fourier-Split-Operator-Methode ist numerisch sehr effizient [13] und kann in einfacher Weise auf höher dimensionale Probleme in kartesischen Koordinaten verallgemeinert werden. Der Anfangszustand für die Simulation eines Atomlasers wird übrigens mit einer Abwandlung der gleichen Methode bestimmt. Meist beginnt ein Atomlaserexperiment mit einem Bose-Einstein-Kondensat in einem Zeeman-Zustand $m_{F,\text{Falle}}$. Diesen kann man entweder durch eine Thomas-Fermi-Näherung (1.59) beschreiben, oder man berechnet die Wellenfunktion des Fallengrundzustandes mittels *Imaginärzeit-Propagation* [46], die man wie die Propagation in reeller Zeit ablaufen lässt, nur dass der Zeitschritt Δt durch $-i\Delta t$ ersetzt wird.

Radiofrequenzkopplung

Bisher wurde noch nicht auf die Implementierung der Radiofrequenzkopplung eingegangen. Zerlegt man den Hamiltonoperator auf folgende Weise

$$H(t) = T + V_{\text{eff}}(t) + W(t), \quad (3.19)$$

wobei $W(t)$ den letzten Summanden in Gl. (3.10) beschreibt, so kann man den Propagator durch

$$U(t_0, t_0 + \Delta t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}V_{\text{eff}}(t_0)\Delta t/2} e^{-\frac{i}{\hbar}T\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}V_{\text{eff}}(t_0)\Delta t/2} + \left(1 - \frac{i}{\hbar}W(t_0)\Delta t\right) \quad (3.20)$$

nähern. Es hat sich gezeigt, dass diese Näherung ausreicht, um die Kopplung zwischen den verschiedenen magnetischen Unterzuständen zu beschreiben. Obwohl der Kopplungsoperator $W(t)$ auf sehr einfache Weise einbezogen wird, muss man im Vergleich zum ungekoppelten Problem keine kleineren Zeitschritte Δt verwenden, um konvergierte Resultate zu erhalten.

3.3 Numerische Ergebnisse für eine Radiofrequenz

In diesem Kapitel sollen nun numerische Ergebnisse, die durch Propagation der gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen (3.10) erzielt wurden, vorgestellt und mit experimentellen Resultaten verglichen werden, die für die gleichen physikalischen Parameter erhalten wurden.

Wie schon weiter oben beschrieben, wird eine eindimensionale Näherung verwendet, da der numerische Aufwand für eine volle 3D Rechnung sehr hoch ist. Der Anfangszustand ist bei allen Rechnungen der mit Hilfe von Imaginärzeit-Propagation gewonnene Kondensatgrundzustand in einem gefangenen Spinzustand.

Als grundlegende Parameter der Rechnungen wurden die des Atomlaser-Experiments der Hänsch-Gruppe in München verwendet [23], da mit den Resultaten, die an diesem Aufbau erzielt wurden, verglichen werden soll. In diesem Experiment wird ^{87}Rb verwendet, dessen Spinzustände $|F = 2, m_F = 2, 1\rangle$ und $|F = 1, m_F = -1\rangle$ in einer magnetischen Falle gefangen werden können. Die Fallenfrequenzen lauten $\omega_{\perp} = 2\pi \times 127 \text{ Hz}$ und $\omega_{\parallel} = 2\pi \times 13 \text{ Hz}$.

Im Folgenden werden sehr oft Ergebnisse in den zum harmonischen Potential mit $|m_F| = 1$ gehörenden Einheiten angegeben; für die vertikale Bewegung gilt dann $\omega_z = 2\pi \times 127 \text{ Hz}$ für $F = 2$ und $F = 1$ ($g_{F=1} = -1/2$, $g_{F=2} = 1/2$). Die Längeneinheit ist demgemäß $a_{\text{ho}} = 0.95 \mu\text{m}$, die Zeit wird in Einheiten von $1/\omega_z = 1.3 \text{ ms}$ gemessen.

Die im Experiment verwendeten Rabifrequenzen sind i. A. größer als ω_z , sodass der Bereich schwacher Kopplung nicht ganz erreicht wird. Demgemäß wird das Kondensat auch recht stark

entleert, wie man aus Abb. 3.4 entnehmen kann. Den Besetzungen der verschiedenen Spin-zustände sind schwache Oszillationen aufgeprägt, die an die bei sehr starkem Radiofrequenzfeld auftretenden Rabioszillationen erinnern [11, 72, 181]. Im Gegensatz zu dem hier betrachteten Fall werden für $\Omega_{\text{Rabi}} \gg \omega_z$ allerdings nur sehr wenige Atome ausgekoppelt, sodass man die Oszillationen der Populationen in der Falle im Experiment als kleine mit der Rabifrequenz emittierte Pulse beobachten kann.⁸

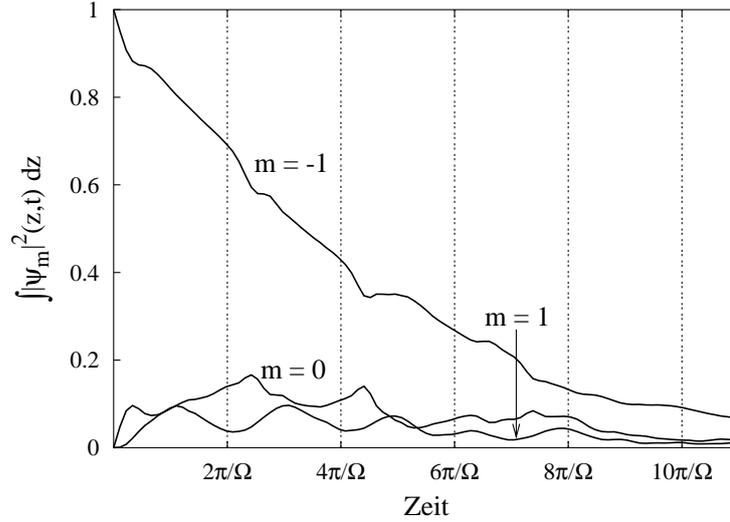


Abbildung 3.4: Zeitentwicklung der Besetzungen der Spinzustände in einem $F = 1$ -Atomlaser. Das Bose-Einstein-Kondensat im $m_F = -1$ -Zustand wird sehr schnell entleert ($\Omega_{\text{Rabi}}/\omega_z \approx 3.5$), die gesamte Zeitachse entspricht einer Zeit von etwa 12.5 ms. Die Periode der schwachen Oszillationen entspricht der Rabifrequenz Ω_{Rabi} .

In [23] berichten Bloch *et al.* über Experimente, bei denen die Anzahl von Atomen gemessen wurde, die nach einer gewissen Auskoppelzeit noch im ursprünglichen Kondensatzustand $|F = 2, m_F = 2\rangle$ zu finden sind. Diese Zahl hängt natürlich von der Verstimmung Δ und der Koppelstärke Ω_{Rabi} (also von Frequenz und Stärke des Radiofeldes) ab. Unter Verwendung der experimentellen Parameter und des Wertes der s -Wellenstrelänge $a_0 = 110 a_{\text{Bohr}}$ für ^{87}Rb wurden nun die gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen numerisch gelöst, um die Werte für die Populationen der Spinzustände aus den gewonnen Wellenfunktionen zu berechnen. Da diese insgesamt auf Eins normiert sind, erhält man die Populationen durch

$$N_{m_F}(t) = N \int dz |\psi_{m_F}(z, t)|^2. \quad (3.21)$$

In den Abb. 3.5 und 3.7 sind die Ergebnisse der numerischen Rechnungen dargestellt. In den Rechnungen für $F = 2$ wurden nur die Zustände mit $m_F = 2, 1, 0$ berücksichtigt; Tests mit allen fünf Zuständen haben gezeigt, dass dies ausreicht, da die fehlenden Zustände mit $m_F = -1, -2$ nur sehr schwach besetzt werden.

Die theoretischen Werte in Abb. 3.5, 3.7 passen zumindest qualitativ zu den experimentellen Daten. Der Unterschied resultiert wahrscheinlich aus der Reduzierung des Problems auf eine

⁸Mitteilung von Immanuel Bloch.

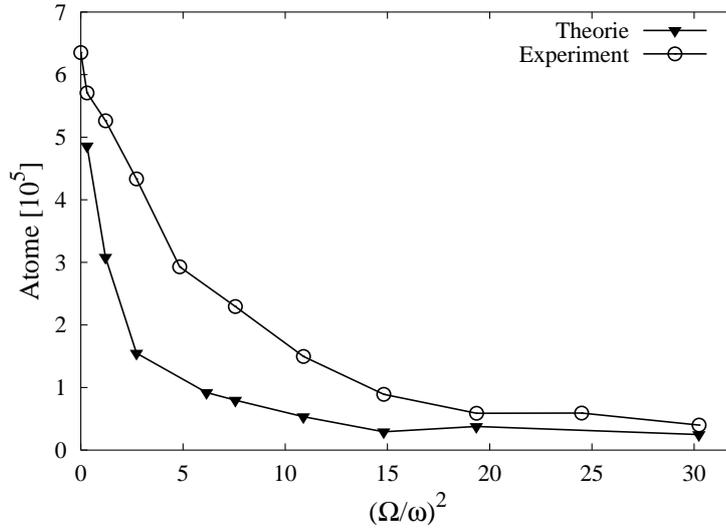


Abbildung 3.5: Anzahl der Restatome in $|F = 2, m_F = 2\rangle$ nach 20 ms Auskoppelzeit. Zu Beginn befinden sich $N = 7 \times 10^5$ Atome im Kondensat. Die Verstimmung Δ ist auf maximale Auskoppelrate abgestimmt, sodass der Auskoppelpunkt in der Fallenmitte ($z_{\text{res}} \approx z_{\text{sag}}$) liegt. B_{RF} wird von 0.1 bis 1.0 mG variiert, die Rabi-frequenz liegen somit zwischen 0.44 und 4.4 kHz. Die Verbindungslinien sind nur der besseren Übersicht halber eingetragen.

Dimension: Im eindimensionalen Modell gibt es nur einen Resonanzpunkt bei z_{res} , wohingegen der Auskoppelprozess in 3D auf einer Resonanzfläche abläuft, die durch die Bedingung $\tilde{r}_{\text{res}} = \sqrt{\omega_{\parallel}^2/\omega_{\perp}^2 x^2 + y^2 + z^2} = z_{\text{res}}$ definiert ist (siehe Abb. 3.6). Dementsprechend hängt die 3D-Auskoppelrate von der über die Resonanzfläche gemittelten Dichte des Bose-Einstein-Kondensats ab. Diese ist aber geringer als die Dichte auf der z -Achse, sodass auch die Auskoppelrate im Experiment geringer ist als die im eindimensionalen Modell ermittelte. Die Ab-

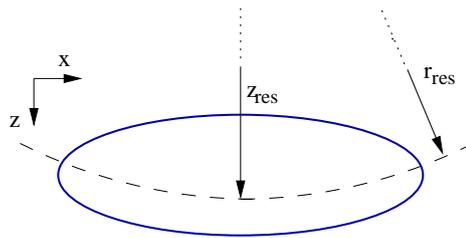


Abbildung 3.6: In drei Dimensionen wird auf einer Resonanzfläche $\tilde{r}_{\text{res}} = \sqrt{\omega_{\parallel}^2/\omega_{\perp}^2 x^2 + y^2 + z^2} = z_{\text{res}}$ ausgekoppelt (gestrichelte Linie). Die Ellipse stellt einen Schnitt durch das Kondensat bei $y = 0$ dar.

weichung zwischen Experiment und den Resultaten des 1D-Modells werden sogar noch größer, wenn man $|F = 1, m_F = -1\rangle$ als Ausgangszustand des Kondensats betrachtet (siehe Abb. 3.8). Auch hier stammen die experimentellen Daten aus der Hänsch-Gruppe. In diesem Fall wurden übrigens alle drei Zeeman-Untersätze ($m_F = -1, 0, 1$) propagiert, da in allen eine signifikante Besetzung auftritt (siehe Abb. 3.4). Die Kurven in den Abb. 3.7 und 3.8 repräsentieren direkt die Dichteverteilung der Atome im gefangenen Anfangszustand, wenn man den Ort z

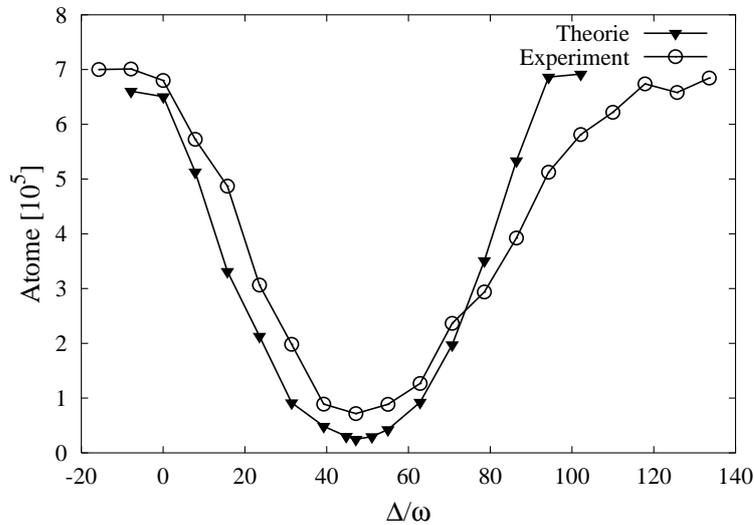


Abbildung 3.7: Anzahl der Restatome wie in Abb. 3.5, aber jetzt bei festgehaltener Rabifrequenz $\Omega_{\text{Rabi}} = 2\pi \times 700 \text{ Hz} = 5.5 \omega_z$ und variabler Verstimmung Δ (bzw. variabler Radiofrequenz). Das Minimum der experimentellen Daten wurde durch Verschieben der Frequenzachse mit dem Minimum der theoretischen Kurve in Übereinstimmung gebracht; dies ist notwendig, da das Offset-Feld B_{off} der Falle nicht genau genug bekannt ist.

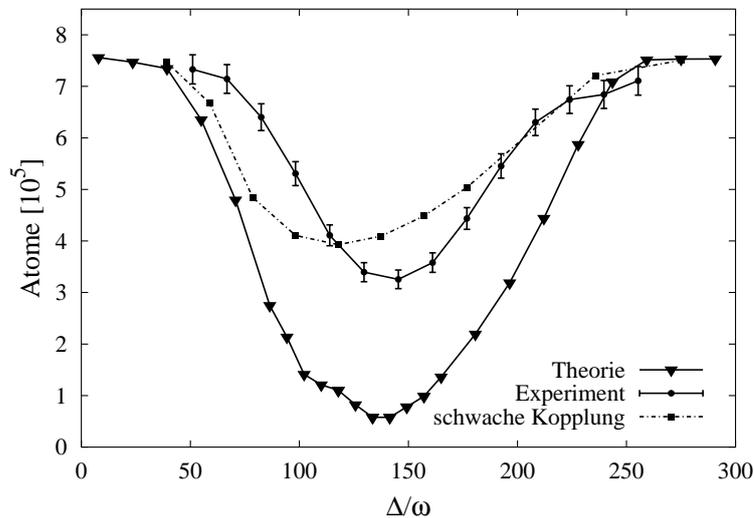


Abbildung 3.8: Anzahl der Restatome wie in Abb. 3.7, hier allerdings für $|F = 1, m = -1\rangle$ und $\Omega_{\text{Rabi}} = 2\pi \times 312 \text{ Hz} = 2.4 \omega_z$. Die theoretische Kurve für schwache Kopplung ($\Omega_{\text{Rabi}} = 1.1 \omega_z$) besitzt eine deutliche Asymmetrie, die aus der Dichteverteilung des gefangenen Kondensats resultiert (siehe dazu auch die Bemerkung im Text). Auffällig ist auch die Delle bei $\Delta = 120 \omega_z$ in der Theoriekurve.

mittels $z = a_{\text{ho}} \sqrt{2\Delta/\omega_z}$ in den Frequenzbereich überträgt: Je mehr Atome man bei z antrifft, desto größer ist bei der zugehörigen Verstimmung Δ die Auskoppelrate, umso weniger Atome sind dann nach einer festen Auskoppelzeit noch in der Falle vorhanden. Für sehr schwache Kopplung führt dieser Zusammenhang zwischen Auskoppelzeit und Verstimmung zu einer asymmetrischen Verteilung, wie man aus der Kurve für schwache Kopplung in Abb. 3.8 ersehen kann. Die Delle der Theoriekurve in dieser Abbildung tritt nur für mittlere Kopplungen auf, ihr Auftreten konnte bisher leider nicht erklärt werden.

Versucht man, die Auskoppelrate in 3D unter Einbeziehung der Gravitation analog zu [181, 182] für den Bereich schwacher Kopplung zu berechnen, so muss man auf geeignete Weise über die Resonanzfläche mitteln. Im Gegensatz zum Fall ohne Gravitation ist die Kondensatwellenfunktion auf der Resonanzfläche nicht mehr konstant, sodass man keinen geschlossenen Ausdruck für die Rate erhalten kann.

3.3.1 Auskoppelrate

Ein anderer Weg, die Auskoppelrate eines Radiofrequenz-Atomlasers zu berechnen, basiert auf Fermis Goldener Regel zur störungstheoretischen Berechnung von Übergangsraten. Man betrachte einen Zustand $|i\rangle$ im diskreten Spektrum eines Quantensystems, der unter der Wirkung eines Operators W , der den Hamiltonoperator des Systems nur schwach stört, in einen Zustand $|f\rangle$ der Energie E_f übergeht. Ist dieser in ein Kontinuum von Zuständen der Zustandsdichte $\rho(E)$ eingebettet, so gilt für die Übergangsrates

$$\Gamma_{|i\rangle \rightarrow |f\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|W|i\rangle|^2 \rho(E_f). \quad (3.22)$$

Ziel ist es nun, diese Rate für das eindimensionale Atomlasersmodell zu berechnen. Dies ist hier nur für den Anfangszustand $|F=1, m_F=-1\rangle$ möglich, da der Zustand $|F=2, m_F=2\rangle$ nur indirekt über $|F=2, m_F=1\rangle$ in den freien Zustand $|F=2, m_F=0\rangle$ ausgekoppelt wird.⁹ Für die Berechnung der Auskoppelrate von $|i\rangle = |F=1, m_F=-1\rangle$ nach $|f\rangle = |F=1, m_F=0\rangle$ benötigt man vor allem Ausdrücke für die Wellenfunktionen der beiden Zustände. Für $|i\rangle$ kann man dazu einfach die Thomas-Fermi-Näherung (1.59) verwenden. Die Wellenfunktion des Zustands $|f\rangle$ der ausgekoppelten Atome entspricht prinzipiell einer Airy-Funktion (siehe auch [181]), da diese Atome vor allem das homogene Gravitationspotential spüren. Die Airy-Funktion wird allerdings durch das Mean-Field-Potential des Kondensates modifiziert, wie aus der kleinen Graphik in Abb. 3.3 zu erkennen ist. Abb. 3.9 zeigt die Situation noch einmal genauer: Die ausgekoppelte Wellenfunktion spürt in der Nähe des Resonanzpunktes, der ja der klassische Umkehrpunkt der ausgekoppelten Atome ist, ein Potential, dessen Steigung vom Gravitationspotential und vom Mean-Field abhängt. Um $|f\rangle$ näherungsweise zu bestimmen, kann man nun analog zur WKB-Methode [121] vorgehen. Die Wellenfunktion in der Umgebung des klassischen Umkehrpunktes z_{res} ist eine Airy-Funktion, die sich aus der Steigung b_{eff} des effektiven Potentials $V_{\text{eff},0}$ an dieser Stelle ergibt. Sie unterscheidet sich i. A. leicht von der Steigung des Gravitationspotentials $b_{\text{Grav}} = Mg$ und kann unter Verwendung der Thomas-Fermi-Näherung (1.59) berechnet werden:

$$b_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{2\Delta}{\omega_z}} M \omega_z^2 a_{\text{ho}}. \quad (3.23)$$

⁹Siehe aber dazu [70].

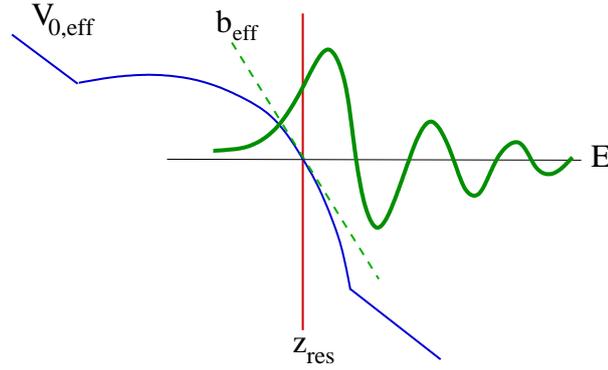


Abbildung 3.9: Effektives Potential und Wellenfunktion der ausgekoppelten Atome. b_{eff} bezeichnet die Steigung des effektiven Potentials am Auskoppelpunkt z_{res} .

Die Wellenfunktion der ausgekoppelten Atome lautet dann

$$\psi_0(z) = \mathcal{A} \text{Ai}\left(-\frac{1}{l_0}(z - z_{\text{res}})\right), \quad (3.24)$$

dabei ist $l_0 = (\hbar^2/(2Mb_{\text{eff}}))^{1/3}$ eine typische Längenskala; den Vorfaktor $\mathcal{A} = (1/(b_{\text{eff}}l_0^2))^{1/2}$ erhält man aus der Normierungsbedingung für Airy-Funktionen [66, 121]. Mit dieser Wellenfunktion kann man nun die Übergangsrate (3.22) berechnen. Der Störoperator ergibt sich aus den gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen (3.10) zu

$$W_{-1,0} = \hbar\Omega_{\text{Rabi}}; \quad (3.25)$$

die Zustandsdichte in diesem eindimensionalen Modell beträgt $\rho(E) = 1$.

Abb. 3.10 zeigt das durch numerische Integration erhaltene Ergebnis, aufgetragen über der Verstimmung Δ . Zum Vergleich wurde auch die in [181, 182] hergeleitete Auskoppelrate berechnet. Das dort erhaltene Resultat gilt für eine Situation ohne Gravitation, bei der zwei Resonanzpunkte vorliegen. Hier wird nur die halbe Rate berücksichtigt, da bei Anwesenheit eines Gravitationsfeldes eben nur ein Auskoppelpunkt vorhanden ist

$$\Gamma^{1\text{D}}(\Delta) = 2\pi \left(\frac{\Omega_{\text{Rabi}}}{\omega_z}\right)^2 \frac{|\psi_{-1}(z_{\text{res}})|^2}{\sqrt{2\Delta/\omega_z}} a_{\text{ho}\omega_z}, \quad (3.26)$$

die Auskoppelrate ist also proportional zur Dichte des Ausgangszustands am Auskoppelpunkt $z_{\text{res}} = \sqrt{2\Delta/\omega_z}$. Wie man aus der Abbildung erkennt, stimmt die hier mit Fermis Goldener Regel (3.22) berechnete Rate gut mit der analytisch berechneten überein. Die Oszillationen rühren von den Oszillationen der Airy-Funktion (3.24) her. Erhöht man die Verstimmung Δ , so verschiebt sich der Resonanzpunkt z_{res} nach unten (in Abb. 3.9 nach rechts). Dabei „wandern“ die Oszillationen der Airy-Funktionen aus dem Bereich des Kondensats heraus, sodass das Matrixelement $\hbar\Omega_{\text{Rabi}}\langle f|i\rangle$ ebenfalls oszilliert. Die dritte (gestrichelte) Kurve wurde wie die erste mit Gl. (3.22) berechnet jedoch unter Vernachlässigung des Mean-Field-Potentials (also mit der Steigung b_{Grav}). Sie unterscheidet sich deutlich von den anderen beiden Kurven, d.h. man muss das Mean-Field-Potential auf jeden Fall berücksichtigen.

Kürzlich ist es gelungen, das eben dargestellte Verfahren auf die volle, dreidimensionale Situation auszudehnen [70]. Die Rechnungen in 3D zeigen eine vollständige Übereinstimmung

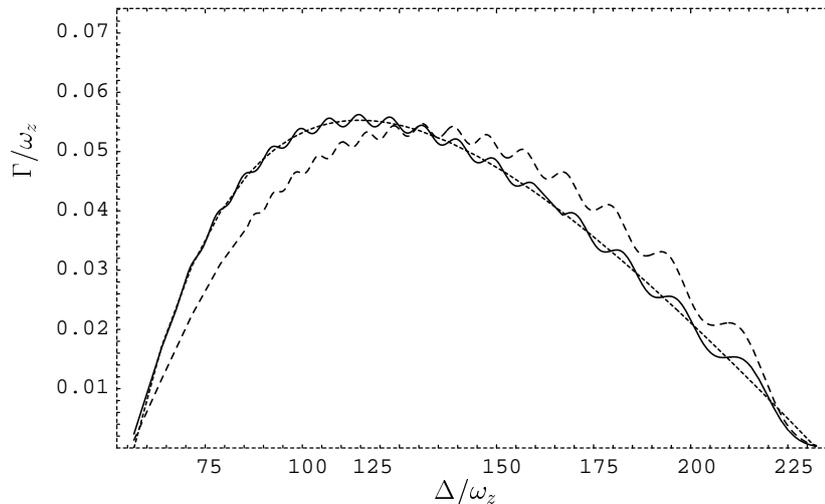


Abbildung 3.10: Auskoppelrate eines RF-Atomlasers. Die Auskoppelrate wurde für $N = 5 \times 10^5$ $|F = 1, m_F = -1\rangle$ -Atome in einer Falle mit den im Text angegebenen Parametern der Hänsch-Falle mithilfe verschiedener Näherungen berechnet. Die durchgezogene Kurve ist mit Fermis Goldener Regel (3.22) berechnet unter Verwendung der Airy-Funktion zur Steigung b_{eff} . Zum Vergleich ist für die gleichen Parameter die Rate aus [181, 182] eingetragen (gepunktet); bis auf die im Text näher diskutierten Oszillationen stimmen die beiden Kurven sehr gut überein. Die gestrichelte Linie wurde ebenfalls mit Gl. (3.22) berechnet, allerdings nicht mit b_{eff} sondern mit der Steigung b_{Grav} , d.h. der Mean-Field-Anteil wurde vernachlässigt (vgl. Abb 3.9).

mit den experimentellen Daten in Abb. 3.5, 3.7 und 3.8, auch der Fall indirekten Auskoppelns mit $F = 2$ von $m_F = 2$ über $m_F = 1$ nach $m_F = 0$ wurde im Limes schwacher Kopplung erfolgreich behandelt.

3.3.2 Reflektion an einem Dipolpotential

Neben der Berechnung von Auskoppelraten und damit der Stärke einer von einem Atomlaser emittierten atomaren Materiewelle möchte man natürlich auch Aussagen über deren Kohärenz treffen können. Dies ist mithilfe der gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen alleine nur bedingt möglich, da die wesentlichen inkohärenten Prozesse wie z.B. thermische Effekte durch sie nicht beschrieben werden [145, 146]; es müssen eigentlich Techniken der Vielteilchentheorie verwendet werden, wie sie in [41, 106] beschrieben werden. Man kann aber aufgrund von Simulationen, die auf den Gross-Pitaevskii-Gleichungen basieren, erste Aussagen darüber treffen, inwiefern sich gewisse Kohärenzeffekte überhaupt beobachten lassen. Am einfachsten lässt sich die Kohärenz erster Ordnung eines Wellenfeldes untersuchen, wenn man es mit sich selbst zur Interferenz bringt. Laserstrahlen oder Radiowellen kann man z.B. an einem geeigneten Spiegel zurückreflektieren und das sich ausbildende Stehwellenfeld vermessen. Mit Materiewellen kann man natürlich ein analoges Experiment durchführen, man muss nur einen geeigneten Spiegel finden. Dazu bietet sich das abstoßende Dipolpotential eines blauverstimmten Lasers an. So wurde in [26] theoretisch und experimentell untersucht, was passiert, wenn ein gefangenes Bose-Einstein-Kondensat nach Abschalten der Falle sich frei fallend nach unten bewegt und dann auf einen aufgefächerten blauverstimmten Laser trifft.

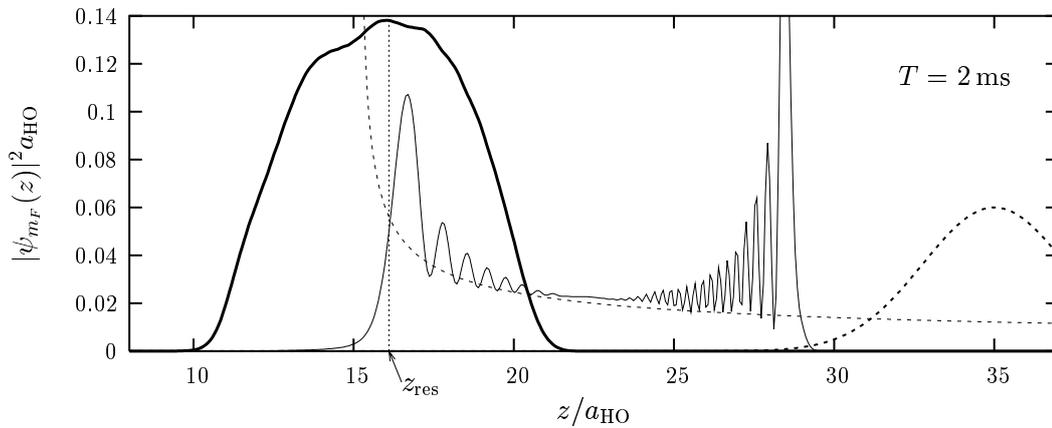


Abbildung 3.11: Reflexion eines Atomstrahls am Dipolpotential eines blauverstimmters Lasers mit Gaußprofil. Der Laser ist etwa $20 \mu\text{m}$ unterhalb des Kondensats angeordnet bei einer Breite von $5 \mu\text{m}$ (FWHM) und einer Potentialhöhe von $600 \hbar\omega_z$, die in etwa einem Viertel der Stärke des in [26] verwendeten Lasers entspricht. Die gestrichelte Kurve ganz rechts symbolisiert das Potential des Lasers. Der Laser stellt einen „harten“ Spiegel dar, wie man an der Dichte des ausgekoppelten Strahls ($m_F = 0$, dünne, durchgezogene Linie) erkennt. Die dicke Linie repräsentiert die Dichteverteilung des gefangenen Zustands, die gestrichelte Kurve stellt eine Airy-Funktion dar und deutet den Dichteverlauf ohne den spiegelnden Laser an. Die Grafik zeigt die Verhältnisse nach 2 ms Auskoppelzeit, wie immer ist die Dichte des ausgekoppelten Strahl um einen Faktor 20 vergrößert dargestellt.

Hier soll nun ein ähnliches Experiment theoretisch analysiert werden. Abb. 3.3.2 zeigt das Resultat der Simulation einer Situation, bei der der kontinuierliche Strahl eines Atomlasers auf einen blauverstimmten Laser trifft und komplett reflektiert wird. Es bildet sich zwischen dem Bereich der Falle und dem Laser (gepunktete Linie rechts), der sich hier nur etwa $20 \mu\text{m}$ unterhalb des Kondensats befindet, eine stationäre Wellenfunktion aus. An beiden klassischen Umkehrpunkten erkennt man das typische Verhalten einer Airy-artigen Funktion. Die Interferenzstreifen kommen durch die Überlagerung von nach unten und oben „fallenden“ Anteilen der Wellenfunktion zustande. Da die Gross-Pitaevskii-Gleichungen eine Situation mit maximaler Kohärenz beschreiben, könnte man die im Experiment zu messende Visibilität der Streifen mit den hier berechneten Streifen vergleichen und so Rückschlüsse auf die tatsächliche Kohärenz ziehen. Dazu müssten die Interferenzstreifen in einer Absorptionmessung optisch aufgelöst werden können. Dies ist bei den gezeigten Streifen aber nicht möglich, da ihr Abstand nur etwa 300 nm beträgt, also kleiner ist als die bei der Abbildung verwendeten Lichtwellenlängen. Man könnte versuchen, einen „weichen“ Spiegel einzusetzen, d.h. einen Laser, dessen Dipolpotential viel breiter ist. Der klassische Umkehrpunkt müsste dann im flachen Teil des gaußförmigen Potentials in der Nähe des Maximums getroffen werden, die Abstände der Interferenzstreifen wären dann u.U. viel größer. Numerische Experimente in diese Richtung brachten leider keine definitive Antwort auf die Frage nach geeigneten Parametern. Mittlerweile gibt es allerdings eine vielversprechende, alternative Methode zur Reflexion von Atomstrahlen [115], die auf der Verwendung von Ramanübergängen beruht, die durch fokussierte Laser induziert werden. Mit dieser Methode sollten Messungen der hier vorgestellten Art möglich sein; darüber hinaus erlauben solche Raman-Spiegel auch den direkten Aufbau eines Fabry-Perot-Interferometers zur Bestimmung der Kohärenz des vom Atomlaser emittierten Atomstrahls.

3.4 Atomlaser mit zwei Radiofrequenzen — kohärent gepulster Atomstrahl

In diesem Kapitel soll ein im Vergleich zu den vorherigen Abschnitten leicht modifizierter Atomlaser diskutiert werden, der auch schon experimentell realisiert wurde [22, 24]. Statt einem Radiofrequenzfeld mit einer Frequenz benutzten Bloch *et al.* zwei Radiofrequenzen $\omega_{\text{RF},1}, \omega_{\text{RF},2}$, um den Auskoppelprozess anzuregen. Es wird sich im Folgenden zeigen, dass dies zu einem kohärent gepulsten Atomstrahl führt, da die Kondensatome mit zwei unterschiedlichen Energien ausgekoppelt werden und sich die zugehörigen Wellenfunktionen kohärent überlagern. Ein solches System stellt also einen *Zwei-Moden-Atomlaser* dar.

3.4.1 Gekoppelte Gross-Pitaevskii-Gleichungen mit zwei Radiofrequenzen

Die gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen (3.5, 3.10) sind, wie in den letzten Abschnitten dargelegt, gut geeignet, einen Radiofrequenz-Atomlaser bei $T = 0$ zu beschreiben. Um einen Atomlaser mit zwei Radiofrequenzen zu modellieren, muss man sie nur leicht modifizieren. Wieder beziehen sich die Betrachtungen auf ^{87}Rb im Hyperfeinzustand $F = 1$, die Fallenparameter orientieren sich an den Daten in [24]. Wie in Kap. 3.2 wird ein auf die vertikale Dimension reduziertes Modell betrachtet. Verwendet man wieder die Dipolnäherung für die Kopplung der drei Zeeman-Zustände, so ergeben sich die folgenden Gross-Pitaevskii-Gleichungen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{m_F}(z, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{m_F}(z) + g_{1D} \|\psi(z, t)\|^2 \right) \psi_{m_F}(z, t) + \sum_{m'_F} W_{m_F, m'_F} \psi_{m'_F}(z, t). \quad (3.27)$$

Es wird angenommen, dass alle Zeeman-Zustände mit der gleichen s -Wellenstrelänge wechselwirken; die Wellenfunktionen sind insgesamt auf 1 normiert. Die Wechselwirkung zwischen den Atomen und dem Radiofrequenzfeld mit den Frequenzen $\omega_{\text{RF},1}$ und $\omega_{\text{RF},2}$ wird durch

$$W_{m_F, m'_F} = 2\hbar \Omega_{\text{Rabi}} (\cos(\omega_{\text{RF},1}t) + \cos(\omega_{\text{RF},2}t)) (\delta_{m_F, m'_F+1} + \delta_{m_F, m'_F-1}) \quad (3.28)$$

beschrieben, wobei $\Omega_{\text{Rabi}} = g_F \mu_{\text{Bohr}} B_{\text{RF}} / (\sqrt{2}\hbar)$ ($g_F = -1/2$) wieder die Rabifrequenz für die Magnetfeldstärke B_{RF} ist.

Definiert man die durchschnittliche Radiofrequenz $\bar{\omega}_{\text{RF}} = (\omega_{\text{RF},1} + \omega_{\text{RF},2})/2$ und die Differenzfrequenz $\delta_{\text{RF}} = \omega_{\text{RF},1} - \omega_{\text{RF},2}$ und wendet dann die Transformation $\psi_{m_F}(t) \rightarrow e^{-im_F \bar{\omega}_{\text{RF}} t} \psi_{m_F}(t)$ auf die Wellenfunktionen an, so kann man wiederum die Rotating Wave Approximation anwenden, also die Beiträge hoher Frequenz der Form $e^{\pm 2im_F \bar{\omega}_{\text{RF}} t}$ vernachlässigen. Man erhält dann die Gross-Pitaevskii-Gleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{m_F}(z, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{m_F}(z) + m_F \hbar \bar{\omega}_{\text{RF}} + g_{1D} \|\psi(z, t)\|^2 \right) \psi_{m_F}(z, t) + \sum_{m'_F} \tilde{W}_{m_F, m'_F}(t) \psi_{m'_F}(z, t) \quad (3.29)$$

mit

$$\tilde{W}_{m_F, m'_F}(t) = 2\hbar \Omega_{\text{Rabi}} \cos\left(\frac{1}{2} \delta_{\text{RF}} t\right) (\delta_{m_F, m'_F+1} + \delta_{m_F, m'_F-1}). \quad (3.30)$$

Die effektiven Potentiale $V_{\text{eff},m_F}(z, t)$ gleichen denen aus Gl. (3.9) mit der Verstimmung $\hbar\Delta = \hbar\omega_{\text{RF}} - V_{\text{off}}$.

Die Untersuchungen in dieser Arbeit konzentrieren sich auf das Regime schwacher Kopplung $\Omega_{\text{Rabi}} < \omega_z$ [12, 132, 182]. In diesem Bereich wird das Bose-Einstein-Kondensat vom Auskoppelprozess fast nicht verändert, durch das Auskoppeln von Kondensatatomen ändert es vielmehr nur langsam seine Gesamtgröße [182]. In Kapitel 3.3 wurde dargelegt, dass diese Kopplung zwischen den gefangenen und freien Atomen räumlich auf die Umgebung des Schnittpunkts der effektiven Potentiale $V_{\text{eff},m_F}(z)$ beschränkt ist, also die Resonanzstelle z_{res} . Hier liegen nun zwei Radiofrequenzen vor, man erwartet demgemäß, dass Atome mit zwei verschiedenen Energien an zwei Resonanzstellen ausgekoppelt werden. Diese liegen bei

$$z_{\text{res},1,2} = \sqrt{2(\Delta \pm \frac{1}{2}\delta_{\text{RF}})/(\hbar\omega_z)} a_z, \quad (3.31)$$

also wieder an den Schnittstellen der effektiven Potentiale für die Radiofrequenz $\omega_{\text{RF},1}$ oder $\omega_{\text{RF},2}$ (vgl. Abb. 3.13). Abb. 3.12 enthält eine Darstellung der Dichteverteilung der Zustände $m_F = -1, 0$ ($F = 1$) nach einer Auskoppelzeit von 5 ms mit zwei Radiofrequenzen (weitere Details werden in Abschnitt 3.4.3 beschrieben). Die Dichteverteilung des $m_F = 0$ -Zustandes zeigt deutlich, dass die Bereiche maximalen Auskoppelns tatsächlich bei $z_{\text{res},1,2}$ liegen; betrachtet man beide Radiofrequenzen getrennt voneinander, so entsprechen die Punkte wieder gerade den klassischen Umkehrpunkten in den effektiven Potentialen $V_{\text{eff},m_F}(z) \pm m_F\hbar\delta_{\text{RF}}/2$. Wie schon im vorherigen Kapitel wird im Folgenden der ebenfalls freie Zustand $m_F = 1$ nicht

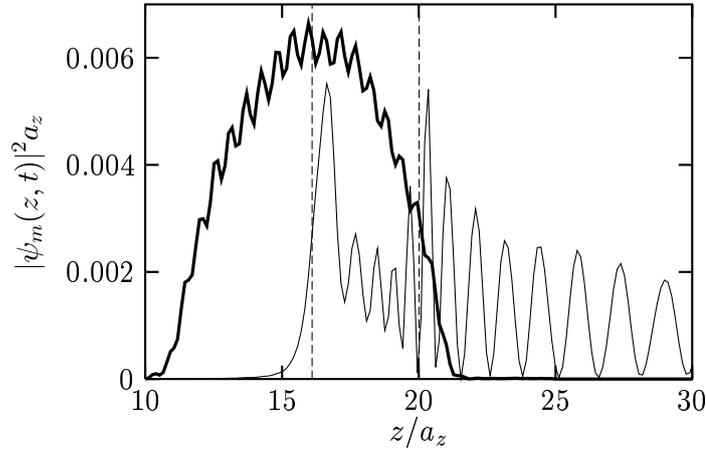


Abbildung 3.12: Darstellung der Dichteverteilungen für $m_F = -1, 0$ ($F = 1$) in der Falle für schwache Auskoppelstärke. Der gefangene $m_F = -1$ -Zustand (dicke Linie, um einen Faktor 20 verkleinert) enthält kleine Anregungen, die sich als Oszillationen über dem Grundzustand bemerkbar machen. Der ausgekoppelte $m_F = 0$ -Zustand (dünne Linie) zeigt für $z \gtrsim 23 a_z$ Pulse. Die gestrichelten Linien bezeichnen die beiden Resonanzpunkte $z_{\text{res},1,2}$ aus Gl. (3.31). Die Verstimmung der beiden Radiofrequenzen beträgt $\Delta_{1,2} = 2\pi \times (21000 \pm 4500)$ Hz.

weiter betrachtet, da er nur sehr schwach bevölkert wird. Nichtsdestotrotz wird er in allen numerischen Rechnungen berücksichtigt.

3.4.2 Airy-Funktionen für fallende Atome und die Flusstärke des Atomstrahls

Stationär fallende Materiewellen

Außerhalb des Kondensats spüren die ungefangenen Atome mit $m_F = 0$ nur das Gravitationspotential, da der Mean-Field-Anteil in V_{eff, m_F} aufgrund der geringen Dichte des Atomstrahls praktisch verschwindet. Die Wellenfunktionen der fallenden Teilchen sind aus diesem Grund Linearkombinationen von Airy-Funktionen, die ja die Lösungen der Schrödingergleichung mit einem linearen Potential sind. Die gewöhnliche Airy-Funktion $\text{Ai}(\xi)$ reicht aber nicht aus, um einen kontinuierlichen, stationären Strahl fallender Atome zu beschreiben. In Analogie zu freien, ebenen Wellen, wo Kosinus und Sinus zu einer propagierenden ebenen Welle $\propto \exp(ikx)$ kombiniert werden, muss man hier eine spezielle komplexe Lösung der Schrödingergleichung verwenden, um einen Strahl der Energie E zu beschreiben

$$\begin{aligned}\psi_E(z, t) &= \{ \text{Ai}(-\xi_E(z)) - i \text{Bi}(-\xi_E(z)) \} e^{-iEt/\hbar} \\ &= \mathcal{M}(\xi_E(z)) e^{-i[\Theta(\xi_E(z)) + Et/\hbar]},\end{aligned}\quad (3.32)$$

Das Argument $\xi_E(z)$ verschiebt und reskaliert die z -Achse

$$\xi_E(z) = \frac{1}{l} \left(z + \frac{E}{Mg} \right), \quad l = \left(\frac{\hbar^2}{2M^2g} \right)^{1/3}, \quad (3.33)$$

wobei l die schon unter Gl. (3.24) eingeführte typische Länge bezeichnet, hier für die Steigung g des Gravitationspotentials. Die Wellenfunktion $\psi_E(z, t)$ ist, obwohl sie eine Lösung der Schrödingergleichung im homogenen Gravitationsfeld ist, nicht normierbar, da $\text{Bi}(\xi_E(z))$ im klassisch verbotenen Bereich $z < -E/(Mg)$ für $z \rightarrow -\infty$ exponentiell wächst. Dieses Verhalten ist analog zu den Normierungsproblemen bei ebenen Wellen, auch $\psi_E(z, t)$ beschreibt einen stationären Teilchenfluss von $z = -\infty$ nach $z \rightarrow \infty$ ohne eine Quelle bei endlichem z . Da sich das Interesse hier auf den klassisch erlaubten Bereich beschränkt, stört dieses Problem die folgenden Betrachtungen jedoch nicht.

In späteren Abschnitten werden oft die asymptotischen Formen ($z \rightarrow \infty$) von $\mathcal{M}(\xi)$ und $\Theta(\xi)$ [2] gebraucht

$$\begin{aligned}\mathcal{M}(\xi) &\approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \xi^{-1/4} \\ \Theta(\xi) &\approx \frac{\pi}{4} - \frac{2}{3} \xi^{3/2},\end{aligned}\quad (3.34)$$

da diese zur Interpretation der Ergebnisse sehr dienlich sein werden.

Kohärente Überlagerung zweier fallender Wellen

Die zwei zum Auskoppeln verwendeten Radiofrequenzen führen wie schon erwähnt zu zwei verschiedenen Energien im resultierenden Atomstrahl (siehe Abb. 3.13). Die Energie des ausgekoppelten Strahls für eine Verstimmung Δ ist durch

$$E = \mu - \frac{1}{2} \frac{Mg^2}{\omega_z^2} - \hbar\Delta \quad (3.35)$$

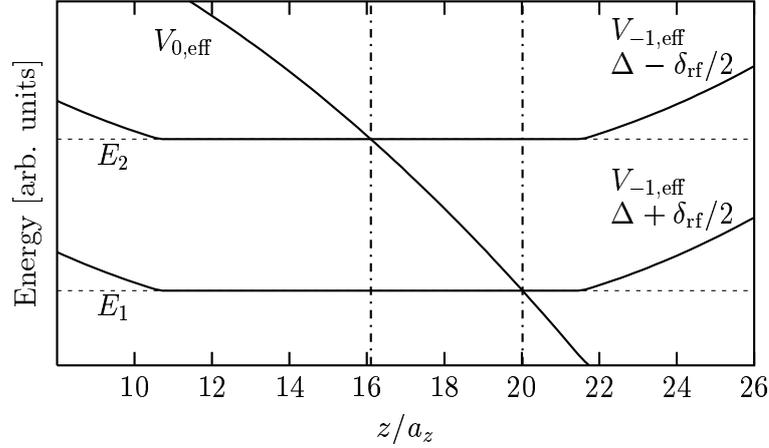


Abbildung 3.13: Effektive Potentiale V_{eff,m_F} und die Energien $E_{1,2}$ der ausgekoppelten Atome für die zwei Verstimmungen $\Delta \pm \delta_{\text{RF}}/2$. Die beiden vertikalen Linien bezeichnen die beiden Resonanzpunkte $z_{\text{res},1,2}$.

gegeben, wobei μ das chemische Potential bezeichnet. Für die beiden Radiofrequenzen $\omega_{\text{RF},1}$ und $\omega_{\text{RF},2}$ erhält man die Verstimmungen $\hbar\Delta_{1,2} = \hbar\omega_{\text{RF},1,2} - V_{\text{off}}$ und mit diesen die Energien $E_{1,2}$ (Abb. 3.13).

Nimmt man an, dass der gesamte Auskoppelprozess kohärent abläuft, so erhält man die Wellenfunktion des Atomstrahls durch Superposition zweier Wellenfunktionen für jeweils einen der beiden Energiebeiträge

$$\psi_0(z, t) = \mathcal{N}(\psi_{E_1}(z, t) + s\psi_{E_2}(z, t)), \quad (3.36)$$

dabei ist \mathcal{N} eine Normierungskonstante. Die relative Stärke der beiden Anteile wird durch den Parameter s berücksichtigt. Im Experiment wird normalerweise die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(z, t)|^2$ mithilfe von Abbildungsmethoden gemessen. Sie lässt sich, für den Fall, dass die Energien $E_{1,2}$ bezogen auf die mittlere Energie $\bar{E} = (E_1 + E_2)/2$ nicht zu verschieden sind, auf elegante Weise berechnen, indem man Gl. (3.36) um \bar{E} in eine Taylorreihe entwickelt. Verwendet man dann die asymptotischen Formen aus Gl. (3.34), so kann man $|\psi_0(z, t)|^2$ schreiben als

$$|\psi_0(z, t)|^2 = \tilde{\mathcal{N}}^2 \mathcal{M}^2(\xi_{\bar{E}}(z)) \{2 + 2P \cos(\phi(z, t) - \alpha)\} \quad (3.37)$$

mit der Phase

$$\phi(z, t) = \delta_{\text{RF}}t - \frac{\hbar\delta_{\text{RF}}}{Mgl} \sqrt{\xi_{\bar{E}}(z)}, \quad (3.38)$$

und der modifizierten Norm

$$\tilde{\mathcal{N}}^2 = \mathcal{N}^2 \frac{1 + |s|^2}{2}, \quad (3.39)$$

sowie der *Visibilität*

$$P = \frac{2|s|}{1 + |s|^2}. \quad (3.40)$$

Sieht man von der \mathcal{M}^2 -Abhängigkeit einmal ab, so hat Gl. (3.37) die typische Form eines Interferenzterms mit der Visibilität P . Die Maxima dieses Terms beschreiben das Fallen atomarer Pulse, also von kohärenten Paketen von Atomen, die durch das Radiofeld aus der Falle ausgekoppelt werden. Für die Position des k -ten Pulses gilt

$$z_k = -\frac{\bar{E}}{Mg} + \frac{1}{2}g\left(t - \frac{2\pi k + \alpha}{\delta_{\text{RF}}}\right)^2, \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (3.41)$$

was einer Pulsfrequenz $\nu_{\text{pulse}} = \delta_{\text{RF}}/(2\pi)$ entspricht, in völliger Analogie zum *Mode-Locking* zweier Moden in einem optischen Laser.

Die in den obigen Gleichungen auftauchende Phase α des Koeffizienten $s = |s|e^{i\alpha}$ ist für eine Verschiebung der Interferenzmuster, also der Pulse, verantwortlich. Gl. (3.36) beschreibt den Atomlaserstrahl, nachdem ein gewisser stationäre Zustand erreicht wurde. Aus diesem Grund wird α hier nur als ein freier Parameter gebraucht, mit dem die Pulse in der Zeit verschoben werden können.

Auskoppelrate

Um den Normierungsfaktor \mathcal{N} der Wellenfunktion in Gl. (3.36) zu bestimmen, kann man die Tatsache ausnutzen, dass in einer Raumdimension die Flussdichte j_z direkt gleich der Rate an Atomen ist, die durch einen Punkt fließen. Man kann j_z schreiben als

$$j_z(z, t) = |\psi_0(z, t)|^2 v_z(z), \quad (3.42)$$

$$v_z(z) = -\frac{\hbar}{M} \frac{\partial \Theta}{\partial z} = \frac{\hbar}{Ml} \sqrt{\xi_{\bar{E}}(z)}, \quad (3.43)$$

dabei ist v_z die Fallgeschwindigkeit der Atome. Gl. (3.43) ergibt sich, wenn für $z \rightarrow \infty$ nur die führenden Terme in $\xi_{\bar{E}}(z)$ berücksichtigt werden. Mittelt man in Gl. (3.42) über die Zeit, so erhält man

$$j_z = \frac{2\hbar}{\pi Ml} \tilde{\mathcal{N}}^2. \quad (3.44)$$

In [182], haben Steck *et al.* eine Formel für die Auskoppelrate einer dreidimensionalen Falle im Limes schwacher Kopplung angegeben. Dieses Ergebnis kann in analoger Weise auch für eine Raumdimension hergeleitet werden (siehe [181]). Die Rate bei einem Auskoppelpunkt z_{res} (bei einer Verstimmung Δ) ist dann durch

$$\Gamma_{z_{\text{res}}}^{\text{1D}} = 2\pi \left(\frac{\Omega}{\omega_z}\right)^2 \frac{|\psi_{-1}(z_{\text{res}})|^2}{\sqrt{2\Delta/\omega_z}} a_z \omega_z \quad (3.45)$$

gegeben. Unter der Annahme, dass sich die Raten an den beiden Resonanzpunkten $z_{\text{res},1,2}$ zur Gesamtrate, die gleich j_z sein muss, aufaddieren, kann mithilfe von Gl. (3.44) die Normierung berechnet werden

$$\tilde{\mathcal{N}}^2 = \frac{\pi Ml}{2\hbar} \left(\Gamma_{z_{\text{res},1}}^{\text{1D}} + \Gamma_{z_{\text{res},2}}^{\text{1D}} \right), \quad (3.46)$$

wobei $\Gamma_{z_{\text{res},1,2}}^{\text{1D}}$ natürlich aus den Verstimmungen $\Delta \pm \delta_{\text{RF}}/2$ berechnet wird.

Aus Gl. (3.36) erkennt man, dass $|s|$ auch das Verhältnis der Auskoppelraten an den Resonanzpunkten bestimmt, man kann also

$$|s|^2 = \frac{\Gamma_{z_{\text{res},1}}^{\text{1D}}}{\Gamma_{z_{\text{res},2}}^{\text{1D}}} \quad (3.47)$$

schreiben, sodass sich für die Visibilität der Ausdruck

$$P = 2 \frac{\sqrt{\Gamma_{z_{\text{res},1}}^{\text{1D}} \Gamma_{z_{\text{res},2}}^{\text{1D}}}}{\Gamma_{z_{\text{res},1}}^{\text{1D}} + \Gamma_{z_{\text{res},2}}^{\text{1D}}} \quad (3.48)$$

ergibt. Die numerischen Ergebnisse im nächsten Abschnitt werden zeigen, dass dieser Ausdruck tatsächlich korrekt ist. Wenn die Frequenzdifferenz δ_{RF} sehr klein ist, so können folgende Näherungen verwendet werden:

$$\tilde{\mathcal{N}}^2 = \frac{\pi M l}{\hbar} \Gamma_{z_{\text{res}}}^{\text{1D}}, \quad (3.49)$$

$$|s|^2 = \frac{|\psi_{-1}(z_{\text{res},1})|^2}{|\psi_{-1}(z_{\text{res},2})|^2}, \quad (3.50)$$

$$P = 2 \frac{|\psi_{-1}(z_{\text{res},1})| |\psi_{-1}(z_{\text{res},2})|}{|\psi_{-1}(z_{\text{res},1})| + |\psi_{-1}(z_{\text{res},2})|}. \quad (3.51)$$

An diesen Ausdrücken ist zu erkennen, dass P sehr eng mit der Korrelationsfunktion des gefangenen Bosegases verwandt ist [24].

3.4.3 Numerische Ergebnisse

Beobachtung von Pulsen

Die Fallenparameter für die nun zu beschreibenden numerischen Untersuchungen des Zwei-Moden-Atomlaser entsprechen den schon in Kapitel 3.3 verwendeten Werten. Um die Eigenschaften des Atomstrahls im Modell des Zwei-Moden-Atomlaser zu analysieren, wurden die Anfangswellenfunktionen über längere Zeiten bis zu ≈ 50 ms mit verschiedenen Kopplungsparametern propagiert. Die Kopplungsstärken wurden meist relativ niedrig gewählt, um eine klare Trennung zwischen der Zeitskala der Rabioszillationen und der Zeitskala der Pulse zu erreichen. Typischerweise wird eine Magnetfeldstärke $B_{\text{RF}} = 0.1$ mG verwendet, ein Wert, der auch im Experiment [24] verwendet wird. Die daraus resultierende Rabifrequenz beträgt $\Omega_{\text{Rabi}} = 2\pi \times 70$ Hz und ist damit kleiner als die Fallenfrequenz ω_z und i. A. auch kleiner als die Pulsfrequenz δ_{RF} (siehe Seite 74). Alle Rechnungen wurden mit anfänglichen $N = 5 \times 10^5$ Atomen in der Falle durchgeführt.

In Abb. (3.14) wird die Dichteverteilung des ausgekoppelten Zustands als Funktion von Ort und Zeit dargestellt. Der Atomstrahl entsteht im Bereich des Bose-Einstein-Kondensats und zeigt ganz eindeutig die in Abschnitt 3.4.2 vorhergesagten Pulse. Um zu belegen, dass die Pulse wirklich den Trajektorien aus Gl. (3.41) folgen, zeigt Abb. 3.15 einen Kontourplot der Daten aus Abb. 3.14 zusammen mit den Trajektorien aus Gl. (3.41). Wie schon weiter oben angemerkt, wird die Phase α verwendet, um die Trajektorien in der Zeit zu verschieben. Abgesehen von dieser Anpassung zeigen die Pulse das korrekte Verhalten, sie starten zwischen den beiden Resonanzpunkten bei $-\bar{E}/(Mg)$ und tauchen dort mit der richtigen Frequenz $\delta_{\text{RF}}/(2\pi)$ auf.

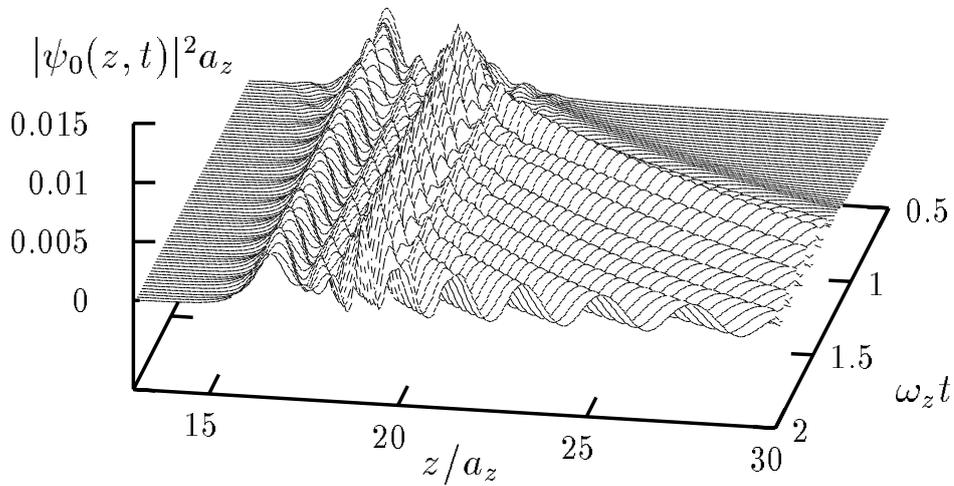


Abbildung 3.14: Darstellung der Dichte der ausgekoppelten Atome im $m_F = 0$ -Zustand. Diese werden vor allem an den beiden Resonanzpunkten durch einen Radiofrequenz-induzierten Spinflip aus dem gefangenen $m_F = -1$ -Zustand „erzeugt“ (vgl. Abb. 3.12) und fallen dann nach unten (in der Abb. nach rechts). Man kann die Pulszüge, die im Bereich des Kondensats (bis $z \approx 22 a_z$) entstehen, sehr gut erkennen. Die Verstimmungen der Radiofrequenzen betragen hier $\Delta_{1,2} = 2\pi \times (19.5 \pm 3.0)$ kHz.

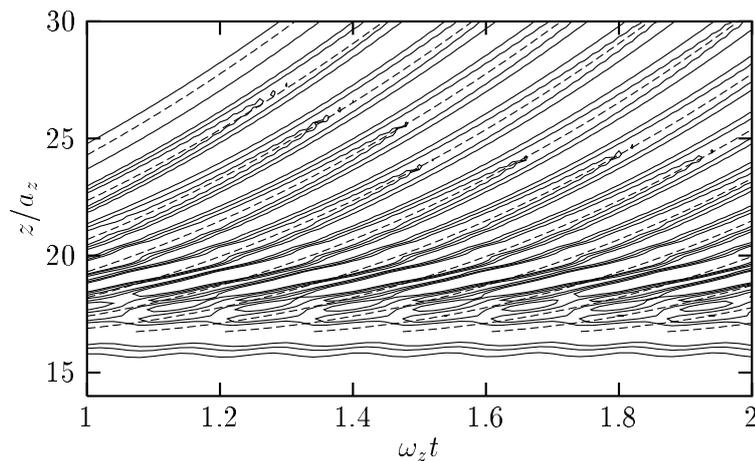


Abbildung 3.15: Konturplot der Daten aus Abb. 3.14. Die durchgezogenen Linien sind die Kontourlinien für $|\psi_0(z, t)|^2 a_z = 0.001, 0.002, 0.003$. Die gestrichelten Linien entsprechen den Trajektorien der Pulsmaxima aus Gl. (3.41).

Auskoppelrate und Visibilität

In diesem Abschnitt sollen die numerischen Resultate mit den analytischen Vorhersagen aus Kapitel 3.4.2 verglichen werden. Alle Ergebnisse wurden bei fester Frequenz $\omega_{\text{RF},2}$ berechnet, und zwar so, dass der zugehörige Resonanzpunkt in der Mitte des Bose-Einstein-Kondensats liegt ($z_{\text{res},2} = z_{\text{sag}} = g/\omega_z^2$, $\Delta_2 = 2\pi \times 6.5$ kHz). Δ_1 ist dann durch $\Delta_1 = \Delta_2 + \delta_{\text{RF}}$ gegeben; es werden nur positive Frequenzdifferenzen $\delta_{\text{RF}} = 0 \dots 2\pi \times 13$ kHz berücksichtigt.

Die Visibilität in Abb. 3.12 ist recht hoch, sie liegt bei $P = 0.90$. Erhöht man δ_{RF} , so fällt die Visibilität ab, wie in Abb. 3.16 erkennbar ist. Dies beruht darauf, dass P vor allem vom Quotienten der Wellenfunktion ψ_{-1} an den Resonanzstellen $z_{\text{res},1,2}$ abhängt (siehe Gl. (3.47,3.48,3.45)). Dieser Quotient nimmt ab, wenn man $z_{\text{res},1}$ zum Rand des Kondensats hin verschiebt.

Man kann nun die Gl. (3.45,3.48,3.37) verwenden, um die Visibilität und die Normierung der Airy-Funktionen aus Abschnitt 3.4.2 zu berechnen. Dazu werden entweder die Werte $|\psi_{-1}(z_{\text{res},1,2})|$ aus der Thomas-Fermi-Näherung Gl. (1.59) berechnet oder direkt die numerisch erhaltenen Werte benutzt. Die gestrichelte Linie in Abb. 3.16 wurde auf diese Weise unter Verwendung der numerischen Werte für $|\psi_{-1}(z_{\text{res},1,2}, t)|$ erhalten; außerhalb des Bose-Einstein-Kondensats passt sie sehr gut auf die numerisch berechnete Lösung der gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen. Das Thomas-Fermi Resultat (nicht abgebildet) unterscheidet sich fast nicht von dieser Kurve. Die gesamte Auskoppelrate $\Gamma_{z_{\text{res},1}}^{\text{1D}} + \Gamma_{z_{\text{res},2}}^{\text{1D}}$ kann ebenso unter Zuhilfenahme der Gl. (3.46) aus \tilde{N}^2 berechnet werden; ein Vergleich mit der Zeitkonstante der Abnahme der Kondensatpopulation $N_{-1}(t)$ (Gl. (3.21)) zeigt eine gute Übereinstimmung.

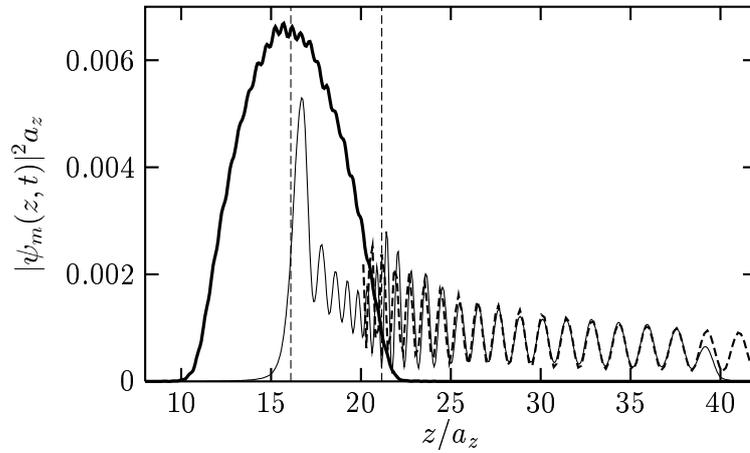


Abbildung 3.16: Atomare Dichteverteilungen im Zwei-Moden-Atomlaser (siehe auch Abb. 3.12). Die Abbildung zeigt die Verteilungen nach 5 ms Auskoppelzeit mit $\delta_{\text{RF}} = 2\pi \times 12000$ Hz. Der untere (im Bild rechte) Resonanzpunkt befindet sich im Randgebiet des Kondensats, sodass die Visibilität $P = 0.61$ kleiner ist als in Abb. 3.12. Die gestrichelte Linie ist der Graph der Funktion in Gl. (3.37) mit der Normierung aus Gl. (3.46). Die Dichte des ungefangenen Zustands fällt bei $z = 40 a_z$ auf Null ab, weil aus numerischen Gründen am Rand des Simulationsgitters ein dämpfendes imaginäres Potential eingesetzt wird.

Nachdem nun gezeigt wurde, dass der ausgekoppelte Atomstrahl im Modell der gekoppelten Gross-Pitaevskii-Gleichungen in Gl. (3.10) durch die Wellenfunktion in Gl. (3.37) beschrieben werden kann, soll nun noch die Visibilität P genauer untersucht werden. Für verschiedene δ_{RF} kann man P entweder durch Anpassung der Funktion in Gl. (3.37) an die numerisch gewonne-

nen Daten erhalten oder durch Berechnung mittels Gl. (3.48) unter Verwendung der Thomas-Fermi-Näherung oder der numerischen Werte für $|\psi_{-1}(z_{\text{res},1,2})|$. Abb. 3.17 zeigt das Ergebnis: Die Thomas-Fermi-Näherung (durchgezogene Linie) passt sehr gut zu den semi-analytischen Werten (Dreiecke). Durch Fitten der Dichteverteilung (3.37) an die numerischen Daten kann man ebenfalls einen Wert für die Visibilität bestimmen; die Abbildung zeigt, dass die so erhaltenen Werte für P (Kreise) gut mit den komplett analytisch berechenbaren Resultaten der TF-Näherung übereinstimmen.

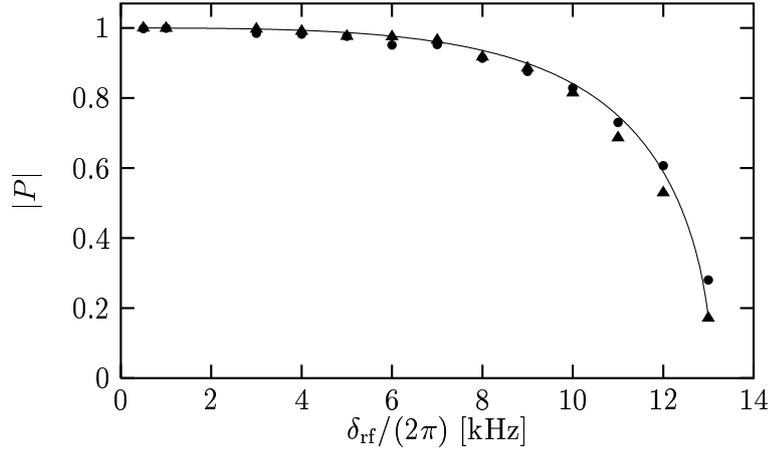


Abbildung 3.17: Visibilität als Funktion der Radiofrequenzdifferenz δ_{RF} . Die durchgezogene Linie wurde vollständig aus der Thomas-Fermi-Näherung berechnet. Die Dreiecke wurden mithilfe der numerischen Werte $\psi_{-1}(z_{\text{res},1,2})$ zu einer festen Zeit gewonnen. Die mit Kreisen gekennzeichneten Punkte wurden durch Fitten der Dichteverteilung (3.37) an die numerischen Daten bestimmt (nach ≈ 7.5 ms Auskoppelzeit). Der Fehler für diese Werte ist kleiner als 5%, er wurde konservativ aus der Fit-Prozedur abgeschätzt.

Für kleine Differenzfrequenzen besitzt die Visibilität die Form (3.51). Diese erinnert an die Form der Einteilchendichtematrix (oder Korrelationsfunktion) in Gl. (1.32), wenn man den fluktuierenden Anteil $\tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ einmal außer Acht lässt, der ja bei Temperatur Null sowieso sehr klein ist. Tatsächlich ist die Visibilität $P(z_{\text{res},1}, z_{\text{res},2})$ gleich der auf die mittlere Dichte $(|\psi_{-1}(z_{\text{res},1})| + |\psi_{-1}(z_{\text{res},2})|)/2$ normierten Korrelationsfunktion $\langle \hat{\Psi}^\dagger(z_{\text{res},1}) \hat{\Psi}(z_{\text{res},2}) \rangle$. Man kann also bei endlicher Temperatur die Kohärenz erster Ordnung des Bose-Einstein-Kondensats durch Messung der Visibilität bestimmen. Dieser Ansatz wurde in [24] ausgenutzt, um erstmalig die Korrelationsfunktion eines Bose-Einstein kondensierten Systems direkt zu messen. Die Vorgehensweise im Experiment war der oben beschriebenen Fit-Prozedur sehr ähnlich, nur dass die verwendeten Differenzfrequenzen δ_{RF} unterhalb von $2\pi \times 1$ kHz lagen, und damit der Abstand der Resonanzpunkte $z_{\text{res},2} - z_{\text{res},1}$ im Bereich der thermischen de Broglie-Wellenlänge λ_{th} und darunter lag.

An dieser Stelle soll nun noch kurz ein Phänomen besprochen werden, das in allen Simulationen mit zwei Radiofrequenzen mehr oder minder stark auftritt. In Abb. 3.12 und 3.16 erkennt man, dass die Dichteverteilung des Kondensats nicht glatt ist, sondern dass der üblichen Thomas-Fermi-artigen Verteilung noch Oszillationen aufgeprägt sind, die sich mit der Zeit über den Bereich des Kondensats bewegen. Diese Oszillationen rühren offensichtlich von Anregungen des Kondensats her, die sich teilchenartig verhalten. Verfolgt man die Entstehung dieser Anre-

gungen mit zunehmender Auskoppelzeit, so stellt man fest, dass mit zunehmender Stärke der Anregungen die ausgekoppelte Wellenfunktion immer schlechter durch eine Linearkombination aus zwei Airy-Funktionen (Gl. (3.36)) beschrieben wird. Dies ist in Abb. 3.18 dargestellt, wo die Dichteverteilungen zu zwei verschiedenen Auskoppelzeiten zu sehen sind. Obwohl die Auskoppelstärke mit $B_{\text{RF}} = 0.1 \text{ mG}$ recht schwach ist, zeigt das Kondensat nach 20 ms sehr starke Anregungen. Dem entspricht eine deutlich ausgeprägte Substruktur der ausgekoppelten Pulse, die nur grob denen bei 8 ms ähneln.

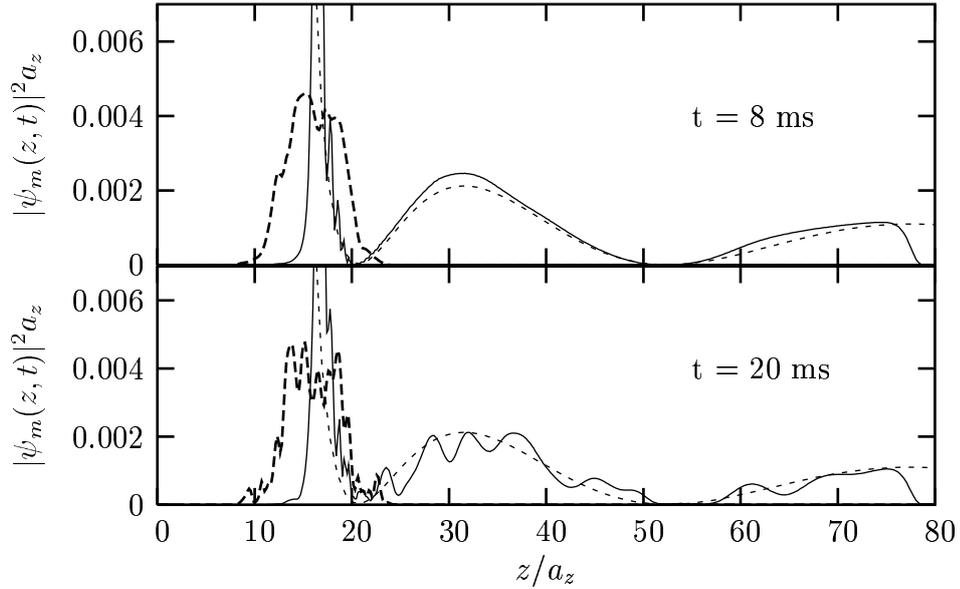


Abbildung 3.18: Dichteverteilung nach $t = 8 \text{ ms}$ bzw. 20 ms Auskoppelzeit. Die Differenzfrequenz $\delta_{\text{RF}} = 600 \text{ Hz}$ ist recht klein, sodass die beiden Resonanzpunkte sehr nahe beieinander liegen (hier in der Fallenmitte). Nach 20 ms sind die ausgekoppelten Pulse (durchgezogene Linie) nur noch grob durch das Modell zweier überlagerter Airy-Funktionen (dünne, gestrichelte Kurve) zu beschreiben.

Um dies genauer zu analysieren, wurde das Spektrum $S(E)$ der gefangenen bzw. der ausgekoppelten Wellenfunktion berechnet. $S(E)$ kann für eine Wellenfunktion $\psi(z, t)$ durch eine so genannte „gefensterte“ Fouriertransformation berechnet werden

$$S(E) = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} dt \langle \psi(t_0) | \psi(t) \rangle e^{iE/\hbar t} \quad (3.52)$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t) \rangle = \int dz \psi^*(z, t_0) \psi(z, t). \quad (3.53)$$

Abb. 3.19 zeigt das Spektrum des Kondensats bzw. der ausgekoppelten Atome für die zu Abb. 3.18 gehörigen Daten. Das Kondensat besitzt neben der Hauptlinie des chemischen Potentials μ weitere Energiebeiträge, die von den oben diskutierten Anregungen herrühren. Die Satellitenlinien sind vom chemischen Potential jeweils ein ganzzahliges Vielfaches der Radiofrequenzdifferenz δ_{RF} entfernt.

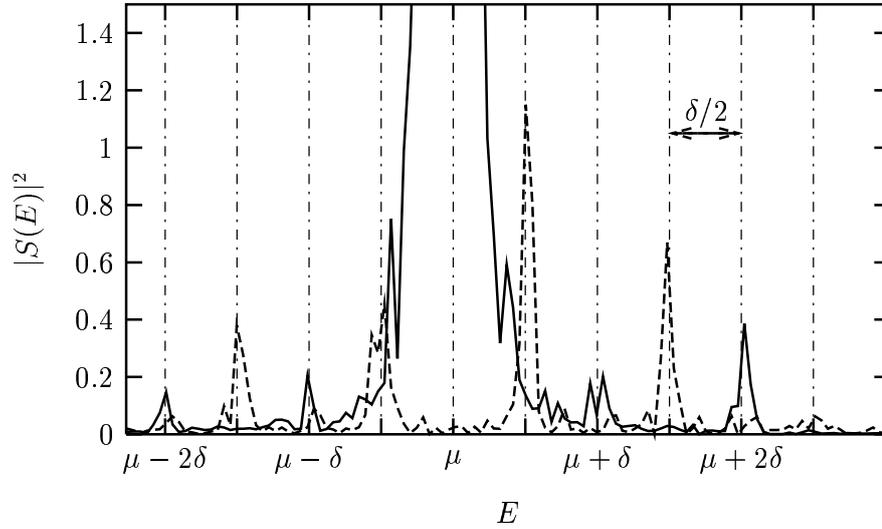


Abbildung 3.19: Energiespektrum des Kondensats (durchgezogen) und des Atomstrahls (gestrichelt). Das Spektrum wurde aus den zu Abb. 3.18 gehörigen Daten gewonnen. Die gesamte Auskoppelzeit betrug 37.5 ms, das „Zeitfenster“ beginnt bei $t_0 \approx 0.14$ ms, da zu Beginn des Auskoppelprozesses ($t = 0$ ms) $\psi_0(\mathbf{x}) = 0$ gilt, und somit das Spektrum der ausgekoppelten Atome für $t_0 = 0$ verschwindet. Man erkennt deutlich, dass das Kondensat neben dem Energieanteil beim chemischen Potential μ noch weitere, jeweils um die Radiofrequenzdifferenz δ_{RF} verschobene Anteile besitzt. Die Energien des Atomstrahls sind dagegen um $\delta_{\text{RF}}/2$ verschoben.

Das Spektrum des Atomstrahls zeigt zwei starke Beiträge bei $\mu \pm \delta_{\text{RF}}/2$, die man gemäß Gl. (3.35) für die beiden Verstimmungen $\Delta_{1,2}$ auch erwartet.¹⁰ Daneben gibt es auch hier im Abstand $n\delta_{\text{RF}}$ weitere Linien. Alle zunächst unerwarteten Energiebeiträge lassen sich durch

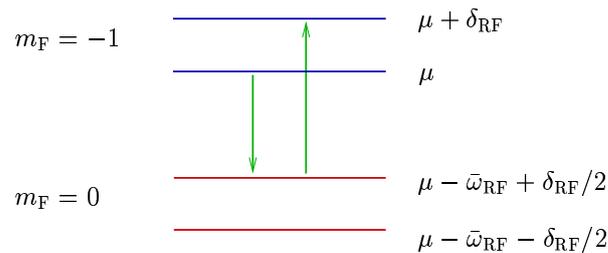


Abbildung 3.20: Aus- und wieder Einkoppeln eines Atoms führt zur Erhöhung oder Erniedrigung seiner Energie um $\pm\delta_{\text{RF}}$. In der Abbildung wird ein gefangenes Atom ($m_F = -1$) zunächst mit der kleineren Frequenz aus- und dann mit der größeren wieder eingekoppelt. Auf diese Weise wird eine Anregung bei $\mu + \delta_{\text{RF}}$ erzeugt.

einen einfachen Effekt höherer Ordnung in der Rabi-Frequenz Ω_{Rabi} erklären: Ein Atom, das mit einer der beiden Radiofrequenzen $\omega_{\text{RF},1,2}$ ausgekoppelt wurde, kann mit der jeweils anderen Frequenz wieder eingekoppelt werden, sodass sich letztendlich seine Energie um $\pm\delta_{\text{RF}}$

¹⁰Bedingt durch die Transformation $\psi_{m_F}(t) \rightarrow e^{-im_F\bar{\omega}_{\text{RF}}t}\psi_{m_F}(t)$ erscheinen die beiden Energien symmetrisch um die Energie des Kondensats.

geändert hat (siehe Abb. 3.20). Dieser Vorgang kann nicht nur für Atome aus dem eigentlichen Kondensat bei $E = \mu$, sondern auch für die angeregten Zustände mit $E = \mu + n\delta_{\text{RF}}$ ablaufen; auf diese Art entstehen sukzessive weitere Anregungen, deren Stärke allerdings abnimmt. Die in den vorherigen Kapiteln implizit gemachte Annahme, dass nur Prozesse erster Ordnung in Ω_{Rabi} eine Rolle spielen (Born- und Markov-Näherung) trifft hier also nicht zu (siehe auch [104]).

Es stellt sich nun die Frage, ob man diese Art der Kopplung verschiedener Energiezustände im ausgekoppelten Atomstrahl ausnutzen kann, um z.B. eine Art Modenkopplung ähnlich der Kopplung von Lasermoden zu realisieren. Auf diese Art ließen sich kohärente atomare Pulse kürzerer Dauer erzeugen. Weiterführende Untersuchungen, bei denen mithilfe eines phänomenologischen Pumpterms [113] versucht wurde, die Erzeugung solcher Pulse zeitlich zu stabilisieren, führten leider nicht zum gewünschten Ziel.

3.5 Ausblick

Kohärente Atomstrahlen bieten sehr interessante Möglichkeiten für viele Anwendungen der Atomoptik, wie z.B. die Atomlithographie oder die Verbesserung von Atominterferometern. Weiterhin können sie u.U. zur Erzeugung bisher nicht realisierter Quantenzustände von Atomen verwendet werden, hier sind vor allem verschränkte Atomstrahlen von Interesse.

In naher Zukunft sollte es möglich werden, wirklich kontinuierliche Atomlaser zu bauen, die über einen effizienten Nachlademechanismus verfügen. Mittels Raman-Auskopplern wird man nicht nur, wie weiter oben angedeutet, gerichtete Atomstrahlen erzeugen können, sondern mithilfe zweier Ramanübergänge kann man auch kohärent gepulste, aber im Gegensatz zu den besprochenen RF-Atomlasern auch gerichtete Atomstrahlen realisieren. Die Verwendung mehrerer Radiofrequenzen oder Raman-Übergänge sollte schlussendlich auch die Erzeugung kürzerer atomarer Pulse erlauben, ganz analog zum modengekoppelten optischen Laser (siehe auch [5]).

4

Quantenstatistik ultrakalter Bose-Gase mittels Pfadintegralen

4.1 Statistische Mechanik von Vielteilchen-Systemen und Pfadintegrale

Um Systeme vieler wechselwirkender Teilchen physikalisch beschreiben zu können, wurde schon kurz nach den Anfängen der Quantentheorie die Quantenfeldtheorie mit ihren teilweise sehr mächtigen mathematischen Mitteln entwickelt. Oft können mit diesen analytischen Mitteln aber nur qualitative oder nur in gewissen Limites geltende quantitative Aussagen zu Vielteilchensystemen gemacht werden; die genaue Berechnung von Eigenschaften bei experimentell interessanten Parametern bleibt meist numerischen Verfahren vorbehalten.

Eine Möglichkeit, Probleme der Vielteilchenphysik numerisch zu lösen, besteht in der Verwendung von *Monte-Carlo-Pfadintegral-Methoden in imaginärer Zeit*. Im Gegensatz zu perturbativen Entwicklungen nach kleinen Kopplungsparametern erlaubt diese Methode die Berechnung thermodynamischer und zum Teil auch dynamischer Größen bei beliebigen Parametern, also auch im Bereich starker Kopplungskonstanten oder z.B. bei großen Dichten. In der Quantenchromodynamik sind Monte-Carlo-Pfadintegralrechnungen auf Raum-Zeit-Gittern [139] sogar oft der einzige Weg zur Berechnung relevanter Größen wie z.B. der Baryonenmassen. Im Bereich der kondensierten Materie hat Ceperley [39] gezeigt, dass man mit solchen PIMC-Techniken (*PfadIntegral Monte-Carlo*) allein unter Verwendung des Wechselwirkungspotentials zwischen zwei ^4He -Atomen viele der bis dahin nur grob berechenbaren Eigenschaften des supraflüssigen Heliums bestimmen kann. Krauth [91, 118] hat darüber hinaus mit einem PIMC-Verfahren die Bose-Einstein-Kondensation eines gefangenen, atomaren Gases näher untersucht und die Genauigkeit der Methode bestätigt.

In den Arbeiten von Krauth *et al.* wurden bisher nur dreidimensionale Bose-Gase betrachtet, alleine Mullin [86, 142] befasste sich mit zweidimensionalen Gasen in drei Dimensionen hat sich gezeigt [91], dass andere Näherungsmethoden, wie z.B. die Hartree-Fock-Näherung, bei oft geringerem numerischen Aufwand schon sehr gute Vorhersagen über Bose-Einstein-Kondensate ermöglichen. In zwei Dimensionen wird die Situation komplizierter, die Möglichkeit eines Kosterlitz-Thouless-Übergangs (siehe Kapitel 1.4) macht Mean-Field-Betrachtungen oft unmöglich [159], sodass PIMC eine attraktive Alternative z.B. zur Berechnung der Suprafluidität in quasi-zweidimensionalen Atomfallen darstellt.

Im Folgenden soll ein System von N identischen Bosonen der Masse m betrachtet werden, die untereinander mit einem Paarpotential $V(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ wechselwirken.¹ Der gesamte Hamiltonoperator hat in der Ortsdarstellung dann die Form

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \hat{H}_0^{(n)} + \sum_{k < l} V(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l), \quad (4.1)$$

wobei $\hat{H}_0^{(n)} = \mathbf{p}_n^2/(2m) + V_{\text{Falle}}(\mathbf{x}_n)$ der Hamiltonoperator des n -ten Teilchens im Fallenpotential $V_{\text{Falle}}(\mathbf{x}_n)$. Alle thermodynamischen Größen dieses Systems können nun durch Bildung von Erwartungswerten mithilfe des (hier nichtnormierten) Dichteoperators

$$\hat{\rho} = e^{-\beta \hat{H}} \quad (4.2)$$

berechnet werden. Durch Spurbildung über alle Zustände des Systems gelangt man zur Zustandssumme Z im *kanonischen* Ensemble, also bei fixierter Temperatur T ($\beta = 1/(kT)$) und Teilchenzahl N :

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\}. \quad (4.3)$$

Der Erwartungswert einer Observablen \hat{A} wird analog mittels

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho} \hat{A} \right\} \quad (4.4)$$

bestimmt. Nach Feynman [65] kann man die Spur-Formeln nun zu so genannten Pfadintegralen erweitern. Dazu werden als Basis des Hilbertraums $L_2(\mathbb{R}^D)^{\otimes N}$ aller N Teilchen im D -dimensionalen Raum die Ortzustände $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$ verwendet, die hier einfach mit $\mathbf{R} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ oder $|\mathbf{R}\rangle$ bezeichnet werden. Unter Verwendung dieser Zustände kann man die Spurbildung als Integral formulieren und erhält

$$Z = \int_{\mathbf{R}} d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle. \quad (4.5)$$

An dieser Stelle wird nun mittels eines Tricks die Pfadintegralformulierung eingeführt: Man betrachte statt der inversen Temperatur β den Wert $\tau = \beta/M$ ($M > 1$ ganzzahlig) und zerlege den Dichteoperator in ein Produkt gleicher Faktoren $e^{-\beta \hat{H}} = \left(e^{-\tau \hat{H}} \right)^M$. Führt man nun in diesem Produkt zwischen jedem der Faktoren eine Integration der Form $\mathbf{1} = \int_{\mathbf{R}_t} d\mathbf{R}_t |\mathbf{R}_t\rangle \langle \mathbf{R}_t|$ ein, so wird Gl. (4.5) zu

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_{t=0}^{M-1} d\mathbf{R}_t \langle \mathbf{R}_0 | e^{-\tau \hat{H}} | \mathbf{R}_1 \rangle \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\tau \hat{H}} | \mathbf{R}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{R}_{M-1} | e^{-\tau \hat{H}} | \mathbf{R}_0 \rangle \\ &= \int \prod_{t=0}^{M-1} d\mathbf{R}_t \rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}, \tau), \end{aligned} \quad (4.6)$$

wobei in der zweiten Zeile \mathbf{R}_M mit \mathbf{R}_0 identifiziert wird. Diese *exakte* Form der Zustands-

¹Die folgende Darstellung orientiert sich an Ref. [39].

summe nennt man ein *Pfadintegral* [65]. Die inverse Temperatur τ heißt *imaginäre Zeit*, da die Form des Propagators $\rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}, \tau) = \langle \mathbf{R}_t | e^{-\tau \hat{H}} | \mathbf{R}_{t+1} \rangle$ an den Dichteoperator der Quantenmechanik bei $T = 0$ erinnert ($e^{-i\hat{H}t/\hbar}$), nur eben mit imaginärem $t = -i\hbar\tau$. Aus Abb. 4.1

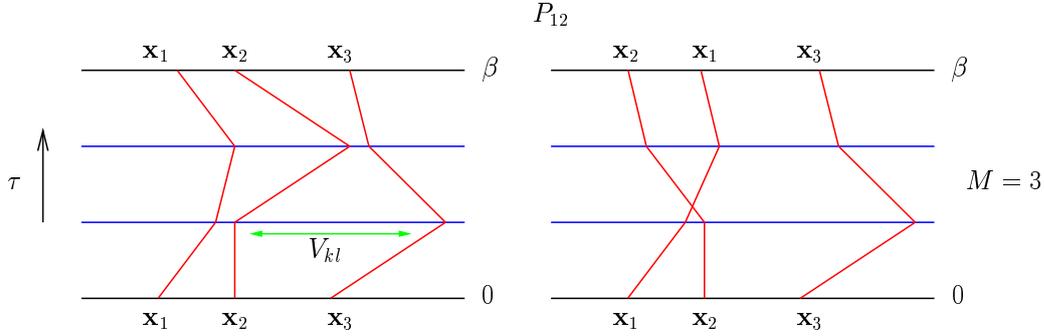


Abbildung 4.1: Darstellung eines „Pfad“ für drei Teilchen und $M = 3$ Zeitscheiben. Links ein klassischer Pfad ohne Permutation der Teilchenindizes bei β , rechts ein „bosonischer“ Pfad, bei dem die Teilchen 1 und 2 vertauscht werden. Zwischen zwei Teilchen k, l auf einer Zeitscheibe wirkt das Wechselwirkungspotential V_{kl} .

wird klar, wieso hier von Pfaden gesprochen wird. Eine Verteilung der Positionen \mathbf{R}_t auf den *Zeitscheiben* $t = 0, \dots, M - 1$ kann man als Pfade darstellen, wenn man die imaginäre Zeit nach oben und die Position in der Horizontalen aufträgt; von einer zur nächsten *Zeitscheibe* gelangt man unter Anwendung des Propagators $\rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}, \tau)$. Die linke Grafik zeigt eine solche Situation, man beachte die periodischen Randbedingungen ($\mathbf{R}_M = \mathbf{R}_0$).

Bisher wurden nur Teilchen betrachtet, die man anhand ihrer Nummerierung unterscheiden kann. In dieser Arbeit geht es aber vor allem um Bosonen; um diese in analoger Weise zu behandeln, muss man über die Teilchenindizes symmetrisieren, statt Gl. (4.5) erhält man

$$\begin{aligned}
 Z &= \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \int_{\mathbf{R}} d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | P\mathbf{R} \rangle \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \int \prod_{t=0}^{M-1} d\mathbf{R}_t \rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}, \tau)
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

für die Zustandssumme [65]. Es ist also über alle Permutationen P der Teilchenindizes 1 bis N zu summieren mit $P\mathbf{R} = (\mathbf{x}_{P1}, \mathbf{x}_{P2}, \dots, \mathbf{x}_{PN})$. Auf diese Art erhält man ein etwas anderes Pfadintegral, bei dem die Pfade einzelner Teilchen nicht in sich selbst geschlossen sind (Abb. 4.1, links), sondern gemäß einer Permutation P eine Art Zopf bilden (Abb. 4.1, rechts). In der zweiten Zeile von Gl. (4.7) wird dann \mathbf{R}_M mit $P\mathbf{R}_0$ identifiziert.

Gl. (4.7) ist eine exakte Darstellung der Zustandssumme für N wechselwirkende Bosonen mittels eines hochdimensionalen Integrals (in $M \times N \times D$ Dimensionen). Man kann dieses Integral schon allein ob der großen Anzahl von Dimensionen in dieser Form nicht direkt berechnen. Zudem sind die Matrixelemente $\rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}, \tau)$ i.A. nicht bekannt. Für eine große Anzahl M von Zeitscheiben wird jedoch die inverse Temperatur $\tau = \beta/M$ klein, d.h. jede Zeitscheibe entspricht für sich genommen einer hohen Temperatur. Berücksichtigt man die Zerlegung (4.1) des Hamiltonoperators, so kann man den Propagator $\hat{\rho} = e^{-\tau \hat{H}}$ nach Paaren von wechselwir-

kenden Teilchen aufteilen. Mit der Form

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \hat{H}_0^{(n)} + \sum_{k<l} \left\{ \hat{H}_2^{(k,l)} - \hat{H}_0^{(k)} - \hat{H}_0^{(l)} \right\} \quad (4.8)$$

mit

$$\hat{H}_2^{(k,l)} = \hat{H}_0^{(k)} + \hat{H}_0^{(l)} + V(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l) \quad (4.9)$$

des Hamiltonoperators \hat{H} lassen sich die Matrixelemente von $\hat{\rho}$ folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \tau) &\approx \prod_n \langle \mathbf{x}_n | e^{-\tau \hat{H}_0^{(n)}} | \mathbf{x}'_n \rangle \prod_{k<l} \frac{\langle \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l | e^{-\tau \hat{H}_2^{(k,l)}} | \mathbf{x}'_k, \mathbf{x}'_l \rangle}{\langle \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l | e^{-\tau (\hat{H}_0^{(k)} + \hat{H}_0^{(l)})} | \mathbf{x}'_k, \mathbf{x}'_l \rangle} \\ &= \prod_n \rho_0(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}'_n, \tau) \prod_{k<l} \frac{\rho_2(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l, \mathbf{x}'_k, \mathbf{x}'_l, \tau)}{\rho_0(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}'_k, \tau) \rho_0(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}'_l, \tau)}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Der Propagator $\rho_0(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}'_l, \tau)$ bezieht sich dabei auf den Hamiltonoperator $\hat{H}_0^{(n)}$ eines einzelnen Teilchens im Fallenpotential. Diese Formulierung entspricht einer Hochtemperaturnäherung, die im Limes $M \rightarrow \infty$ exakt wird. Sie ist sehr geeignet, den hier interessierenden Fall schwach wechselwirkender Bosonen zu beschreiben. Für kleine τ und schwaches Wechselwirkungspotential stellt das zweite Produkt in Gl. (4.10) eine Korrektur zum wechselwirkungsfreien Fall (erstes Produkt) dar, der nahe bei 1 liegt. In einigen Fällen lässt sich der Korrekturfaktor noch etwas einfacher fassen: Für ein harmonisches Potential V_{Falle} (oder im freien Raum) kürzen sich alle Terme mit Schwerpunktskoordinaten zweier Teilchen k, l im letzten Quotienten in Gl. (4.10) und man braucht nur noch die Relativkoordinaten $\mathbf{r}_{kl} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l$ und $\mathbf{r}'_{kl} = \mathbf{x}'_k - \mathbf{x}'_l$ zu betrachten

$$\frac{\rho_2(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l, \mathbf{x}'_k, \mathbf{x}'_l, \tau)}{\rho_0(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}'_k, \tau) \rho_0(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}'_l, \tau)} = \frac{\rho_2(\mathbf{r}_{kl}, \mathbf{r}'_{kl}, \tau)}{\rho_{0,\text{rel}}(\mathbf{r}_{kl}, \mathbf{r}'_{kl}, \tau)}. \quad (4.11)$$

Der Korrekturterm quantifiziert also den Unterschied zwischen der Streuung eines der Teilchen im Wechselwirkungspotential des anderen relativ zur freien Bewegung in der Falle.

Wie lässt sich nun die Wechselwirkung zwischen den Atomen eines kalten und verdünnten Bosegases beschreiben? Wie in Kapitel 1 dargelegt, sind die Abstände zwischen den Atomen relativ zur s -Wellenstreuulänge a_0 sehr groß, die Details des Wechselwirkungspotentials $V(r)$ spielen also nur eine untergeordnete Rolle. Aus diesem Grund ist es möglich, $V(r)$ durch ein Harte-Kugel-Potential mit der Streulänge a_0 als Kugelradius zu ersetzen:

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < a_0 \\ 0, & r > a_0. \end{cases} \quad (4.12)$$

Krauth *et al.* [90, 91, 118] haben gezeigt, dass mit diesem Potential sehr gute Vorhersagen für das Verhalten ultrakalter Bosegase möglich sind. Der im Rahmen dieser Dissertation entwickelte Simulationscode verwendet deshalb ebenfalls diese Potentialnäherung. Dazu wird eine Hochtemperaturnäherung für $\rho_2(\mathbf{r}_{kl}, \mathbf{r}'_{kl}, \tau)$ aus [36] eingesetzt.

4.2 Monte-Carlo Verfahren für Pfadintegrale

Die direkte Berechnung des Pfadintegrals Gl. (4.7) stellt für interessante Teilchenzahlen (mehr als einige hundert) eine analytisch wie numerisch unlösbare Aufgabe dar. Um solche Integrale berechnen zu können, wurden Verfahren entwickelt, die auf einer Auswertung des Integranden an zufällig ausgewählten Stützstellen beruhen und die deshalb *Monte-Carlo*-Verfahren genannt werden. Da der Konfigurationsraum (der Integrationsbereich) aller N Teilchen in D Dimensionen auf M Zeitscheiben aber immer noch zu groß ist, um ihn mit einer endlichen, zufälligen Stichprobe und annehmbaren statistischen Fehlern abzutasten, haben Metropolis *et al.* [131] eine Methode vorgeschlagen, bei der man nicht rein zufällige Elemente des Konfigurationsraums vorschlägt (so genanntes *simple sampling*), sondern nur solche, die „wichtig“ sind (*importance sampling*) (siehe dazu auch [19]).

Um das Integral (4.7) und auch Erwartungswerte von Observablen wie in Gl. (4.4) zu berechnen, werden im Metropolis-Algorithmus mittels eines Markov-Prozesses verschiedene Konfigurationen \mathcal{K}_s erzeugt, d.h. \mathcal{K}_{s+1} wird aus \mathcal{K}_s durch ein stochastisches Verfahren generiert, dessen Übergangswahrscheinlichkeit mit $\mathcal{P}(\mathcal{K}_s \rightarrow \mathcal{K}_{s+1})$ bezeichnet wird. Aus den Konfigurationen $\mathcal{K}_1, \dots, \mathcal{K}_n$ kann dann der Erwartungswert einer Observablen \hat{A} durch Mittelwertbildung gewonnen werden

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n A(\mathcal{K}_s), \quad (4.13)$$

da die einzelnen Konfigurationen schon mit der richtigen Wahrscheinlichkeit generiert werden. Auf die Berechnung des Wertes $A(\mathcal{K}_s)$ der Observablen auf einer Konfiguration wird im nächsten Abschnitt noch eingegangen.

Der Markov-Prozess und damit die Übergangswahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(\mathcal{K}_s \rightarrow \mathcal{K}_{s+1})$ muss gewisse Bedingungen erfüllen: Er muss zunächst ergodisch sein, d.h. jedes Element des Konfigurationsraums muss nach endlich vielen Schritten erreichbar sein. Ein solcher Prozess hat eine Gleichgewichtsverteilung $\pi(\mathcal{K})$, die durch

$$\sum_{\mathcal{K}} \pi(\mathcal{K}) \mathcal{P}(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}') = \pi(\mathcal{K}') \quad (4.14)$$

definiert ist. Die Idee des Metropolis-Algorithmus ist nun, einen Prozess zu finden, dessen Gleichgewichtsverteilung gleich dem Integranden des zu berechnenden Integrals ist, also hier die Zustandssumme aus Gl. (4.7)

$$\pi(\mathcal{K}) = \frac{1}{Z} \prod_{t=0}^{M-1} \rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}, \tau). \quad (4.15)$$

Eine Konfiguration ist in diesem Fall durch die Positionen $(\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1})$ und die Permutation P festgelegt.

Beim Metropolis-Algorithmus zerlegt man die Übergangswahrscheinlichkeit \mathcal{P} in eine Vorschlagswahrscheinlichkeit \mathcal{T} und eine Akzeptanzwahrscheinlichkeit \mathcal{A}

$$\mathcal{P}(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}') = \mathcal{T}(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}') \mathcal{A}(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}'). \quad (4.16)$$

Wenn eine Konfiguration \mathcal{K}_s vorliegt, so wird zunächst mit der Wahrscheinlichkeit $\mathcal{T}(\mathcal{K}_s \rightarrow \mathcal{K}')$ eine neue Konfiguration erzeugt. Diese wird dann mit der Wahrscheinlichkeit $\mathcal{A}(\mathcal{K}_s \rightarrow \mathcal{K}')$

akzeptiert ($\mathcal{K}_{s+1} = \mathcal{K}'$). Wird \mathcal{K}' abgelehnt, so gilt $\mathcal{K}_{s+1} = \mathcal{K}_s$. Um die Gleichgewichtsverteilung $\pi(\mathcal{K})$ zu erreichen, muss die Akzeptanzwahrscheinlichkeit die Form

$$A(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}') = \min \left[1, \frac{T(\mathcal{K}' \rightarrow \mathcal{K})\pi(\mathcal{K})}{T(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}')\pi(\mathcal{K}')} \right] \quad (4.17)$$

haben; wählt man also eine Zufallszahl $r \in [0, 1]$, so wird \mathcal{K}' akzeptiert, falls

$$r < \frac{T(\mathcal{K}' \rightarrow \mathcal{K})\pi(\mathcal{K})}{T(\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}')\pi(\mathcal{K}')} \quad (4.18)$$

Mit diesem Verfahren erreicht man, dass die Konfigurationen im Mittel der gewünschten Verteilung $\pi(\mathcal{K})$ gehorchen. Eine konkrete Implementierung der Methode als Computerprogramm muss neben diesen prinzipiellen allerdings noch weitere Anforderungen berücksichtigen, die vor allem mit der Tatsache verbunden sind, dass die im Markov-Prozess generierten Konfigurationen i.A. nicht statistisch unabhängig sind, da ja \mathcal{K}_{s+1} aus \mathcal{K}_s erzeugt wird. Diese Autokorrelation kann zum einen zu einer langsamen Konvergenz gegen die Gleichgewichtsverteilung führen, zum anderen muss ihr bei Bestimmung statistischer Fehler Rechnung getragen werden. Auf diese Aspekte wird im folgenden Kapitel kurz eingegangen.

Die Implementierung des PIMC-Programms, das im Rahmen dieser Dissertation entwickelt wurde, kann hier nicht genauer dargelegt werden. Sie stützt sich vor allem auf die Ideen von Ceperley *et al.* [39], der sich eingehend mit der effizienten Implementierung des Metropolis-Algorithmus für wechselwirkende Bosonen beschäftigt hat. Im Rahmen der Dissertation konnten mit dem PIMC-Code leider nur Ergebnisse für ein ideales, also nicht-wechselwirkendes Bose-Gas erhalten werden, die angedeutete Anwendung auf harte-Kugel-Streuung konnte nur noch in Ansätzen getestet werden.

4.2.1 Bestimmung von Observablenwartungswerten

Am Beispiel einer Observablen $\hat{A}(\mathbf{R})$, die von den Positionen aller N Teilchen abhängt, soll nun im Folgenden erläutert werden, wie man deren Erwartungswert (4.4) mithilfe eines PIMC-Verfahrens bestimmt und den statistischen Fehler der so gewonnenen Größe berechnet.

Unter Verwendung des Pfadintegrals (4.7) für die Zustandssumme kann man Gl. (4.4) umformen zu

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \int_{\mathbf{R}} d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} | P \mathbf{R} \rangle. \quad (4.19)$$

Da dies eine Spurformel ist, kann sie mithilfe der Zerlegung $e^{-\beta \hat{H}} = \left(e^{-\tau \hat{H}} \right)^M$ umgeschrieben werden auf

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \int_{\mathbf{R}} d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | \left(e^{-\beta \hat{H}} \right)^k \hat{A} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right)^{M-k} | P \mathbf{R} \rangle, \quad (4.20)$$

mit $k = 0, \dots, M-1$. Fügt man nun die Zeitscheiben ein, so ergibt sich der Pfadintegralausdruck

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \int \prod_{t=0}^{M-1} d\mathbf{r}_t \frac{1}{M} \sum_{k=0}^{M-1} A_k(\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1}) \quad (4.21)$$

mit

$$A_k(\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1}) = \langle \mathbf{R}_0 | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R}_1 \rangle \cdots \langle \mathbf{R}_k | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R}_{k+1} \rangle \cdots \langle \mathbf{R}_{M-1} | e^{-\beta \hat{H}} | P \mathbf{R}_0 \rangle, \quad (4.22)$$

bei dem noch über alle k gemittelt wurde. Unter der Annahme, dass \hat{A} nur von den Positionen \mathbf{R} der Teilchen abhängt, ist der Ausdruck $\langle \mathbf{R}_k | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R}_{k+1} \rangle$ leicht berechenbar und es ergibt sich

$$A_k(\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1}) = A(\mathbf{R}_k) \prod_{t=0}^{M-1} \rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}). \quad (4.23)$$

Für den Erwartungswert gilt

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \int \prod_{t=0}^{M-1} d\mathbf{R}_t \rho(\mathbf{R}_t, \mathbf{R}_{t+1}) A(\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1}), \quad (4.24)$$

mit der auf der Konfiguration $\mathcal{K} = (\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1}; P)$ definierten Größe

$$A(\mathcal{K}) = A(\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{R}_{M-1}) = \frac{1}{M} \sum_{k=0}^{M-1} A(\mathbf{R}_k). \quad (4.25)$$

Wegen (4.24) kann der Erwartungswert von \hat{A} mithilfe der vom Metropolis-Algorithmus generiert Konfigurationen \mathcal{K}_s berechnet werden:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n A(\mathcal{K}_s). \quad (4.26)$$

Neben dem Erwartungswert selbst ist bei einem stochastischen Verfahren aber auch die Angabe des bei der Berechnung auftretenden statistischen Fehlers von wesentlicher Bedeutung. Zunächst erwartet man natürlich, dass sich dieser wie üblich aus der Varianz der Werte $A(\mathcal{K}_s)$ in Gl. (4.26) berechnen lässt. Dies ist für statistisch unabhängige Daten auch richtig, hier sind die Konfigurationen \mathcal{K}_s und damit auch die Observablenwerte $A(\mathcal{K}_s)$ hingegen korreliert, da sie mit einem Markov-Prozess erzeugt werden. Dieser *Autokorrelation* der Daten $A(\mathcal{K}_s)$ muss man Rechnung tragen, sie vergrößert i.A. den auf naive Weise berechneten Fehler. Wie in [19, 179] gezeigt wird, kann man die Folge von Werten $A(\mathcal{K}_s)$, $s = 1, \dots, n$ als eine Zeitreihe auffassen und aus der Autokorrelationsfunktion

$$\phi_A(s) = \frac{\langle A(\mathcal{K}_0) A(\mathcal{K}_s) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (4.27)$$

eine *Autokorrelationszeit* τ_A extrahieren

$$\tau_A = \frac{1}{2} + \sum_{s=1}^{\infty} \phi_A(s). \quad (4.28)$$

Damit kann die Varianz bzw. der Fehler des Mittelwertes (4.26) berechnet werden, falls die Anzahl n der Konfigurationen groß gegen τ_A ist:

$$\Delta A = \sqrt{\frac{2\tau_A}{n} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)}. \quad (4.29)$$

Man kann also sagen, dass die Zeitreihe mit n Konfigurationen effektiv nur aus $n/(2\tau_A)$ unkorrelierten Konfigurationen besteht. Diese Aussage gilt zunächst nur für die Observable \hat{A} , andere Observable können andere Autokorrelationszeiten besitzen; um wirklich unabhängige Konfigurationen betrachten zu können, muss man eigentlich die Observable mit der längsten Autokorrelationszeit kennen.

Zur Bestimmung von τ_A bzw. des Fehlers ΔA gibt es neben der direkten Methode mittels Gl. (4.28) noch weitere Verfahren, die hier nur kurz genannt werden können. Das einfachste Verfahren zur Fehlerbestimmung ist das so genannte „Binning“, bei dem zunächst Mittelwerte der Größe A in Blocks von Konfigurationen der Länge l (z.B. $s = 1, \dots, l, s = l + 1, \dots, 2l$, usw.) berechnet werden. Der naiv berechnete Fehler dieser Mittelwerte strebt für größer werdende Blocklängen l gegen den Fehler aus Gl. (4.29).

Neben Größen, die direkt durch Mittelwertbildung wie in Gl. (4.26) berechnet werden können, gibt es weitere interessante Größen, wie z.B. die Suprafluidität (siehe Kapitel 4.3.2) oder die Wärmekapazität, die sich nur mit den Daten der gesamten Zeitreihe berechnen lassen, weil sie funktional von mehreren Erwartungswerten abhängen (vgl. z.B. Gl. (4.78)). Um den statistischen Fehler solcher Größen zu ermitteln, muss man zu so genannten *Resampling Plans* der Statistik greifen [57], bei denen z.B. einzelne Blöcke der Länge l weggelassen werden (*Jackknife-Methode*), oder gar nur eine zufällige Untermenge der Konfigurationen zur Berechnung der interessierenden Größe herangezogen wird (*Bootstrapping*).

4.2.2 Bestimmung der Energie von Bosonen in einer harmonischen Falle

Eine Größe von prinzipiellem Interesse bei der Untersuchung von Vielteilchensystemen ist die Gesamtenergie $E(T)$. Im Rahmen einer PIMC-Simulation kann man sie auf zwei Arten berechnen. Die Gesamtenergie ist einerseits als Erwartungswert des Hamiltonoperators \hat{H} aus Gl. (4.1), andererseits über eine Ableitung der Zustandssumme definiert:

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (4.30)$$

Die letztere Definition erweist sich hier als sinnvoller, da ihre explizite Form direkt aus der Pfadintegralformulierung der Zustandssumme Gl. (4.7, 4.10) gewonnen werden kann. Da nur das ideale Bose-Gas betrachtet werden soll, fällt das gesamte zweite Produkt in Gl. (4.10) weg und man benötigt nur den Propagator eines einzelnen Teilchens im harmonischen Fallenpotential. Dieser lautet für eine D -dimensionale Falle mit den Frequenzen ω_d ($d = 1, \dots, D$) und Teilchen der Masse m [65]

$$\rho_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \prod_{d=1}^D \sqrt{\frac{m\omega_d}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\omega_d\tau)}} e^{-\frac{m\omega_d}{2\hbar \sinh(\hbar\omega_d\tau)} [(x_d^2 + x_d'^2) \cosh(\hbar\omega_d\tau) - 2x_d x_d']}. \quad (4.31)$$

Bildet man nun die Ableitung (4.30)², so erhält man für den Energieausdruck, über den man während der Monte-Carlo-Simulation mitteln muss, folgende Form:

$$E_{\text{MC}} = \frac{N}{2} \sum_{d=1}^D \ln \frac{m\omega_d}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\omega_d\tau)} - \frac{1}{M} \sum_{d=1}^D \sum_{t=0}^{M-1} \sum_{k=1}^N \frac{m\omega_d}{2\hbar \sinh(\hbar\omega_d\tau)} \left[(x_{k,d}^2(t) + x_{k,d}^2(t+1)) \cosh(\hbar\omega_d\tau) - 2x_{k,d}(t)x_{k,d}(t+1) \right]. \quad (4.32)$$

$x_{k,d}(t)$ bezeichnet dabei die d -te Koordinate des k -ten Teilchens in der Zeitscheibe t .

Dieser Ausdruck für die Gesamtenergie wurde nun bei verschiedenen Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur T_c mittels PIMC-Simulationen für $N = 100$ Teilchen berechnet. Für eine radialsymmetrische Falle in drei Dimensionen ($\omega_d = \omega$, $d = 1, 2, 3$) zeigt Abb. 4.2 die Resultate (Datenpunkte). Zum Vergleich wurde die Energie mit einer anderen Methode (siehe Kapitel 4.3), die auf einer rekursiven Berechnung der Zustandssumme beruht, berechnet. Der statistische Fehler der PIMC-Daten wurde mittels mehrerer Methoden (Autokorrelationszeit, Binning und Jackknife) ermittelt.

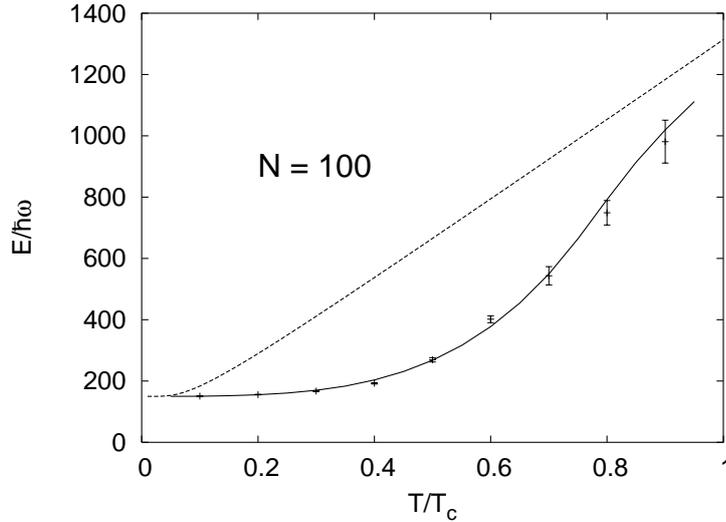


Abbildung 4.2: Energie von $N = 100$ Teilchen in einer harmonischen Falle als Funktion der Temperatur. Die Datenpunkte sind Resultate aus PIMC-Simulationen, die angegebenen Fehler sind statistischer Natur. Die durchgezogene Linie wurde aus einer rekursiven Berechnung der Zustandssumme gewonnen, die gestrichelte Linie zeigt die Energie von N Boltzmann-Teilchen.

Dieser erste Test belegt die Genauigkeit des neu implementierten PIMC-Programms. Wie erwartet, ist die Energie unterhalb der kritischen Temperatur für Bose-Einstein-Kondensation kleiner als die eines Gases von N unterscheidbaren Boltzmann-Teilchen (gestrichelte Linie), da für Bosonen alle Teilchen im Kondensat nur mit der Grundzustandsenergie zur Energie beitragen (in der Abbildung $E_{\text{Grundzustand}} = 100 \times \frac{3}{2}\hbar\omega$).

²Beachte: $\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \tau}$

4.2.3 Dichteverteilung in einer harmonischen Falle

Eine weitere, relativ leicht zu berechnende Größe ist die Dichteverteilung $\rho(\mathbf{x})$ der Atome in einer harmonischen Falle. Auch sie kann als Observable im Sinne von Gl. (4.13) aufgefasst werden

$$\rho(\mathbf{x}) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |\mathbf{x}\rangle_{kk} \langle \mathbf{x}| \right\rangle, \quad (4.33)$$

wobei der Projektor $|\mathbf{x}\rangle_{kk} \langle \mathbf{x}|$ auf den Zustand des k -ten Teilchens angewandt werden soll. Dieser Ausdruck kann nicht direkt ausgewertet werden, da die Matrixelemente des Projektors in Ortsraumdarstellung ($|\mathbf{R}\rangle$) Deltafunktionen sind. Man verwendet deshalb eine gemittelte Dichte auf einem Raumgitter. Die gemittelte Dichte in einem Volumen $\Delta V(\mathbf{x})$ um den Punkt \mathbf{x} lässt sich dann folgendermaßen schreiben:

$$\rho(\mathbf{x}) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \int_{\Delta V(\mathbf{x})} d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle_{kk} \langle \mathbf{x}'| \right\rangle. \quad (4.34)$$

Auf diese Art zählt das Integral gerade die Anzahl der Teilchen im Volumen $\Delta V(\mathbf{x})$; für die Pfadintegralsimulation bedeutet dies, dass man die Dichte mittels eines Histogramms der Teilchenpositionen in den Konfigurationen \mathcal{K}_s bestimmen kann.

Ein solches Histogramm für die Teilchendichte ist in Abb. 4.3 zu sehen. Für eine dreidimensionale, radialsymmetrische Falle wurden während einer PIMC-Simulation die x -Koordinaten aller Teilchen (auf allen Zeitscheiben) in ein Histogramm eingetragen. Dies entspricht einer Integration der Dichteverteilung $\rho(\mathbf{x})$ über die y - und z -Richtungen und liefert die Dichte $\rho(x)$ entlang der x -Achse.

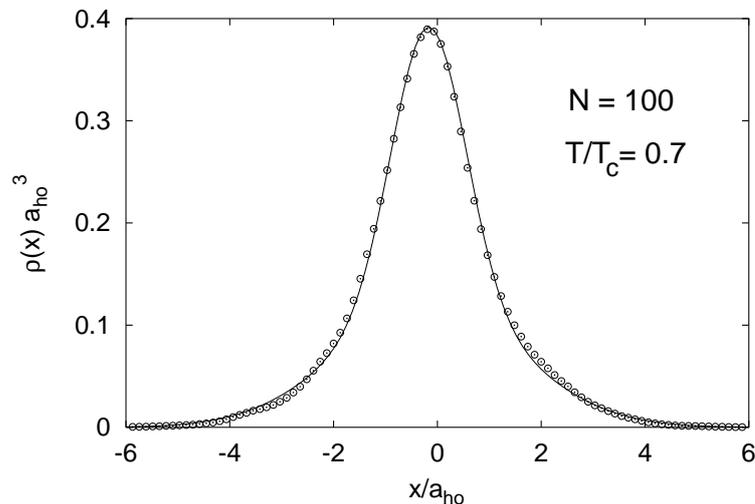


Abbildung 4.3: Dichteverteilung in einer radialsymmetrischen Falle. Die Kreise bezeichnen die integrierte Dichteverteilung $\rho(x)$ in x -Richtung (auf 1 normiert), wie sie aus einer PIMC-Rechnung erhalten wurde. Die Linie wurde mit einem Zwei-Flüssigkeiten-Modell (siehe Text, Gl. (4.37)) berechnet. a_{ho} ist die Breite des Grundzustandes beim harmonischen Oszillator. Die statistischen Fehler der PIMC-Daten sind kleiner als die verwendeten Symbole.

Die Kurve in Abb. 4.3 wurde mit einem so genannten Zwei-Flüssigkeiten-Modell für das inhomogene Bosegas berechnet [52, 147, 190]. Dieses Modell wurde ursprünglich von Tisza entwickelt, um einige Effekte in suprafluidem ^4He zu erklären (siehe auch Kap. 4.3.2). Hier nimmt man an, dass sich das Bosegas aus dem Bose-Einstein-Kondensat und einem thermischen Anteil zusammensetzt, der durch ein Boltzmann-Gas beschrieben werden kann. Um die Dichteverteilung berechnen zu können, wird die Anzahl $\langle N_0 \rangle$ der Kondensatome benötigt. Diese kann entweder aus der PIMC-Rechnung entnommen werden (siehe dazu [118, 143]), oder aus der Zustandssumme bestimmt werden (Kap. 4.3). Unter der Voraussetzung, dass man $\langle N_0 \rangle$ kennt, lässt sich die Dichte näherungsweise analytisch berechnen. Das Kondensat hat im Falle ohne Wechselwirkung die Dichteverteilung des Grundzustands des harmonischen Oszillators

$$\rho_{\text{cond}}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(x/a_{\text{ho}})^2}. \quad (4.35)$$

Der nichtkondensierte Anteil wird als klassisches, ideales Gas modelliert, hat also die Verteilung

$$\rho_{\text{nc}}(x) = \sqrt{\frac{\hbar\omega\beta}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\hbar\omega\beta(x/a_{\text{ho}})^2}. \quad (4.36)$$

Gewichtet man diese beiden Beträge mit der Kondensatbesetzung bzw. mit dem nichtkondensierten Anteil, so erhält man für die Gesamtdichte

$$\rho(x) = \frac{\langle N_0 \rangle}{N} \rho_{\text{cond}}(x) + \frac{N - \langle N_0 \rangle}{N} \rho_{\text{nc}}(x); \quad (4.37)$$

diese Funktion wurde in Abb. 4.3 aufgetragen. Sie stimmt mit dem PIMC-Resultat sehr gut überein, was einerseits die Richtigkeit des PIMC-Codes bestätigt und andererseits zeigt, dass das Zwei-Flüssigkeiten-Modell ein recht gutes Modell für ein kondensiertes Bosegas darstellt.

4.3 Permutationszykel und Suprafluidität beim idealen Bosegas

Trotz der vielen Ergebnisse bei der Untersuchung von Bose-Einstein-Kondensaten wurde bisher ein Bereich experimentell nur unzureichend untersucht, der bei der Entwicklung der Theorie des flüssigen Heliums eine zentrale Rolle spielte: die Suprafluidität. Dies liegt vor allem daran, dass im Gegensatz zum flüssigen Helium keine direkte Messung suprafluider Eigenschaften von dünnen Bosegasen möglich ist.

Das Verständnis der Suprafluidität basiert vor allem auf der Messung makroskopischer Größen wie z.B. der Viskosität von ^4He . Zur theoretischen Beschreibung konnten Standardmethoden der statistischen Mechanik im thermodynamischen Limes angewandt werden. Gefangene Bosegase haben jedoch eine endliche Ausdehnung, sodass man die Methoden zu ihrer Analyse abändern muss. So gibt es zwar einen Phasenübergang, dieser weist allerdings keine un stetigen Änderungen von thermodynamischen Größen auf wie bei Systemen im thermodynamischen Limes.

In einem homogenen System wird die Suprafluidität mit der Unterdrückung der inneren Reibung einer linearen Bewegung, die mit einer Geschwindigkeit unterhalb der Schallgeschwindigkeit abläuft, in Verbindung gebracht [123].

Dieser Effekt bezieht sich nur auf einen Teil der Flüssigkeit, den so genannten „suprafluiden Anteil“. Er lässt sich quantenmechanisch im Rahmen einer linearen-Antwort-Theorie aus der Dispersion der Impulsverteilung ausrechnen. Die Unterdrückung der Reibung kann auf elementare Anregungen mit einer linearen Dispersion zurückgeführt werden, die nur in einem wechselwirkenden Bosegas unterhalb der kritischen Temperatur auftreten. Obwohl also die Suprafluidität an das Vorhandensein von Wechselwirkungen zwischen den Teilchen eines Gases gebunden zu sein scheint, kann es auch in mesoskopischen idealen Bosegasen suprafluide Phänomene geben. Dies soll in den nächsten Abschnitten am Beispiel eines Bosegases in einer harmonischen Falle gezeigt werden. Dazu wird statt der linearen Antwort auf Translationen das Verhalten gegenüber Drehungen untersucht, weil die üblicherweise zum Einsatz kommenden Atomfallen mindestens eine Symmetrieachse besitzen. Der Antwortkoeffizient ist in diesem Fall das Trägheitsmoment des gefangenen Gases.

Brosens *et al.* [30] haben das Trägheitsmoment auf der Basis des klassischen Erwartungswertes $\langle x^2 + y^2 \rangle$ untersucht. Die Analyse konzentrierte sich dabei auf die Differenz der Trägheitsmomente eines gänzlich klassischen Boltzmann-Gases in der Falle und dem Erwartungswert von $\langle x^2 + y^2 \rangle$ für ein Bosegas (vgl. Gl. (4.59)). Auf diese Art werden allerdings die wirklichen suprafluiden Phänomene nicht erfasst, da diese nur durch die vollständig quantenmechanische Rechnung zu ermitteln sind.

Im Gegensatz zu Brosens *et al.* basiert Stringaris Arbeit [185] auf der exakten quantenmechanischen linearen-Antwort-Theorie. Er bestimmte die verschiedenen Beiträge des Kondensats und der thermischen Wolke zum Antwortkoeffizienten für ein ideales und auch für ein wechselwirkendes Gas. Dabei verwendete er das großkanonische Ensemble, was für die in den Experimenten üblichen Teilchenzahlen von mehr als 10^5 Atomen sicher ausreicht.

Statt die Beziehung zwischen Rotationen und der Suprafluidität zu untersuchen, kann man auch das Verschwinden von Dissipation in der suprafluiden Phase analysieren [61, 105, 163]. So wurde z.B. das Auftreten von Dissipation in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit einer externen Störung untersucht. Die numerischen Arbeiten in [105] favorisieren als wesentlichen Dissipationsmechanismus die Erzeugung von Vortizes, allerdings ist noch unklar, bei welcher kritischen Geschwindigkeit die Dissipation wirklich einsetzt.

Auf weitere Untersuchungen der Rotationseigenschaften wurde schon auf Seite 30 eingegangen. Hier soll nun ein etwas anderer Weg als in den bisherigen Arbeiten besprochen werden, um den suprafluiden Anteil in einem mesoskopischen Gas von nicht-wechselwirkenden Bosonen zu berechnen [175]. Dazu wird die Thermodynamik eines solchen Gases in einer zylindersymmetrischen Falle auf die statistische Mechanik so genannter *Permutationszykel* zurückgeführt, die schon in der Analyse früherer PIMC-Studien [39, 118, 151] eine wesentliche Rolle gespielt haben. Da hier das kanonische Ensemble verwendet wird, sind die Ergebnisse komplementär zu denen in [185] und zeigen klar den Unterschied zwischen kanonischem und großkanonischem Ensemble.

4.3.1 Permutationszykel im kanonischen Ensemble

In diesem Abschnitt sollen die erstmals von Feynman [65] in diesem Zusammenhang verwendeten Permutationszykel benutzt werden, um die thermodynamischen Eigenschaften eines idealen Bosegases in einem beliebigen äußeren Potential zu berechnen. Wie schon zuvor wird das kanonische Ensemble verwendet.

Betrachtet man N Teilchen im äußeren Potential $V(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$), so lautet der Hamiltonope-

rator für ein Teilchen wie üblich

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x}). \quad (4.38)$$

Mithilfe der Eigenwerte E_i und der Eigenfunktionen $|\phi_i\rangle$ kann \hat{H} in der Form

$$\hat{H} = \sum_i E_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (4.39)$$

geschrieben werden. Der gesamte Hamiltonoperator für alle N Teilchen ist dann durch die Summe $\hat{H}_N = \sum_{n=1}^N H^{(n)}$ gegeben.

Zunächst wird es darum gehen, die Zustandsdichte $Z_N(\beta)$ mittels Permutationszykeln zu berechnen, da aus ihr viele weitere Größen bestimmt werden können. Die Darstellung folgt dabei [65, Kap. 2.8].

Für ein Gas aus N Bosonen ist die Zustandssumme durch

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_n} \int d\mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, P\mathbf{R}, \beta), \quad \mathbf{R} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (4.40)$$

gegeben (vgl. Gl. (4.7)), dabei ist $\rho(\mathbf{R}, P\mathbf{R}, \beta) = \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}_N} | P\mathbf{R} \rangle$ ein Matrixelement des Propagators zwischen dem Punkt \mathbf{R} und dem permutierten Punkt $P\mathbf{R} = (\mathbf{r}_{P1}, \dots, \mathbf{r}_{PN})$.

Da der gesamte Hamiltonoperator \hat{H}_n in eine Summe der unabhängigen Einteilchen-Hamiltonoperatoren zerfällt, faktorisiert das Integral und man erhält

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_n} \int \prod_{n=1}^N d\mathbf{x}_n \rho_0(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{Pn}, \beta), \quad (4.41)$$

wobei $\rho_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{Pj}, \beta)$ der zu \hat{H} gehörende Propagator ist. Die Permutationen können in so genannte *Zykel* aufgebrochen werden, d.h. in Untermengen der Zahlen 1 bis N , die invariant sind unter der Wirkung der Permutation P . Abb. 4.4 veranschaulicht dies am Beispiel der Permutation $P = (123456) \rightarrow (245136)$ von $N = 6$ Teilchen. Die darin enthaltenen Zykel lauten $P = (124)(35)(6)$, d.h. P permutiert die Zahlen (124) in einem „3-Zykel“, das Paar (35) in einem 2-Zykel und (6) bildet einen 1-Zykel. Für eine beliebige Permutation P ergeben sich so

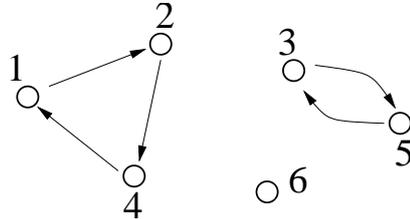


Abbildung 4.4: Zerlegung der Permutation $P = (123456) \rightarrow (245136)$ in Zykel.

C_q Zykel der Länge q , natürlich mit der Nebenbedingung $\sum_{q=1}^N qC_q = N$.

Das Produkt im Integranden in Gl.(4.41) kann nun so umgeordnet werden, dass alle Propagatoren $\rho_0(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{Pj})$ von Teilchen auf dem gleichen Zykel nebeneinander stehen. Da ein solcher

q -Zykel unabhängig von allen anderen ist, kann das Integral über die Positionen aller zu ihm gehörenden Teilchen ausgeführt werden:

$$h_q = \int \prod_{k=1}^q d\mathbf{x}_k \rho_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \rho_0(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) \cdots \rho_0(\mathbf{x}_q, \mathbf{x}_1). \quad (4.42)$$

Hier kann man den Trick von Gl. (4.6) umkehren: Jede Integration in Gl. (4.42) bis auf die über \mathbf{x}_1 kann als ein eingeschobener Operator $\mathbf{1} = \int d\mathbf{x}_k |\mathbf{x}_k\rangle\langle\mathbf{x}_k|$ zwischen den Exponentialoperatoren $e^{-\beta\hat{H}}$ aufgefaßt und somit weggelassen werden. Für h_q gilt somit

$$h_q = Z_1(q\beta), \quad (4.43)$$

d.h. h_q ist gleich der Zustandssumme für ein Teilchen bei der effektiven inversen Temperatur $q\beta$.

Da h_q für alle q -Zykel gleich ist, kann man $Z_N(\beta)$ als Summe über alle Kombinationen von „Zykel-Besetzungen“ C_1, \dots, C_N mit der Nebenbedingung $\sum_{q=1}^N qC_q = N$ schreiben

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\substack{C_1, \dots, C_N; \\ \sum_{q=1}^N qC_q = N}} M(C_1, \dots, C_N) \prod_{q=1}^N h_q^{C_q}. \quad (4.44)$$

Der Exponent C_q von h_q stammt dabei von den C_q verschiedenen q -Zykeln; $M(C_1, \dots, C_N)$ ist die Zahl der Permutationen mit C_1 1-Zykeln, C_2 2-Zykeln usw. Diese Zahl ist durch

$$M(C_1, \dots, C_N) = \frac{N!}{\prod_q C_q! q^{C_q}} \quad (4.45)$$

gegeben [65, siehe Gl. (2.154)], sodass man schlussendlich mit Gl. (4.43) für $Z_N(\beta)$ die Form

$$Z_N(\beta) = \sum_{\substack{C_1, \dots, C_N; \\ \sum_{q=1}^N qC_q = N}} \prod_q \frac{Z_1(q\beta)^{C_q}}{C_q! q^{C_q}} \quad (4.46)$$

erhält.

Als eine erste Anwendung dieser Gleichung soll nun die Besetzungszahl $\langle N_i \rangle$ des Einteilchenzustandes $|\phi_i\rangle$ im Zykelformalismus berechnet werden. Umschreiben der Zustandssumme mittels der Eigenzustände des Hamiltonoperators \hat{H} führt zu

$$Z_N(\beta) = \sum_{\substack{N_1, N_2, \dots; \\ \sum N_i = N}} \prod_{i=0}^{\infty} e^{-\beta N_i E_i}. \quad (4.47)$$

Durch Ableiten nach βE_i erhält man einen Ausdruck für $\langle N_i \rangle$ (vgl. z.B. [199]):

$$\langle N_i \rangle = -\frac{1}{Z_N(\beta)} \frac{\partial Z_N(\beta)}{\partial \beta E_i}. \quad (4.48)$$

Unter Verwendung von $Z_1(q\beta) = \sum_i e^{-q\beta E_i}$ und Gl. (4.46) ergibt sich schließlich die Formel

$$\langle N_i \rangle = \sum_{q=1}^N \frac{e^{-q\beta E_i}}{Z_1(q\beta)} \langle qC_q \rangle \quad (4.49)$$

für den Erwartungswert der Besetzung des Zustands $|\phi_i\rangle$. Zur Berechnung von $\langle N_i \rangle$ ist daher die Kenntnis der Zykelbesetzung $\langle C_q \rangle$ – also der mittleren Anzahl von q -Zykeln – notwendig.

Zykelbesetzungszahlen $\langle C_q \rangle$

Die mittlere Anzahl von Zykeln der Länge q (auch Zykelbesetzungszahl) $\langle C_q \rangle$ ist in offensichtlicher Weise durch

$$\langle C_q \rangle = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\substack{C_1, \dots, C_N; \\ \sum_{r=1}^N r C_r = N}} \prod_{r=1}^N \frac{Z_1(r\beta)^{C_r}}{C_r! r^{C_r}} C_q \quad (4.50)$$

definiert; in dieser Form tritt $\langle C_q \rangle$ auch in Gl. (4.49) auf.

Um diesen Ausdruck auszurechnen, wird das Produkt in Gl. (4.50) in die Faktoren mit $r \neq q$ und den Faktor mit $r = q$ aufgespalten. Da Summanden mit $C_q = 0$ nicht beitragen, gilt dann

$$\langle C_q \rangle = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\substack{C_1, \dots, C_N; \\ \sum_{r=1}^N r C_r = N}} \prod_{r=1, r \neq q}^N \frac{Z_1(r\beta)^{C_r}}{C_r! r^{C_r}} \cdot \frac{Z_1(q\beta)^{C_q-1}}{(C_q-1)! q^{C_q-1}} \frac{Z_1(q\beta)}{q}. \quad (4.51)$$

Wegen $C_q > 0$ kann $C_q - 1$ durch C_q substituiert werden, die Summe über C_q läuft dann wieder von $C_q = 0$ bis ∞ . Das bedeutet aber, dass eigentlich ein q -Zykel weniger vorhanden ist, die Nebenbedingung ändert sich demgemäß zu $\sum_r r C_r = N - q$. Mit dieser Erkenntnis erhält man einen schönen Ausdruck für die Zykelbesetzungszahl:

$$\langle C_q \rangle = \frac{Z_{N-q}(\beta)}{Z_N(\beta)} \frac{Z_1(q\beta)}{q}. \quad (4.52)$$

Gl. (4.52) führt übrigens zusammen mit der Nebenbedingung $\sum_{q=1}^N \langle q C_q \rangle = N$ direkt zur Rekursionsrelation von Wilkens und Weiss [199]:

$$N = \sum_{q=1}^N \frac{Z_{N-q}(\beta)}{Z_N(\beta)} Z_1(q\beta). \quad (4.53)$$

Diese Relation wird später zur Berechnung der Zustandssummen $Z_{N-q}(\beta)$ verwendet werden, die in Gl. (4.52) eingehen.

Als eine weitere Anwendung von Gl. (4.52) kann nun die Besetzung der Einteilchenzustände Gl. (4.49) mittels Zustandssummen ausgedrückt werden

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{q=1}^N e^{-q\beta E_i} Z_{N-q}(\beta). \quad (4.54)$$

Dieser Ausdruck wurde auf ganz anderem Wege schon früher gefunden [199].

4.3.2 Suprafluidität in einer harmonischen Falle

In diesem Kapitel soll nun der suprafluide Anteil ρ_s/ρ eines Gases aus nichtwechselwirkenden Bosonen in einer harmonischen Falle bestimmt werden. Dazu werden die im letzten Abschnitt eingeführten Permutationszykel verwendet.

Der suprafluide Anteil wird für eine rotationssymmetrische Anordnung über die lineare Antwort auf infinitesimale Rotationen definiert, ganz analog zum gewöhnlichen Fall mit Translationssymmetrie [39, 123]. Der suprafluide Anteil trägt zwar mit seiner Dichteverteilung zum

klassischen Trägheitsmoment I_{class} des gesamten Gases bei, er reagiert allerdings nicht auf Drehungen des gesamten Gases und hat damit keinen Anteil am korrekt durch quantenmechanische Überlegungen bestimmten Trägheitsmoment I_{qm} . Definiert man den normalfluiden Anteil als den Quotienten aus quantenmechanischem und klassischem Trägheitsmoment um die Symmetrieachse (z -Achse)

$$\frac{\rho_n}{\rho} = \frac{I_{\text{qm}}}{I_{\text{class}}}, \quad (4.55)$$

so gilt für den suprafluiden Anteil

$$\frac{\rho_s}{\rho} = 1 - \frac{\rho_n}{\rho}. \quad (4.56)$$

I_{qm} kann über die lineare Antwort des Bosegases auf Rotationen berechnet werden [39], man erhält so die Beziehung

$$I_{\text{qm}} = \beta (\langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2) \quad (4.57)$$

oder

$$I_{\text{qm}} = \beta \langle L_z^2 \rangle, \quad (4.58)$$

da hier nur nicht-rotierende Gase betrachtet werden mit $\langle L_z \rangle = 0$. Das klassische Trägheitsmoment wird wie üblich bestimmt:

$$I_{\text{class}} = m \sum_{j=1}^N \langle (x_j^2 + y_j^2) \rangle. \quad (4.59)$$

Die Größen in den Gl. (4.58) und (4.59) sollen nun mithilfe der Permutationszykel aus dem vorherigen Kapitel berechnet werden. Dabei soll eine harmonische Falle mit Rotationsymmetrie um die z -Achse betrachtet werden, die durch den Einteilchen-Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m \left(\omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_{\parallel}^2 z^2 \right) \quad (4.60)$$

beschrieben wird. Die zugehörigen Eigenfunktionen werden durch die drei Quantenzahlen $n_r = 0, 1, 2, \dots$, $m_z = 0, \pm 1, \dots$, $n_z = 0, 1, \dots$ klassifiziert mit den Eigenwerten

$$\hat{H} |n_r, m_z, n_z\rangle = \{ \hbar \omega_{\perp} (2n_r + |m_z| + 1) + \hbar \omega_{\parallel} (n_z + 1/2) \} |n_r, m_z, n_z\rangle; \quad (4.61)$$

sie sind gleichzeitig Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators um die z -Achse

$$\hat{l}_z |n_r, m_z, n_z\rangle = m_z \hbar |n_r, m_z, n_z\rangle. \quad (4.62)$$

Der gesamte Drehimpuls ist dann durch die Summe über die Drehimpulsoperatoren aller N Teilchen gegeben

$$\hat{L}_z = \sum_{n=1}^N \hat{l}_z^{(n)}. \quad (4.63)$$

Zunächst soll $\langle \hat{L}_z^2 \rangle$ berechnet werden. Statt der Integrale über Teilchenkoordinaten wie in Gl. (4.40) wird hier eine Summation über die Basiszustände aus Gl. (4.61) zur Berechnung des Erwartungswerts von \hat{L}_z^2 verwendet ($i_j = (n_{r,j}, m_{z,j}, n_{z,j})$ bezeichnet im Folgenden den Zustand des j -ten Teilchens):

$$\langle \hat{L}_z^2 \rangle = \frac{1}{Z_N N!} \sum_{P \in S_N} \sum_{i_1, \dots, i_N} \langle i_1, \dots, i_N | \sum_{j,k=1}^N \hat{l}_z^{(j)} \hat{l}_z^{(k)} e^{-\beta \hat{H}_N} | i_{P1}, \dots, i_{PN} \rangle. \quad (4.64)$$

Das Matrixelement in diesem Ausdruck lässt sich wieder in ein Produkt aus Matrixelementen für einzelne Teilchen faktorisieren, diese sind entweder von der Form $\langle i_j | e^{-\beta \hat{H}^{(j)}} | i_{Pj} \rangle = e^{-\beta E_{i_j}} \delta_{i_j, i_{Pj}}$ oder $\langle i_j | \hat{l}_z^{(j)} e^{-\beta \hat{H}^{(j)}} | i_{Pj} \rangle = \hbar m_{z,j} e^{-\beta E_{i_j}} \delta_{i_j, i_{Pj}}$ oder $\langle i_j | \hat{l}_z^{(j)} \hat{l}_z^{(j)} e^{-\beta \hat{H}^{(j)}} | i_{Pj} \rangle = (\hbar m_{z,j})^2 e^{-\beta E_{i_j}} \delta_{i_j, i_{Pj}}$.

Wenn man nun in Gl. (4.64) die Summe über alle Permutationen als eine Summe über alle Zykelpbesetzungen (vgl. Gl. (4.46)) ausdrückt, so folgt aufgrund der Kronecker- δ s in den Faktoren, dass alle Teilchen auf dem gleichen q -Zykel den selben Zustand besitzen. Für einen speziellen q -Zykel gibt es wieder drei verschiedene Möglichkeiten: Wenn keiner der zu einem Teilchen auf dem Zykel gehörenden Drehimpulsoperatoren $\hat{l}_z^{(j)}$ in dem zum Zykel gehörenden Produkt vorliegt, dann liefert der Zykel den Beitrag

$$\sum_{i_j} e^{-q\beta E_{i_j}} = Z_1(q\beta) \quad (4.65)$$

zu Gl. (4.64) (vgl. Gl. (4.42)). Wenn nur ein Operator $\hat{l}_z^{(j)}$ auftaucht, verschwindet der Beitrag des Zyklus aus Symmetriegründen ($E_{n_r, m_z, n_z} = E_{n_r, -m_z, n_z}$):

$$\sum_{i_j} \hbar m_{z,j} e^{-q\beta E_{i_j}} = 0. \quad (4.66)$$

Als dritte Möglichkeit können auch zwei Drehimpulsoperatoren vorliegen, die auf zwei Teilchen des q -Zykels wirken. Dann lautet der Beitrag zu Gl. (4.64)

$$\sum_{i_j} (\hbar m_{z,j})^2 e^{-q\beta E_{i_j}} = \frac{2\hbar^2 e^{-q\beta \hbar \omega_\perp}}{(1 - e^{-q\beta \hbar \omega_\perp})^2} Z_1(q\beta). \quad (4.67)$$

Wie man sieht, trägt also jeder q -Zykel einen Faktor $Z_1(q\beta)$ bei; die Zykeln, denen zwei Drehimpulsoperatoren zugeordnet sind, liefern zusätzlich noch den Faktor $\frac{2\hbar^2 e^{-q\beta \hbar \omega_\perp}}{(1 - e^{-q\beta \hbar \omega_\perp})^2}$. Nun muss

man noch abzählen, auf wieviele Arten die zwei \hat{l}_z -Operatoren auf die Zykeln verteilt werden können: Bei einer gegebenen Anzahl C_q von q -Zykeln gibt es qC_q Teilchen, die auf diesen Zykeln sitzen. Diese kann man mit q anderen Teilchen (auch mit ihnen selbst) paaren, sodass es $q^2 C_q$ Wege gibt, die zwei Drehimpulsoperatoren auf den q -Zykeln zu verteilen. Summation über die Zykellänge q anstatt über die Paarindizes j, k ergibt

$$\langle \hat{L}_z^2 \rangle = \frac{1}{Z_N N!} \sum_{\substack{C_1, \dots, C_N; \\ \sum_{q=1}^N qC_q = N}} M(C_r) \sum_{q=1}^N \frac{2\hbar^2 e^{-q\beta \hbar \omega_\perp}}{(1 - e^{-q\beta \hbar \omega_\perp})^2} q^2 C_q \prod_{r=1}^N Z_1(r\beta)^{C_r}, \quad (4.68)$$

oder unter Verwendung von Gl. (4.45), (4.50) und (4.58)

$$I_{\text{qm}} = \beta \langle L_z^2 \rangle = 2\hbar^2 \sum_{q=1}^N \frac{q\beta e^{-q\beta\hbar\omega_\perp}}{(1 - e^{-q\beta\hbar\omega_\perp})^2} \langle qC_q \rangle. \quad (4.69)$$

Auf diese Art kann also das Trägheitsmoment mithilfe der Zykelbesetzungszahlen aus Gl. (4.52) berechnet werden.

In analoger Weise lässt sich auch das klassische Trägheitsmoment bestimmen. Dabei tauchen dann Terme der Form

$$\sum_{i_j} \langle i_j | (x_j^2 + y_j^2) e^{-q\beta\hat{H}} | i_j \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_\perp} \frac{1 + e^{-q\beta\hbar\omega_\perp}}{1 - e^{-q\beta\hbar\omega_\perp}} Z_1(q\beta) \quad (4.70)$$

auf, ganz ähnlich wie in Gl. (4.67). Schlussendlich gibt es auch für I_{class} eine Form, in welche die Zykelbesetzungszahlen eingehen:

$$I_{\text{class}} = \frac{\hbar}{\omega_\perp} \sum_{q=1}^N \frac{1 + e^{-q\beta\hbar\omega_\perp}}{1 - e^{-q\beta\hbar\omega_\perp}} \langle qC_q \rangle. \quad (4.71)$$

Gl. (4.69) und (4.71) stellen das wesentliche Ergebnis dieses Abschnitts dar, sie erlauben die Berechnung des suprafluiden Anteils aus den Gl. (4.56), (4.55) allein unter Verwendung der Zykelbesetzungszahlen aus Gl. (4.52).

Es gibt übrigens noch einen ganz anderen Weg, um zu Gl. (4.69) zu gelangen: In [185] gibt Stringari eine Formel für das Trägheitsmoment in einer asymmetrischen Falle mit Frequenzen $\omega_x \neq \omega_y$ an, die aus allgemeinen algebraischen Betrachtungen resultiert:

$$I_{\text{qm}} = \frac{mN}{\omega_x^2 - \omega_y^2} \{ [\langle y^2 \rangle - \langle x^2 \rangle] [\omega_x^2 + \omega_y^2] + 2 [\omega_y^2 \langle y^2 \rangle - \omega_x^2 \langle x^2 \rangle] \}. \quad (4.72)$$

Berechnet man nun wie weiter oben die Erwartungswerte $\langle x^2 \rangle$ bzw. $\langle y^2 \rangle$, so ergibt sich

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2mN\omega_x} \sum_{q=1}^N \frac{1 + e^{-q\beta\hbar\omega_x}}{1 - e^{-q\beta\hbar\omega_x}} \langle qC_q \rangle, \quad (4.73)$$

also eine Verallgemeinerung von Gl. (4.71) auf asymmetrische Fallen. Durch Einsetzen in Gl. (4.72) lässt sich auch für solche Fallen das quantenmechanische Trägheitsmoment auf die Zykelbesetzungszahlen zurückführen. Wenn man den Limes $\omega_x = \omega_y = \omega_\perp$ dieses Ausdrucks genau analysiert, so erkennt man letztlich, dass er tatsächlich mit Gl. (4.69) übereinstimmt.

4.3.3 Numerische Ergebnisse und Vergleich mit PIMC

Die Ergebnisse des letzten Kapitels sollen nun mit Resultaten, die mit anderen Methoden gewonnen wurden, verglichen werden.

In Abb. 4.5 ist der suprafluide Anteil als Funktion der Temperatur für $N = 25$ bzw. $N = 100$ Teilchen in einer sphärisch symmetrischen Falle aufgetragen. Die auf Zykelrechnungen basierenden Daten wurden unter Verwendung der Gl. (4.56, 4.55, 4.69, 4.71) berechnet; $\langle qC_q \rangle$ wurde aus der Rekursionsrelation (4.53) für die Zustandssummen $Z_N(\beta)$ bestimmt. Zuerst sollen

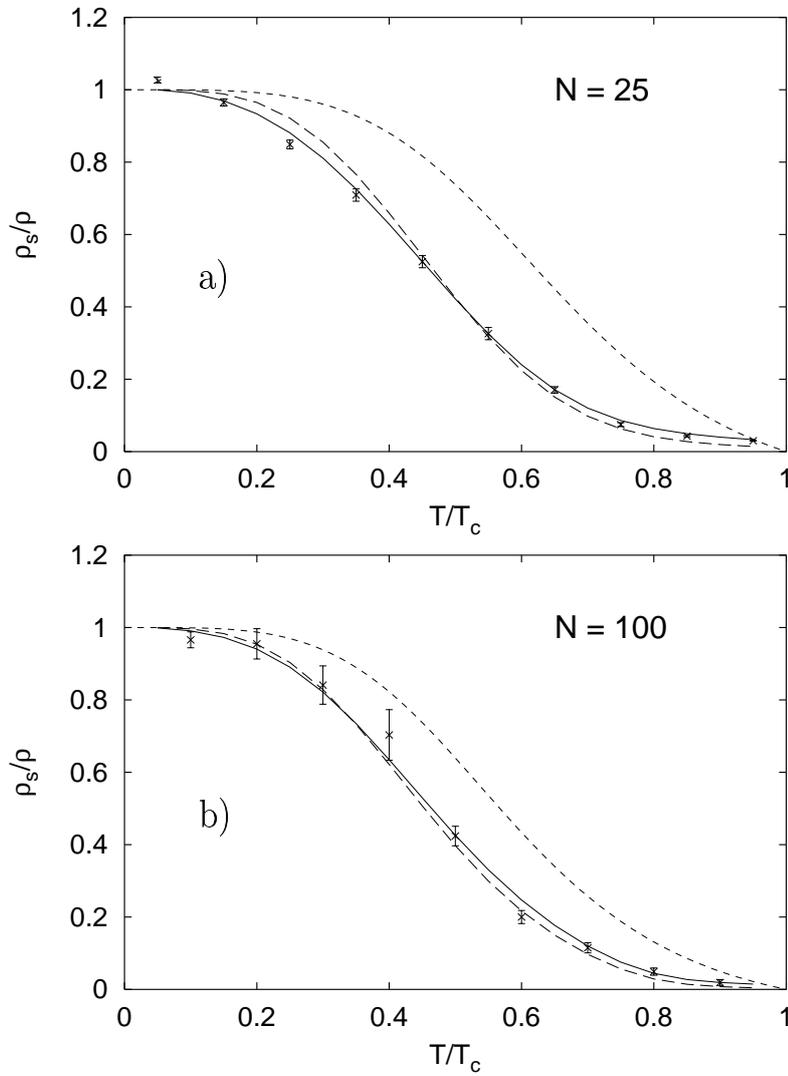


Abbildung 4.5: Superfluide Dichte für (a) $N = 25$ bzw. (b) $N = 100$ Teilchen in einer sphärisch symmetrischen harmonischen Falle als Funktion der Temperatur (T_c ist die kritische Temperatur für Bose-Einstein-Kondensation). Die Resultate aus den Zykelrechnungen sind mit der durchgezogenen Linie gekennzeichnet; die kurz gestrichelte Kurve basiert auf Stringaris Rechnungen im großkanonischen Ensemble [185]. Die lang gestrichelte Kurve wurde mit einem modifizierten Zwei-Flüssigkeiten-Modell berechnet (Gl. (4.77)). Die Datenpunkte mit Fehlerbalken stammen aus einer PIMC-Simulation (vgl. Gl. (4.78)).

die Zykelresultate mit den Ergebnissen von Stringari [185] verglichen werden, der basierend auf Betrachtungen im großkanonischen Ensemble eine Formel für ρ_s/ρ angegeben hat.

Der Unterschied zwischen den kanonischen (Zykel) und großkanonischen Werten ist sowohl für 25 als auch für 100 Teilchen deutlich zu sehen. Man erkennt aber schon aus diesen beiden Beispielen, dass die Differenz zwischen den Ergebnissen im Limes $N \rightarrow \infty$ verschwinden wird.

Zum Vergleich kann der suprafluide Anteil auch im Rahmen des in Kapitel 4.2.3 diskutierten Zwei-Flüssigkeiten-Modell berechnet werden. Nimmt man also an, dass der suprafluide Anteil des Bosegases mit dem Bose-Einstein-Kondensat identisch ist, so kann ρ_s/ρ berechnet werden, wenn die Anzahl $\langle N_0 \rangle$ der Kondensatotope bekannt ist. Diese erhält man z.B. mit Gl. (4.49) aus den Zykelbesetzungen:

$$\langle N_0 \rangle = \sum_{q=1}^N \left(1 - e^{-q\beta\hbar\omega_{\perp}}\right)^2 \left(1 - e^{-q\beta\hbar\omega_{\parallel}}\right) \langle qC_q \rangle. \quad (4.74)$$

Zur Berechnung von ρ_s/ρ werden außerdem das Trägheitsmoment I_0 des Kondensats und das Trägheitsmoment I_{nk} des nicht-kondensierten Gasanteils benötigt. Alle Kondensatotope halten sich im Fallengrundzustand auf, dessen Trägheitsmoment lässt sich leicht aus der Dichte ausrechnen und beträgt $\hbar\omega_{\perp}$. Somit gilt für I_0

$$I_0 = \langle N_0 \rangle \frac{\hbar}{\omega_{\perp}}. \quad (4.75)$$

I_{nk} kann unter der Annahme, dass sich die nicht-kondensierten Atome wie ein klassisches Boltzmann-Gas verhalten, bestimmt werden. Das Trägheitsmoment für ein Teilchen lautet dann $2/(\beta\omega_{\perp}^2)$, damit gilt

$$I_{\text{nk}} = N_{\text{nk}} \frac{2}{\beta\omega_{\perp}^2} = N_{\text{nk}} \frac{2kT}{\omega_{\perp}^2} \quad (4.76)$$

mit $N_{\text{nk}} = N - \langle N_0 \rangle$.

Da das Kondensat bei Drehungen in Ruhe bleibt, trägt es nur zum klassischen, nicht aber zum quantenmechanischen Trägheitsmoment bei. Daher ergibt sich für ρ_s/ρ

$$\frac{\rho_s}{\rho} \approx 1 - \frac{I_{\text{nc}}}{I_0 + I_{\text{nc}}} = \frac{1}{1 + \frac{N - \langle N_0 \rangle}{\langle N_0 \rangle} \frac{2kT}{\hbar\omega_{\perp}}}. \quad (4.77)$$

Abb. 4.5 zeigt, dass diese Funktion (lang gestrichelt) sehr gut zu den exakten Resultaten aus dem kanonischen Ensemble passt; die Unterschiede basieren vor allem auf dem Unterschied zwischen dem wahren nicht-kondensierten Anteil und dessen quasi-klassischer Näherung als Boltzmann-Gas.

Ein weitere Möglichkeit, den suprafluiden Anteil zu bestimmen, basiert auf der Verwendung eines Pfadintegral-Monte-Carlo-Verfahrens (vgl. Kapitel 4.2). Dieser Zugang ist auf ideale und wechselwirkende Bosegase gleichermaßen anwendbar und soll hier kurz erläutert werden.

Zur Berechnung des suprafluiden Anteils mittels einer PIMC-Simulation gibt es mehrere Methoden [39]. Für die in dieser Arbeit untersuchten harmonischen Fallen, die im Gegensatz zu

den in der Vielteilchen-Theorie normalerweise untersuchten Modellen keine Translationssymmetrie besitzen, ist die so genannte „Area Formula“ [39, 178] am geeignetsten, da sie explizit für endliche System eingeführt wurde. ρ_s/ρ wird mittels

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{4m^2 \langle A_z^2 \rangle}{\hbar^2 \beta \langle I_z \rangle} \quad (4.78)$$

berechnet. Dabei ist

$$I_z = \frac{m}{M} \sum_{t=0}^{M-1} \sum_{k=1}^N (x_k(t)x_k(t+1) + y_k(t)y_k(t+1)) \quad (4.79)$$

eine PIMC-Observable für das klassische Trägheitsmoment für Drehungen um die z -Achse, m bezeichnet die Teilchenmasse. $x_n(t)$ und $y_n(t)$ stehen für die x - und y -Koordinaten des n -ten Teilchens auf der Zeitscheibe t der PIMC-Simulation³; es gibt insgesamt M solcher Zeitscheiben. I_z konvergiert für $M \rightarrow \infty$ gegen I_{class} , wie man dies für eine PIMC-Observable erwartet. Der Ausdruck

$$A_z = \frac{1}{2} \sum_{t=0}^{M-1} \sum_{k=1}^N (x_k(t)y_k(t+1) - y_k(t)x_k(t+1)) \quad (4.80)$$

entspricht der auf die x - y -Ebene projizierten Fläche, die ein Teilchen entlang seiner „Weltlinie“ von $t = 0$ bis $t = M - 1$ umfährt. Man erhält Gl. (4.78), wenn man die auf den Gl. (4.56)–(4.59) basierende Definition des suprafluiden Anteils in die Sprache der Pfadintegrale übersetzt [39]. Die Datenpunkte in Abb. 4.5 wurden durch eine PIMC-Simulation mit den in Kap. 4.2 beschriebenen Methoden gewonnen. Dazu wurden Erwartungswerte von I_z und A_z^2 berechnet, der statistische Fehler des suprafluiden Anteils in Gl. (4.78) musste dabei mithilfe des Jackknife-Verfahrens ermittelt werden, da ρ_s/ρ eine Funktion zweier Erwartungswerte ist, deren statistische Korrelation nicht bekannt ist.

Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, stehen alle drei verwendeten Methoden in guter Übereinstimmung miteinander. Für die Zykel- und PIMC-Resultate muss dies sogar so sein, da beide Methoden potentiell exakte Ergebnisse für das kanonische Ensemble liefern. Die Übereinstimmung des Zwei-Flüssigkeiten-Modells mit diesen exakten Daten zeigt, dass die modellhafte Vorstellung eines aus einer suprafluiden und einer normalfluiden Phase zusammengesetzten Bosegases sehr gut mit der Realität übereinstimmt.

4.4 Neuere Entwicklungen

Die suprafluiden Eigenschaften von ultrakalten Bosegasen werden zur Zeit von vielen Gruppen theoretisch und experimentell untersucht. Die in diesem Kapitel erzielten Ergebnisse stellen einen weiteren Ansatz dar, diese Eigenschaften nicht nur in idealen, sondern auch in wechselwirkenden Bosegasen theoretisch zu untersuchen. So wird z.B. die Richtigkeit der Berechnung der Kondensatbesetzung mit PIMC-Simulationen bei wechselwirkenden Gasen, die auf der Analyse der Permutationszykel basiert, noch diskutiert [118, 143]. In [151] wurde im Rahmen einer Simulation des Verhaltens von magnetischen Vortizes in zweidimensionalen Supraleitern,

³Vgl. mit $x_{k,d}(t)$ in Gl. (4.32); $x_{k,1}(t)$ entspricht hier $x_k(t)$, $x_{k,2}$ entspricht $y_k(t)$.

die sich isomorph auf die Weltlinien einer PIMC-Simulation mit zwei Raumdimensionen abbilden lassen, festgestellt, dass die Suprafluidität proportional zur Anzahl der q -Zykel mit $q > 1$ ist. Die Beziehung zwischen den beiden Größen konnte bisher nicht theoretisch geklärt werden, die Zykel-Rechnungen der vorangegangenen Abschnitte könnten sich auf dieses Problem übertragen lassen.

Schlussendlich ist es natürlich von großem Interesse, den suprafluiden Anteil in einem wechselwirkenden Bosegas mittels PIMC-Methoden zu berechnen. Erste Schritte in diese Richtung wurden in [86] für ein zweidimensionales Gas in einer harmonischen Falle gemacht. Dieses System ist interessant, weil in homogenen, zweidimensionalen Gasen gerade keine Bose-Einstein-Kondensation auftritt, sondern der in Kapitel 1.4.1 diskutierte Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang vorliegt, bei dem der suprafluide Anteil unterhalb der kritischen Temperatur sprunghaft ansteigt. Wie sich die Eigenschaften eines realen Bosegases in einer quasi-zweidimensionalen Falle ändern und ob auch in einer harmonischen Falle ein KT-Übergang auftritt, wurde z.B. in [159] untersucht und könnte mit PIMC-Simulationen sehr genau analysiert werden.

Ausblick

In den fünf Jahren seit der erstmaligen Realisierung eines Bose-Einstein-Kondensats in schwach wechselwirkenden atomaren Gasen wurde eine Vielzahl von Fragestellungen, die auf älteren theoretischen Arbeiten basieren, neu untersucht und sowohl theoretisch als auch experimentell geklärt. Aus diesen Studien ist eine weiterentwickelte Theorie der inhomogenen ultrakalten Bosegase erwachsen, die an vielen Stellen mit den experimentellen Daten in hervorragender Übereinstimmung steht. Lediglich für Temperaturen knapp unterhalb der kritischen Temperatur, also bei kleinem Kondensatanteil, gibt es noch keine befriedigende theoretische Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften. Des Weiteren wurde die Dynamik des Kondensationsvorgangs selbst bisher nur wenig untersucht. Weder gibt es eingehende experimentelle Studien über die Entstehung von Kohärenz in Bosegasen, noch konnte ein geschlossenes theoretisches Modell für diesen Prozess entwickelt werden. Die mit der Realisierung von Atomlasern zur Verfügung stehenden kohärenten Materiewellen eröffnen hier für die nahe Zukunft eine Möglichkeit, diesen Fragenkomplex experimentell mittels Interferenzexperimenten zu untersuchen.

Weitere grundsätzliche Problemstellungen, die bei atomaren Bosegasen erst seit kurzem untersucht werden, betreffen den weiten Bereich suprafluider Effekte mit einer Fülle von Phänomenen, die beim flüssigen Helium sehr eingehend studiert wurden. So gelang es erst 1999, quantisierte Vortizes in Rubidium-Kondensaten zu erzeugen und deren Drehimpuls zu bestimmen. Das Studium der Rotationseigenschaften und der Suprafluidität in kondensierten Bosegasen ist ein noch junges Feld, die Ergebnisse aus Kapitel 4 sind ein kleiner Beitrag zu diesem schnell wachsenden Gebiet.

Aus Sicht der Quantenoptik stellen die sich abzeichnenden Möglichkeiten für die kohärente Atomoptik den wohl interessantesten Aspekt der Bose-Einstein-Kondensation atomarer Bosegase dar. Kohärente Atomstrahlen aus Atomlasern haben das Potenzial, die Genauigkeit von Atominterferometern und Atomuhren zu verbessern. Da die de Broglie-Wellenlängen von Atomen in solchen Materiewellen sehr klein sind und gut kontrolliert werden können, sollte es möglich sein, mit atomlithographischen Methoden Strukturen im Nanometerbereich zu erzeugen. Für solche Experimente müssen allerdings nicht nur Atomlaser mit größeren atomaren Flussstärken entwickelt werden, es ist auch notwendig, kohärent arbeitende atomoptische Elemente wie Spiegel oder Strahlteiler zu realisieren, um die Atomstrahlen manipulieren zu können. In dieser Richtung gibt es erste vielversprechende Ansätze. Wurde „früher“ kohärentes Laserlicht mit Materie manipuliert, so geht man jetzt den umgekehrten Weg und manipuliert kohärente Materiewellen mit elektromagnetischen Feldern; ein Beispiel hierfür ist die Verstärkung einer Materiewelle mithilfe eines stimulierten Ramanübergangs.

In die gleiche Richtung weisen auch die ganz neuen Experimente zur kontrollierten Erzeugung von Molekülen aus Bose-Einstein-Kondensaten. Bisher hat man zwar nur geringe Mengen von Dimeren bilden können, es sollte jedoch auch möglich sein, ganze Bose-Einstein-Kondensate

aus Molekülen zu realisieren. Dann wären sogar „Moleküllaser“ denkbar, als Analogon zu den schon existierenden Atomlasern. Es gibt darüber hinaus bereits erste Ansätze, *quantum control*-Methoden, die im Grenzbereich zwischen Physik und Chemie zur Kontrolle von Reaktionen mit Lasern entwickelt wurden, auch bei der Manipulation ultrakalter Moleküle einzusetzen.

Literatur

- [1] Die BEC-Homepage <http://amo.phy.gasou.edu/bec.html> an der Georgia Southern University enthält eine große Liste an im WWW verfügbarer Literatur zum Thema Bose-Einstein-Kodensation.
- [2] M. Abramowitz und I. A. Stegun (Hrsg.), *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, Washington (1964), Kap. 10.4.
- [3] J. F. Allen und A. D. Misener, *Nature* **141**, 75 (1938).
- [4] M. Amoruso, A. Minguzzi, S. Stringari, M. P. Tosi und L. Vichi, *Temperature-dependent density profiles of trapped boson-fermion mixtures*, *Euro. Phys. J. D* **4**, 261 (1998).
- [5] B. P. Anderson und M. A. Kasevich, *Macroscopic quantum interference from atomic tunnel arrays*, *Science* **282**, 1686 (1998).
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, *Science* **269**, 198 (1995).
- [7] P. W. Anderson, *Considerations on the flow of superfluid Helium*, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 298 (1966).
- [8] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Observation of interference between two Bose condensates*, *Science* **275**, 637 (1997).
- [9] V. Bagnato und D. Kleppner, *Bose-Einstein condensation in low-dimensional traps*, *Phys. Rev. A* **44**, 7439 (1991).
- [10] V. Bagnato, D. E. Pritchard und D. Kleppner, *Bose-Einstein condensation in an external potential*, *Phys. Rev. A* **45**, 4354 (1987).
- [11] R. J. Ballagh, K. Burnett und T. F. Scott, *Theory of an output coupler for Bose-Einstein condensed atoms*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1607 (1997).
- [12] Y. B. Band, P. S. Julienne und M. Trippenbach, *Radio-frequency output coupling of the Bose-Einstein condensate for atom lasers*, *Phys. Rev. A* **59**, 3823 (1999).
- [13] A. D. Bandrauk und H. Shen, *Exponential split operator methods for solving coupled time-dependent Schrödinger equations*, *Journal of Chemical Physics* **99**, 1185 (1993).
- [14] M. A. Baranov, *Single-particle excitations and the order parameter for a trapped superfluid Fermi gas*, *Sov. Phys. JETP Lett.* **70**, 396 (1999).

- [15] M. A. Baranov und D. S. Petrov, *Low energy collective excitations in a superfluid trapped Fermi gas*, Phys. Rev. A **62**, 041601 (2000).
- [16] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer, *Theory of superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [17] V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1971).
- [18] S. Bhongale und M. Holland, *Loading a continuous-wave atom laser by optical pumping techniques*, Phys. Rev. A **62**, 043604 (2000).
- [19] K. Binder und D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer, Heidelberg (1988).
- [20] D. J. Bishop und J. D. Reppy, *Study of superfluid transition in 2-dimensional He-4 films*, Phys. Rev. Lett. **40**, 1727 (1978).
- [21] J. P. Blaizot und G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, MIT Press, Cambridge (1986).
- [22] I. Bloch, *Atomlaser und Phasenkohärenz atomarer Bose-Einstein-Kondensate*, Dissertation, Universität München (2000).
- [23] I. Bloch, T. W. Hänsch und T. Esslinger, *Atom laser with a cw output coupler*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3008 (1999).
- [24] I. Bloch, T. W. Hänsch und T. Esslinger, *Measurement of the spatial coherence of a trapped Bose gas at the phase transition*, Nature **403**, 166 (2000).
- [25] N. N. Bogoliubov, *On the theory of superfluidity*, J. Phys. U.S.S.R. **11**, 23 (1947).
- [26] K. Bongs, S. Burger, G. Birkl, K. Sengstock, W. Ertmer, K. Rzążewski, A. Sanpera und M. Lewenstein, *Coherent evolution of bouncing Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **83**, 3577 (1999).
- [27] S. N. Bose, *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Z. Phys. **26**, 178 (1924).
- [28] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett und R. G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [29] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett und R. G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995), *ibid.* **79**, 1170 (1997).
- [30] F. Brosens, J. T. Devreese und L. F. Lemmens, *Rotational properties of trapped bosons*, Phys. Rev. A **55**, 2453 (1997).
- [31] G. Bruun, Y. Castin, R. Dum und K. Burnett, *BCS theory for trapped ultracold fermions*, Euro. Phys. J. D **7**, 433 (1999).
- [32] G. M. Bruun und K. Burnett, *Interacting Fermi gas in a harmonic trap*, Phys. Rev. A **58**, 2427 (1998).

- [33] G. M. Bruun und C. W. Clark, *Hydrodynamic excitations of trapped Fermi gases*, Phys. Rev. Lett. **83**, 5415 (1999).
- [34] T. Busch, J. R. Anglin, J. I. Cirac und P. Zoller, *Inhibition of spontaneous emission in Fermi gases*, Europhys. Lett. **44**, 1 (1998).
- [35] D. A. Butts und D. S. Rokhsar, *Trapped Fermi gases*, Phys. Rev. A **55**, 4346 (1997).
- [36] J. Cao und B. J. Berné, *A new quantum propagator for hard spheres and cavity systems*, J. Chem. Phys. **97**, 2382 (1992).
- [37] Y. Castin und J. Dalibard, *Relative phase of two Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **55**, 4330 (1997).
- [38] F. S. Cataliotti, E. A. Cornell, C. Fort, M. Inguscio, F. Marin, M. Prevedelli, L. Ricci und G. M. Tino, *Magneto-optical trapping of Fermionic potassium atoms*, Phys. Rev. A **57**, 1136 (1998).
- [39] D. M. Ceperley, *Path integrals in the theory of condensed helium*, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
- [40] D. M. Ceperley und E. L. Pollock, *Path-integral computation of the low-temperature properties of liquid ^4He* , Phys. Rev. Lett. **56**, 351 (1986).
- [41] S. Choi, Y. Japha und K. Burnett, *Adiabatic output coupling of a Bose gas at finite temperatures*, Phys. Rev. A **61**, 063606 (2000).
- [42] J. I. Cirac, C. W. Gardiner, M. Naraschewski und P. Zoller, *Continuous observation of interference fringes from Bose condensates*, Phys. Rev. A **54**, 3714 (1996).
- [43] E. A. Cornell, J. R. Ensher und C. E. Wieman, *Experiments in dilute atomic Bose-Einstein condensation*, in: M. Inguscio, S. Stringari und C. Wieman (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, The International School of Physics „Enrico Fermi“, IOS Press, Amsterdam (1999).
- [44] F. Dalfovo, S. Giorgini, M. Guilleumas, L. Pitaevskii und S. Stringari, *Collective and single-particle excitations of a trapped Bose gas*, Phys. Rev. A **56**, 3840 (1997).
- [45] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii und S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [46] F. Dalfovo und S. Stringari, *Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices*, Phys. Rev. A **53**, 2477 (1996).
- [47] J. Dalibard, J. M. Raimond und J. Zinn-Justin (Hrsg.), *Fundamental Systems in Quantum Optics*, Les Houches, Session LIII, 1990, Amsterdam (1992), Elsevier Science Publishers.
- [48] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

- [49] S. R. de Groot, G. J. Hooyman und C. A. ten Seldam, *On the Bose-Einstein condensation*, Proc. R. Soc. A, 266 (1950).
- [50] B. DeMarco und D. S. Jin, *Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas*, Science **285**, 1703 (1999).
- [51] A. Di Giacomo, *What do we understand of colour confinement?*, Nucl. Phys. A**661**, 13 (1999).
- [52] R. J. Dodd, M. Edwards und C. W. Clark, *Two-gas description of dilute Bose-Einstein condensates at finite temperature*, J. Phys. B **32**, 4107 (1999).
- [53] R. J. Dodd, M. Edwards, C. W. Clark und K. Burnett, *Collective excitations of Bose-Einstein-confined gases at finite temperatures*, Phys. Rev. A **57**, R32 (1997).
- [54] M. Edwards, R. J. Dodd, C. W. Clark und K. Burnett, *Zero-temperature, mean-field theory of atomic Bose-Einstein condensates*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Tech. **101**, 553 (1996).
- [55] M. Edwards, D. A. Griggs, P. L. Holman, C. W. Clark, S. L. Rolston und W. D. Phillips, *Properties of a Raman atom-laser output coupler*, J. Phys. B **32**, 2935 (1999).
- [56] M. Edwards, P. A. Ruprecht, K. Burnett, R. J. Dodd und C. W. Clark, *Collective excitations of atomic Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1671 (1996).
- [57] B. Efron, *The Jackknife, the Bootstrap and Other Resampling Plans*, SIAM, Philadelphia (1982).
- [58] A. Einstein, Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss., Phys.-Math. Kl., S. 261 (1924).
- [59] A. Einstein, Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss., Phys.-Math. Kl., S. 3 (1925).
- [60] T. Esslinger, I. Bloch und T. W. Hänsch, *Bose-Einstein condensation in a quadrupole-lattice configuration trap*, Phys. Rev. A **58**, R2664 (1998).
- [61] P. O. Fedichev und G. V. Shlyapnikov, *Critical velocity in cylindrical Bose-Einstein condensates* (2000), Report No. cond-mat/0004039.
- [62] G. Ferrari, *Collisional relaxation in a fermionic gas*, Phys. Rev. A **59**, R4125 (1999).
- [63] A. L. Fetter, *Nonuniform states of an imperfect Bose gas*, Ann. Phys. (NY) **70**, 67 (1972).
- [64] A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill (1971).
- [65] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin/Cummings, Reading, Mass. (1972).
- [66] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer, Berlin (1974).
- [67] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner und T. J. Greytak, *Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [68] C. W. Gardiner, P. Zoller, R. J. Ballagh und M. J. Davis, *Kinetics of Bose-Einstein condensation in a trap*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1785 (1997).

- [69] H. Gauck, M. Hartl, D. Schneble, H. Schnitzler, T. Pfau und J. Mlynek, *Quasi-2d gas of laser cooled atoms in a planar matter waveguide*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5298 (1998).
- [70] F. Gerbier, P. Bouyer und A. Aspect, *Quasi-continuous atom laser in the presence of gravity* (2000), Report No. physics/0007051.
- [71] J. Goldstone, *Nuovo Cimento* **19**, 154 (1961).
- [72] R. Graham und D. F. Walls, *Theory of strong outcoupling from Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **60**, 1429 (1999).
- [73] A. Griffin, *Conserving and gapless approximations for an inhomogeneous Bose gas at finite temperatures*, Phys. Rev. B **54**, 9341 (1996).
- [74] A. Griffin, *A brief history of our understanding of BEC: from Bose to Beliaev*, in: M. Inguscio, S. Stringari und C. Wieman (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi', IOS Press, Amsterdam (1999).
- [75] A. Griffin, D. W. Snoke und S. Stringari (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge (1995), Cambridge University Press.
- [76] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961).
- [77] S. Grossmann und M. Holthaus, *On Bose-Einstein condensation in harmonic traps*, Phys. Lett. A **208**, 188 (1995).
- [78] S. Grossmann und M. Holthaus, *Fluctuations of the particle number in a trapped Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **79**, 3545 (1997).
- [79] D. Guery-Odelin und S. Stringari, *Scissors mode and superfluidity of a trapped Bose-Einstein condensed gas*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4452 (1999).
- [80] R. Haag, *Local Quantum Physics*, Springer, Berlin, 2. Aufl. (1996).
- [81] E. W. Hagley, L. Deng, M. Kozuma, J. Wen, K. Helmerson, S. L. Rolston und W. D. Phillips, *A well-collimated quasi-continuous atom laser*, Science **283**, 1706 (1999).
- [82] D. S. Hall, M. R. Matthews, J. R. Ensher, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Dynamics of component separation in a binary mixture of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1539 (1998).
- [83] D. S. Hall, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Measurements of relative phase in two-component Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1543 (1998).
- [84] M. Hammes, D. Rychtarik, V. Druzhinina, U. Moslener, I. Manek-Höninger und R. Grimm, *Optical and evaporative cooling of cesium atoms in the gravito-optical surface trap* (2000), Report No. physics/0005035.
- [85] C. E. Hecht, *The possible superfluid behaviour of hydrogen atom gases and liquids*, Physica **25**, 1159 (1959).

- [86] S. Heinrichs und W. J. Mullin, *Quantum Monte-Carlo calculations for Bosons in a two-dimensional harmonic trap*, J. Low Temp. Phys. **113**, 231 (1998), Erratum: J. Low Temp. Phys. **114**, 571 (1999).
- [87] C. Herzog und M. Olshanii, *Trapped Bose gas: The canonical versus grand canonical statistics*, Phys. Rev. A **55**, 3254 (1997).
- [88] P. C. Hohenberg, *Existence of long-range order in one and two dimensions*, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
- [89] M. Holland, K. Burnett, C. Gardiner, J. I. Cirac und P. Zoller, *Theory of an atom laser*, Phys. Rev. A **54**, R1757 (1996).
- [90] M. Holzmann und W. Krauth, *Transition temperature of the homogeneous, weakly interacting Bose gas*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2687 (1999).
- [91] M. Holzmann, W. Krauth und M. Naraschewski, *Precision Monte Carlo test of the Hartree-Fock approximation for a trapped Bose gas*, Phys. Rev. A **59**, 2956 (1999).
- [92] J. Hope, G. M. Moy, M. J. Collett und C. M. Savage, *The linewidth of a non-Markovian atom laser*, Opt. Commun. **179**, 571 (2000).
- [93] J. Hope, G. M. Moy, M. J. Collett und C. M. Savage, *The steady state quantum statistics of a non-Markovian atom laser*, Phys. Rev. A **61**, 023603 (2000).
- [94] J. J. Hope, *Theory of input and output of atoms from an atomic trap*, Phys. Rev. A **55**, R2531 (1997).
- [95] M. Houbiers, R. Ferwerda, H. T. C. Stoof, W. I. McAlexander, C. A. Sackett und R. G. Hulet, *Superfluid state of atomic ^6Li in a magnetic trap*, Phys. Rev. A **56**, 4864 (1997).
- [96] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley & Sons (1987).
- [97] K. Huang, *Bose-Einstein condensation and superfluidity*, in: A. Griffin, D. W. Snoke und S. Stringari (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- [98] D. Hutchinson, *Self-consistent effects of continuous wave output coupling of atoms from a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **82**, 6 (1999).
- [99] D. A. Hutchinson, R. J. Dodd und K. Burnett, *Gapless finite-T theory of collective modes of a trapped gas*, Phys. Rev. Lett. **81**, 2198 (1998).
- [100] D. A. W. Hutchinson, E. Zaremba und A. Griffin, *Finite temperature excitations of a trapped Bose gas*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1842 (1997).
- [101] F. Illuminati, P. Navez und M. Wilkens, *Thermodynamic identities and particle number fluctuations in weakly interacting Bose-Einstein condensates*, J. Phys. B **32**, L461 (1999).
- [102] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn und W. Ketterle, *Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate*, Nature **392**, 151 (1998).

- [103] S. Inouye, T. Pfau, S. Gupta, A. P. Chikkatur, A. Görlitz, D. E. Pritchard und W. Ketterle, *Phase-coherent amplification of atomic matter waves*, Nature **402**, 641 (1999).
- [104] M. W. Jack, M. Naraschewski, M. J. Collett und D. F. Walls, *Markov approximation for the atomic output coupler*, Phys. Rev. A **59**, 2962 (1999).
- [105] B. Jackson, J. F. McCann und C. S. Adams, *Vortex formation in dilute inhomogeneous Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **80**, 3903 (1998).
- [106] Y. Japha, S. Choi, K. Burnett und Y. B. Band, *Coherent output, stimulated quantum evaporation, and pair breaking in a trapped atomic Bose gas*, Phys. Rev. Lett. **82**, 1079 (1999).
- [107] J. Javanainen und M. Mackie, *Coherent photoassociation of a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **59**, R3186 (1999).
- [108] J. Javanainen und S. M. Yoo, *Quantum phase of a Bose-Einstein condensate with an arbitrary number of atoms*, Phys. Rev. Lett. **76**, 161 (1996).
- [109] P. Kapitza, Nature **141**, 74 (1938).
- [110] W. Ketterle, *Spinor condensates and light scattering from Bose-Einstein condensates*, in: R. Kaiser, C. Westbrook und F. David (Hrsg.), *Coherent Atomic Matter Waves*, Bd. 72 d. Reihe *Les Houches - Ecole d'Ete de Physique Theorique, 1999, Session LXXII*, Springer, Berlin/Heidelberg (2001).
- [111] W. Ketterle, D. S. Durfee und D. M. Stamper-Kurn, *Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates*, in: M. Inguscio, S. Stringari und C. Wieman (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, IOS Press, Amsterdam (1999).
- [112] W. Ketterle und N. J. van Druten, *Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions*, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).
- [113] B. Kneer, T. Wong, K. Vogel, W. P. Schleich und D. F. Walls, *Generic model of an atom laser*, Phys. Rev. A **58**, 4841 (1998).
- [114] V. V. Kocharovskiy, M. O. Scully, S.-Y. Zhu und M. S. Zubairy, *Condensation of N bosons: II. nonequilibrium analysis of an ideal Bose gas and the laser phase-transition analogy*, Phys. Rev. A **61**, 023609 (2000).
- [115] M. Köhl, I. Bloch, M. Greiner, T. Hänsch und T. Esslinger, *Spiegel, Strahlteiler und Resonatoren für Atomlaser mit Raman-Übergängen*, in: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* (2000), Frühjahrstagung in Bonn.
- [116] R. Kosloff und D. Kosloff, *A Fourier method solution for the time dependent Schrödinger equation as a toll in molecular dynamics*, J. Comp. Phys. **52**, 35 (1983).
- [117] J. M. Kosterlitz und D. J. Thouless, *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
- [118] W. Krauth, *Quantum Monte Carlo calculations for a large number of bosons in a harmonic trap*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3695 (1996).

- [119] L. D. Landau, J. Phys. U.S.S.R. **5**, 71 (1941).
- [120] L. D. Landau, J. Phys. U.S.S.R. **11**, 91 (1947).
- [121] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Quantenmechanik*, Akademie-Verlag, Berlin (1979).
- [122] A. J. Legget, *Broken gauge symmetry in a Bose condensate*, in: A. Griffin, D. W. Snoke und S. Stringari (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- [123] E. M. Lifshitz und L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics, Part 2*, Pergamon Press, Oxford (1980).
- [124] F. London, Nature **141**, 643 (1938).
- [125] F. London, *On the Bose-Einstein condensation*, Phys. Rev. **54**, 947 (1938).
- [126] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben und J. Dalibard, *Vortex formation in a stirred Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **84**, 806 (2000).
- [127] S. Mandelstam, Phys. Rep. **23C**, 245 (1976).
- [128] O. M. Maragó, S. Hopkins, J. Arlt, E. Hodby, G. Hechenblaikner und C. J. Foot, *Observation of the scissors mode and evidence for superfluidity of a trapped Bose-Einstein condensed gas*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2056 (2000).
- [129] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Vortices in a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2498 (1999).
- [130] N. D. Mermin und H. Wagner, *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- and two-dimensional isotropic Heisenberg models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [131] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller und E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [132] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend und W. Ketterle, *Output coupler for Bose-Einstein condensed atoms*, Phys. Rev. Lett. **78**, 582 (1997).
- [133] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend und W. Ketterle, *Collective excitations of a Bose-Einstein condensate in a magnetic trap*, Phys. Rev. Lett. **77**, 988 (1996).
- [134] M.-O. Mewes, G. Ferrari, F. Schreck, A. Sinatra und C. Salomon, *Simultaneous magneto-optical trapping of two lithium isotopes*, Phys. Rev. A **61**, 011403(R) (2000).
- [135] F. H. Mies, P. S. Julienne und E. Tsienga, *Manipulation of Feshbach resonances in ultracold atomic collisions using time-dependent magnetic fields*, Phys. Rev. A **61**, 022721 (2000).
- [136] H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur und W. Ketterle, *Observation of metastable states in spinor Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **82**, 2228 (1999).

- [137] G. Modugno, P. H. C. Benko, G. Roati und M. Inguscio, *Sub-Doppler laser cooling of fermionic ^{40}K atoms*, Phys. Rev. A **60**, R33373 (1999).
- [138] K. Mølmer, *Bose condensates and Fermi gases at zero temperature*, Phys. Rev. Lett. **80**, 1804 (1998).
- [139] I. Montvay und G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press (1994).
- [140] G. M. Moy, J. J. Hope und C. M. Savage, *Atom laser based on Raman transitions*, Phys. Rev. A **55**, 3631 (1997).
- [141] G. M. Moy, J. J. Hope und C. M. Savage, *Born and Markov approximations for atom lasers*, Phys. Rev. A **59**, 667 (1999).
- [142] W. J. Mullin, *A study of Bose-Einstein condensation in a two-dimensional trapped gas*, J. Low Temp. Phys. **110**, 167 (1998).
- [143] W. J. Mullin, S. D. Heinrichs und J. P. Fernández, *The condensate number in PIMC treatments of trapped bosons*, Physica B **284–288**, 9 (2000).
- [144] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell und C. E. Wieman, *Production of two overlapping Bose-Einstein condensates by sympathetic cooling*, Phys. Rev. Lett. **78**, 586 (1997).
- [145] M. Naraschewski, *Phasenkohärenz bei Bose-Einstein-Kondensation und dem Atomlaser*, Dissertation, Universität München (1997).
- [146] M. Naraschewski, A. Schenzle und H. Wallis, *Phase diffusion and the output properties of a continuous wave atom-laser*, Phys. Rev. A **56**, 603 (1997).
- [147] M. Naraschewski und D. M. Stamper-Kurn, *Analytical description of a trapped semi-ideal Bose gas at finite temperature*, Phys. Rev. A **58**, 2423 (1998).
- [148] M. Naraschewski, H. Wallis, A. Schenzle, J. I. Cirac und P. Zoller, *Interference of Bose condensates*, Phys. Rev. A **54**, 2185 (1996).
- [149] P. Navez, D. Bitouk, M. Gajda, Z. Idziaszek und K. Rzazewski, *Fourth statistical ensemble for the Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1789 (1997).
- [150] D. R. Nelson und J. M. Kosterlitz, *Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids*, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977).
- [151] H. Nordborg und G. Blatter, *Vortices and 2D bosons: A path-integral Monte Carlo study*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1925 (1997).
- [152] P. Nozières und D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids*, Perseus, Cambridge (1999).
- [153] N. Nygaard und K. Mølmer, *Component separation in harmonically trapped boson-fermion mixtures*, Phys. Rev. A **59**, 2974 (1999).
- [154] J. Oliva, *Density profile of the weakly interacting Fermi gas confined in a potential well: Nonzero temperature*, Phys. Rev. B **39**, 4204 (1989).

- [155] M. Olshanii, Y. Castin und J. Dalibard, *A model for an atom laser*, in: M. Inguscio, M. Allegrini und A. Sasso (Hrsg.), *Laser Spectroscopy, XII International Conference*, S. 7, World Scientific (1995).
- [156] Y. B. Ovchinnikov, I. Manek und R. Grimm, *Surface trap for Cs atoms based on evanescent-wave cooling*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2225 (1997).
- [157] A. S. Parkins und D. F. Walls, *The physics of trapped dilute-gas Bose-Einstein condensates*, Phys. Rep. **303**, 1 (1998).
- [158] O. Penrose und L. Onsager, *Bose condensation and liquid helium*, Phys. Rev. **104**, 567 (1956).
- [159] D. S. Petrov, M. Holzmann und G. V. Shlyapnikov, *Bose-Einstein condensation in quasi-2d trapped gases*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2551 (2000).
- [160] L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP **12**, 155 (1961).
- [161] H. D. Politzer, *Condensate fluctuations of a trapped, ideal Bose gas*, Phys. Rev. A **54**, 5048 (1996).
- [162] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge (1988).
- [163] C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic und W. Ketterle, *Evidence for a critical velocity in a Bose-Einstein condensed gas*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2502 (1999).
- [164] N. Robins, C. Savage und E. Ostrovskaya, *A model of a pumped continuous atom laser* (2000), Report No. cond-mat/0004127.
- [165] A. Röhrh, M. Naraschewski, A. Schenzle und H. Wallis, *Transition from phase locking to the interference of independent Bose condensates: Theory vs. experiment*, Phys. Rev. Lett. **78**, 4143 (1997).
- [166] J. Ruostekoski, *Optical response of a superfluid state in dilute atomic Fermi-Dirac gases*, Phys. Rev. A **60**, R1775 (1999).
- [167] J. Ruostekoski, *Scattering of light and atoms in a Fermi-Dirac gas with Bardeen-Cooper-Schrieffer pairing*, Phys. Rev. A **61**, 033605 (2000).
- [168] J. Ruostekoski und J. Javanainen, *Optical linewidth of a low density Fermi-Dirac gas*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4741 (1999).
- [169] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [170] A. I. Safonov, S. A. Vasilyev, I. S. Yasnikov, I. I. Lukashevich und S. Jaakola, *Observation of quasicondensate in two-dimensional atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **81**, 4545 (1998).
- [171] J. Schneider und A. Schenzle, *Output from an atom laser: theory vs. experiment*, Appl. Phys. B **69**, 353 (1999).

- [172] J. Schneider und A. Schenzle, *Investigations of a two-mode atom laser model*, Phys. Rev. A **61**, 053611 (2000).
- [173] J. Schneider und A. Schenzle, *Theory of a pulsed rf atom laser*, in: S. Martellucci, A. N. Chester, A. Aspect und M. Inguscio (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensates and Atom Lasers*, International School on Quantum Electronics, Erice, Kluwer Academic / Plenum Publishers, London (2000).
- [174] J. Schneider und H. Wallis, *Mesoscopic Fermi gas in a harmonic trap*, Phys. Rev. A **57**, 1253 (1998).
- [175] J. Schneider und H. Wallis, *Fully quantum mechanical moment of inertia of a mesoscopic ideal Bose gas*, Euro. Phys. J. B **18**, 507 (2000).
- [176] M. Scully, *Condensation of N bosons and the laser phase transition analogy*, Phys. Rev. A **82**, 3927 (1999).
- [177] S. I. Shevchenko, *Theory of two-dimensional superfluidity in a nonuniform external field*, Sov. Phys. JETP **73**, 1009 (1991).
- [178] P. Sindzingre, M. L. Klein und D. M. Ceperley, *Path-integral Monte Carlo study of low-temperature ^4He clusters*, Phys. Rev. Lett. **63**, 1601 (1989).
- [179] A. D. Sokal, *Bosonic algorithms*, in: M. Creutz (Hrsg.), *Quantum Fields on the Computer*, S. 236, World Scientific (1992).
- [180] R. J. C. Spreeuw, T. Pfau, U. Janicke und M. Wilkens, *Laser-like scheme for atomic-matter waves*, Europhys. Lett. **32**, 469 (1995).
- [181] H. Steck, *Kohärente Dynamik atomarer Bose-Einstein-Kondensate*, Diplomarbeit, Universität München (1997).
- [182] H. Steck, M. Naraschewski und H. Wallis, *Output of a pulsed atom laser*, Phys. Rev. Lett. **80**, 1 (1998).
- [183] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur und W. Ketterle, *Spin domains in ground-state Bose-Einstein condensates*, Nature **396**, 345 (1999).
- [184] H. T. C. Stoof, M. Houbiers, C. A. Sackett und R. G. Hulet, *Superfluidity of spin-polarized ^6Li* , Phys. Rev. Lett. **76**, 10 (1996).
- [185] S. Stringari, *Moment of inertia and superfluidity of a trapped Bose gas*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1405 (1996).
- [186] W. C. Stwalley und L. H. Nosanow, *Possible "new" quantum systems*, Phys. Rev. Lett. **36**, 910 (1976).
- [187] G. 't Hooft, in: A. Zichichi (Hrsg.), *High Energy Physics*, EPS International Conference, Palermo (1975).
- [188] D. R. Tilley und J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity*, IOP Publishing, Bristol, 3. Aufl. (1990).

- [189] G. M. Tino, F. S. Cataliotti, E. A. Cornell, C. Fort, M. Inguscio und M. Prevedelli, *Towards quantum degeneracy of bosonic and fermionic potassium atoms*, in: M. Inguscio, S. Stringari und C. E. Wieman (Hrsg.), *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, The International School of Physics „Enrico Fermi“, S. 521, IOS Press, Amsterdam (1999).
- [190] L. Tisza, *Nature* **141**, 913 (1938).
- [191] M. Trippenbach, Y. B. Band, M. Edwards, M. Doery, P. S. Julienne, E. W. Hagley, L. Deng, M. Kozuma, K. Helmerson, S. L. Rolston und W. D. Phillips, *Coherence properties of an atom laser*, *J. Phys. B* **33**, 47 (2000).
- [192] N. J. van Druten und W. Ketterle, *Two-step condensation of the ideal Bose gas in highly anisotropic traps*, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 549 (1997).
- [193] L. Vichi, M. Inguscio, S. Stringari und G. M. Tino, *Quantum degeneracy and interaction effects in spin-polarized Fermi-Bose mixtures*, *J. Phys. B* **31**, 899 (1998).
- [194] L. Vichi und S. Stringari, *Collective oscillations of an interacting trapped Fermi gas*, *Phys. Rev. A* **60**, 064734 (1999).
- [195] V. Vuletic, T. W. Hänsch und C. Zimmermann, *Steep magnetic trap for ultra cold atoms*, *Europhys. Lett.* **36**, 349 (1996).
- [196] H. Wallis und H. Steck, *Inseparable time evolution of anisotropic Bose-Einstein condensates*, *Europhys. Lett.* **41**, 477 (1998).
- [197] F. Weig und W. Zwerger, *Optical detection of a BCS transition of lithium-6 in harmonic traps*, *Europhys. Lett.* **49**, 282 (2000).
- [198] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Bd. 2, Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [199] C. Weiss und M. Wilkens, *Particle number counting statistics in ideal Bose gases*, *Optics Express* **1**, 272 (1997).
- [200] J. C. Wick, A. S. Wightman und E. P. Wigner, *The intrinsic parity of elementary particles*, *Phys. Rev.* **88**, 101 (1952).
- [201] M. Wilkens und C. Weiss, *Particle number fluctuations in an ideal Bose gas*, *J. Mod. Opt.* **44**, 1801 (1997).
- [202] C. J. Williams und P. S. Julienne, *Ultracold matter - molecules at rest*, *Science* **287**, 986 (2000).
- [203] J. E. Williams und M. J. Holland, *Preparing topological states of a Bose-Einstein condensate*, *Nature* **401**, 568 (1999).
- [204] H. Wiseman, A. Martins und D. Walls, *An atom laser based on evaporative cooling*, *Journal of the European Optical Society: Part B, Quantum and Semiclassic Optics* **8**, 737 (1996).

-
- [205] H. M. Wiseman, *Defining the (atom) laser*, Phys. Rev. A **56**, 2068 (1997).
- [206] R. Wynar, R. S. Freeland, D. J. Han, C. Ryu und D. J. Heinzen, *Molecules in a Bose-Einstein condensate*, Science **287**, 1016 (2000).
- [207] C. N. Yang, *Concept of off-diagonal long-range order and the quantum phases of liquid He and superconductors*, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).
- [208] F. Zambelli und S. Stringari, *Moment of inertia and quadrupole response function of a trapped superfluid* (2000), Report No. cond-mat/0004325.
- [209] W. Zhang und D. F. Walls, *Gravitational and collective effects in an output coupler for a Bose-Einstein condensate in an atomic trap*, Phys. Rev. A **57**, 1248 (1998), Erratum in Phys. Rev. A, **98**, 4248 (1998).
- [210] R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck und M. Kac, *The ideal Bose-Einstein gas, revisited*, Phys. Rep. **32**, 169 (1977).

Danksagungen

Der Abschluss eines Projektes wie einer Doktorarbeit, das über mehrere Jahre einigen persönlichen Einsatz erfordert und das nicht frei von emotionalen Höhen und Tiefen ist, ist nicht ohne die Unterstützung einiger mehr oder minder stark am Geschehen beteiligter Personen denkbar. Ich möchte mich deshalb bei allen bedanken, die mich während der vergangenen Jahre fachlich oder emotional unterstützt haben und erst so die Vollendung dieser Dissertation ermöglichten. Mein besonderer Dank geht an

Herrn Prof. Dr. Axel Schenzle, der zu Beginn bereit war, mich als in der Quantenoptik doch recht Ungebildeten in seine Gruppe aufzunehmen und mir die Möglichkeit gab, auf dem faszinierenden Gebiet der Bose-Einstein-Kondensation zu arbeiten. Danken möchte ich ihm auch für seine bereitwillige Förderung, die den Besuch mehrerer Konferenzen und Sommerschulen möglich machte.

Herrn Dr. Hartmut Wallis, der mich nicht nur in das Gebiet der Bose-Einstein-Kondensation eingeführt hat, sondern auch bis zuletzt am Fortgang meiner Arbeit interessiert war. Danke für Deine stets besonnenen und erhellenden Kommentare.

Dr. Immanuel Bloch, Dr. Tilmann Esslinger und Markus Greiner für ihre Unterstützung von experimenteller Seite und für ihre Motivation und ihren Ansporn, auch einmal etwas zu berechnen, was wirklich mit experimentellen Daten verglichen werden kann.

den Mitgliedern der Theoriegruppe des Max-Planck-Instituts für Quantenoptik und vor allem Amalia Apalategui-Rebollo, Andreas Buchleitner, Berthold G. Englert, Christoph Gebhardt, Andreas Krug, Lukas Kurtz, Markus Löffler und Robert Pfund für die überaus angenehme und freundschaftliche Atomsphäre und die vielen schönen Ablenkungen.

Giovanna Morigi und Christoph Skornia, mit denen ich nicht einfach nur das Büro geteilt habe. Danke für die physikalischen wie auch für alle anderen Diskussionen. Christoph, Linux rules. Cara Giovanna, grazie per tutto, non solo per il cioccolato.

Geli, für ihre Geduld, auch zu unmöglichen Zeiten das Neueste über Bose-Einstein-Kondensate zu hören, für Ihre unermüdliche Unterstützung und ihren Idealismus und vor allem für Ihre Liebe.

Lebenslauf

Name Jens Schneider
Geburtsdatum und -ort 29.12.1968, Idar-Oberstein
Familienstand verheiratet seit 01.04.2000

Schulische Ausbildung

08/1975 – 06/1979 Grundschule in Idar-Oberstein.
08/1979 – 06/1988 Gymnasium an der Heinzenwies in Idar-Oberstein.
06/1988 Abitur.
07/1988 – 09/1989 Grundwehrdienst in einer Fernmeldeeinheit.

Akademische Ausbildung

10/1989 – 01/1995 Physikstudium an der Universität Kaiserslautern.
Nebenfächer: Informatik, Mathematik.
22.08.1991 Vordiplom in Physik.
01/94 – 11/95 Diplomarbeit in theoretischer Physik bei Prof. V. F. Müller über
„*Quantisierung von Solitonen in 2 + 1-dimensionalen Feldtheorien*“.
11.01.1995 Diplom in Physik, Wahlfächer: mesoskopische Halbleiter, Optik.
„Mit Auszeichnung bestanden“.
03/1995 – 03/1997 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern, Forschungstätigkeit auf dem Gebiet Computersimulation von Gittereichtheorien.
04/1997 – 12/2000 Doktorand am Max-Planck-Institut für Quantenoptik/LMU München bei Prof. A. Schenzle im Bereich Bose-Einstein-Kondensation und Atomlasertheorie.

Preise, Stipendien

05/1989 Bundessieger *Jugend forscht* '89 im Bereich Physik.
07/1991 – 01/1995 Stipendiat der Studienstiftung des deutschen Volkes.