

Atomare Quantengase

Claus Zimmermann

March 4, 2019

Contents

1. Verdampfungskühlen in Magnetfallen	2
1.1 Magnetfallen für kalte Atome	2
1.2 Verdampfungskühlen	6
2. Bose-Gase	18
2.1. Phasenraumdichte	18
2.2 Bose-Einstein Kondensation	21
3. Gross-Pitaevskii-Gleichung	26
3.1 Vielteilchen-Hamilton und Bogoliubov Näherung	26
3.2 Stationäre Lösungen	29
4. Mikroskopische Beschreibung der Wechselwirkung im Kondensat	36
4.1 s-Wellen-Stöße	36
4.2 Pseudopotential und Streulänge	39
4.3 GP-Gleichung und Lorentz-Modell in der Optik	50

1. Verdampfungskühlen in Magnetfallen

Wir beginnen mit kalten Atomwolken, die in optischen Fallen angesammelt und auf etwa $100\mu\text{K}$ vorgekühlt sind. Damit sind die Möglichkeiten optischer Kühlmethode für Wolken mit hoher Dichte ausgereizt. Man kann aber mit der thermodynamischen Methoden des Verdampfungskühlens noch drei Größenordnungen kälter werden. Dazu müssen die Atome gut von der Umwelt isoliert sein. Man lädt die Atome daher zunächst in Magnetfallen oder optische Dipolfallen um, in denen das Verdampfungskühlen dann stattfindet. Hier betrachten wir Magnetfallen.

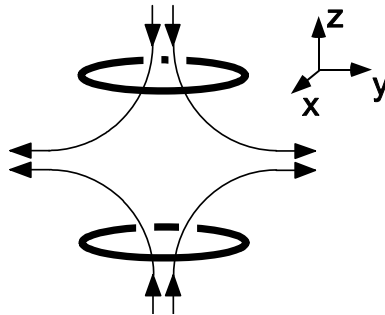
1.1 Magnetfallen für kalte Atome

- Quadrupolfeld

Die einfachste Magnetfalle ist eine sphärische Quadrupolfalle. Sie entsteht, wenn man den Strom in einer der Spulen eines Helmholtzspulenpaars invertiert. Um das Zentrum herum kann man das Feld näherungsweise beschreiben durch

$$\vec{B} = b \begin{pmatrix} x \\ y \\ -2z \end{pmatrix}.$$

Die Symmetrieachse ist die z-Achse.



Die Feldlinien laufen auf der z-Achse zum Zentrum und verlassen das Zentrum in der x-y-Ebene. Das ganze ist rotationssymmetrisch um die z-Achse. Ein solches Feld wird auch für den Betrieb einer magnetooptischen Falle verwendet, allerdings mit schwächeren Strömen. Der Betrag des Magnetfeldes steigt in alle Richtungen linear an

$$|\vec{B}| = b\sqrt{x^2 + y^2 + (2z)^2}.$$

In z-Richtung ist der Anstieg doppelt so stark. Dies bewirkt, dass die Divergenz des Magnetfeld verschwindet, $\nabla \cdot \vec{B} = 0$.

- Magnetisches Fallenpotential

Die potentielle Energie eines Atoms in einem inhomogenen Feld ist

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{r}).$$

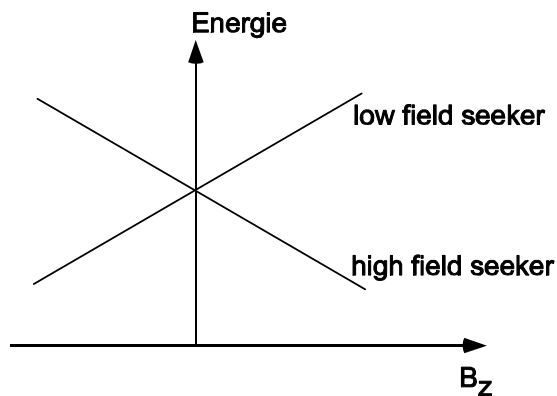
Wir vernachlässigen zunächst die Hyperfeinstruktur, ignorieren also den Kernspin. Das magnetische Moment $\vec{\mu}$ eines Alkaliatoms ist dann durch den Spin des Valenzelektrons gegeben. Es hat zwei Einstellmöglichkeiten relativ zur Richtung des Magnetfelds am Ort des Atoms. Ist es parallel orientiert, sinkt die Energie mit steigendem Feld und das Atom wird vom Zentrum weg beschleunigt (high field seeker). Für eine antiparallel Orientierung ist die Kraft zum Zentrum gerichtet (low field seeker). Wir nehmen für einen Moment an, dass die Orientierung relativ zum lokalen Magnetfeld auch auf dem Flug des Atoms in der Falle erhalten bleibt, d.h.

$$\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -|\vec{\mu}| \cdot |\vec{B}|.$$

Damit lautet das Potential

$$\begin{aligned} U(r) &= |\vec{\mu}| \cdot |\vec{B}(r)| \\ &= |\vec{\mu}| \cdot b\sqrt{x^2 + y^2 + (2z)^2}. \end{aligned}$$

Es ist "kegelförmig" mit einem Minimum im Zentrum.



- Majorana-Verluste

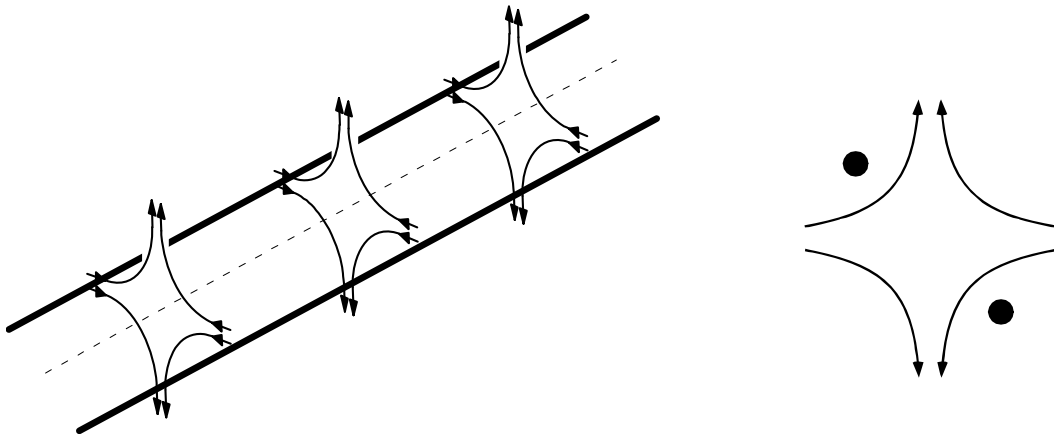
Unter welchen Umständen bleibt die relative Orientierung zum lokalen Magnetfeld erhalten? Aus der Sicht des Atoms ändert sich Richtung und Betrag des Magnetfeldes ständig. Das magnetische Moment des Atoms folgt allerdings der Richtung des Magnetfeldes, sofern sich dieses nicht zu schnell ändert. Das adiabatische Folgen des magnetischen Moments kann man mit dem Bloch-Modell der Atomphysik beschreiben

(siehe Skript "Atome, Moleküle und Licht"). Die Zeitskala auf der sich das Feld ändern darf, ist dabei durch die Larmorfrequenz gegeben. Sie ist allerdings selber proportional zum Betrag des Magnetfeldes. Wenn also das Atom durch das Fallenzentrum fliegt, verschwindet das Magnetfeld und damit die Larmorfrequenz. Die Adiabazitätsbedingung kann nicht mehr erfüllt werden. Der Spin ändert seinen Zustand und wird als high field seeker aus der Falle beschleunigt. Je niedriger die Temperatur des Gases, umso drastischer wird der Effekt, da sich die Atome immer näher am Zentrum aufhalten. Quadrupolfallen sind daher bei niedrigen Temperaturen instabil. Stabile Fallen benötigen ein nicht verschwindendes Magnetfeld im Fallenminimum.

- Ioffe-Falle

Ein stabile Falle erhält man, indem man sich zunächst ein zweidimensionales Quadrupolpotential konstruiert. Die einfachste Variante sind zwei parallele Drähte, die gleichsinnig vom selben Strom durchflossen werden. Entlang der Linie, die genau zwischen den beiden Drähten verläuft, kompensieren sich die Felder beider Drähte und man erhält in der Nähe dieser Nulllinie ein zweidimensionales Quadrupolfeld:

$$\vec{B}_\perp = b_\perp \begin{pmatrix} x \\ -y \\ 0 \end{pmatrix}.$$



Diesem Feld überlagert man ein homogenes Feld, das in z -Richtung orientiert ist,

$$\vec{B}_\parallel = B_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Das Potential ergibt sich dann aus dem Betrag des Gesamtfeldes

$$U = \mu \sqrt{b_\perp^2 (x^2 + y^2) + B_0^2}.$$

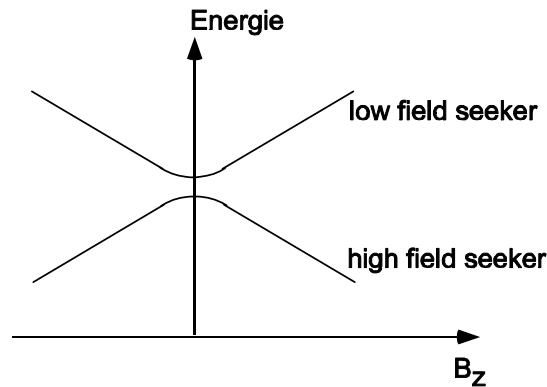
$$U = \mu \sqrt{b_\perp^2 r^2 + B_0^2}.$$

Das Potential ist also in der Nähe des Minimums rotationssymmetrisch und hängt nur vom radialen Abstand r vom Zentrum ab, mit

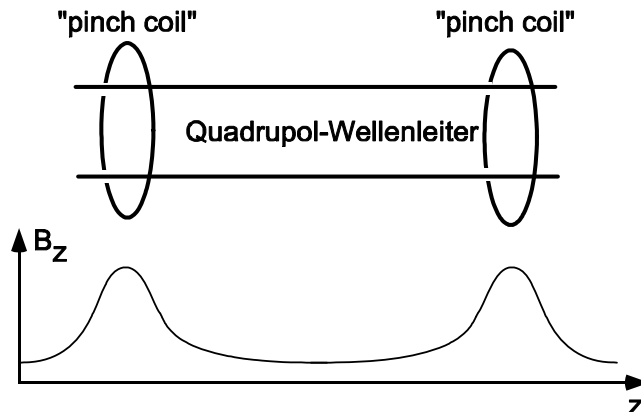
$$r^2 := x^2 + y^2.$$

Um das Minimum herum kann man das Potential entwickeln

$$U \simeq \mu B_0 \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{b_{\perp}}{B_0} \right)^2 r^2 \right).$$



Man erhält also ein zweidimensionales harmonisches Potential mit einem nicht verschwindenden Feld im Minimum. In einem solchen "Atomleiter" bewegen sich die Atome stabil entlang der Symmetrieachse. Der Wellenleiter kann an den Enden durch sogenannte "pinch coils" verschlossen werden. Sie erzeugen ein zusätzliches Feld entlang der Symmetrieachse, das zu einem Anstieg des Feldbetrags und damit zu einem erhöhten Potential führt. Die pinch coils erzeugen auch gleich das Offsetfeld B_0 . Eine solche Falle bezeichnet man als Ioffe-Falle.



Es gibt sie in verschiedenen Bauformen. Man kann sie so stark vereinfachen, dass sie sich auf Mikrochips integrieren lassen. Die Atome bewegen sich dann einige $10\ \mu\text{m}$ oberhalb der Chipoberfläche. Durch zusätzliche Leiter, deren Ströme man zeitlich ändert, kann man die Atome kontrolliert entlang der Oberfläche bewegen und in Kontakt mit anderen integrierten Elementen bringen, wie z.B. Mikrowellenresonatoren. Die Eignung solcher "Atomchips" für die Quanteninformationsverarbeitung ist Gegenstand aktueller Forschung.

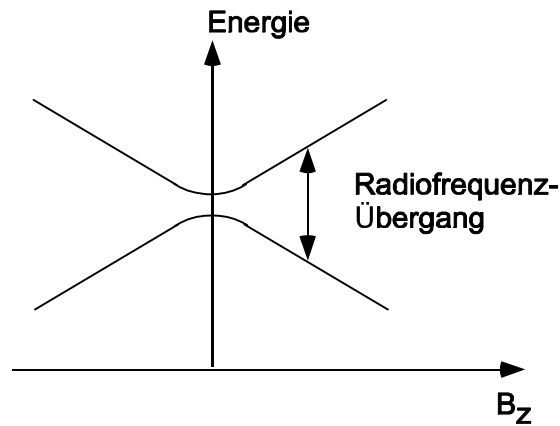
1.2 Verdampfungskühlen

- Grundidee

Gelingt es möglichst viele Atome bei niedriger Temperatur und hoher Dichte in stabile Fallen zu laden, beginnen die Atome miteinander zu stoßen. Am wahrscheinlichsten sind zunächst die Zweikörperstöße oder "binäre" Stöße. Es gibt inelastische binäre Stöße, bei denen sich die innere Energie mindestens eines der beiden Stoßpartner ändert und elastische Stöße. Dominieren die elastischen Stöße erhält man ein stabiles Gas, in dem die Atome durch Stöße ein thermisches Gleichgewicht ausbilden. In Magnetfallen kann man ein thermalisierendes Gas durch langsames (adiabatisches) Absenken des Fallenrandes kühlen. Der Rand der Falle muss dabei deutlich langsamer sinken als die Thermalisierungszeit der verbleibenden Atome. Betrachtet man einzelne Stöße zwischen zwei Atomen, so gibt es immer Stöße bei denen zwei Atome mittlere Geschwindigkeit in eines mit hoher und eines mit niedriger Geschwindigkeit umgewandelt werden. Das schnelle Atom entweicht und das langsame bleibt in der Falle und thermalisiert dort mit den anderen Atomen. Insgesamt verliert man in typischen Experimenten etwa um den selben Faktor Atome um den man die Temperatur absenkt. Eine Temperatureduktion auf $1\ \mu\text{K}$ führt zu einem Teilchenverlust von 99%. Obwohl die Teilchenzahl abnimmt, nimmt die Dichte sogar zu, da die Teilchen mit ihrer verringerten Energie nur noch ein kleines Volumen im Zentrum der Falle einnehmen können.

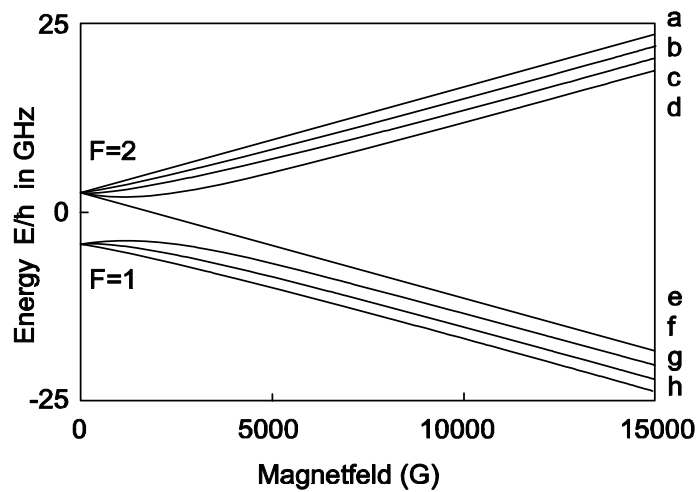
- Radiofrequenzkühlen

Bei Magnetfallen läßt sich der Fallenrand sehr effizient senken, indem man eine Radiofrequenz-Welle einstrahlt. Gefangene Atome wandern im Potential bis zu einer Stelle, an der sie resonant mit der Radiofrequenz sind und einen magnetischen Übergang in den ungefangenen Zustand machen können. Je nach Wahl der Radiofrequenz geschieht dieser Übergang bei verschiedenen Werten der potentiellen Energie also bei verschiedenen Fallentiefen. Man kann also durch Verstimmen der Radiofrequenz die energetischen Atome selektiv aus der Falle entfernen, ohne die Form der Falle sonst zu verändern.



- Rubidium

Im Fall von Rubidium erhält man drei gefangene magnetische Unterzustände und zwar die Zustände $F = 2, m_F = 1, 2$ und den Zustand $F = 1, m_F = -1$. Das komplette Zeeman-Diagramm sieht so aus.



Bei hohen Magnetfeldern dominiert die Wechselwirkung zwischen dem Dipolmoment des Elektrons und des Magnetfelds. Bei kleinen Magnetfeldern kommt die Hyperfeinstruktur ins Spiel und mischt je zwei Zustände und zwar d mit f und c mit g und b mit h. Die Zustände a und e bleiben ungemischt und haben die Steigung von $\pm 1.4 \text{ MHz/G}$. Die Felder in den Magnetfallen sind allerdings viel kleiner und liegen im Bereich weniger Gauß. Man befindet sich dann im Zeemanbereich,

$$E = \mu_{Bohr} \cdot B \cdot g_j \cdot m_F \cdot \left(\frac{F(F+1) + J(J+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \right).$$

Das Valenzelektron des Rubidiumatoms befindet sich im 5s-Zustand hat also den Gesamtdrehimpuls $J = 1/2$ und der g-Faktor ist der des Elektronspins also $g_j = 2$. Das Kernmoment beträgt $I = 3/2$ für ^{87}Rb . Damit erhält man die Zustände $F = 2$ und $F = 1$ mit den Energien

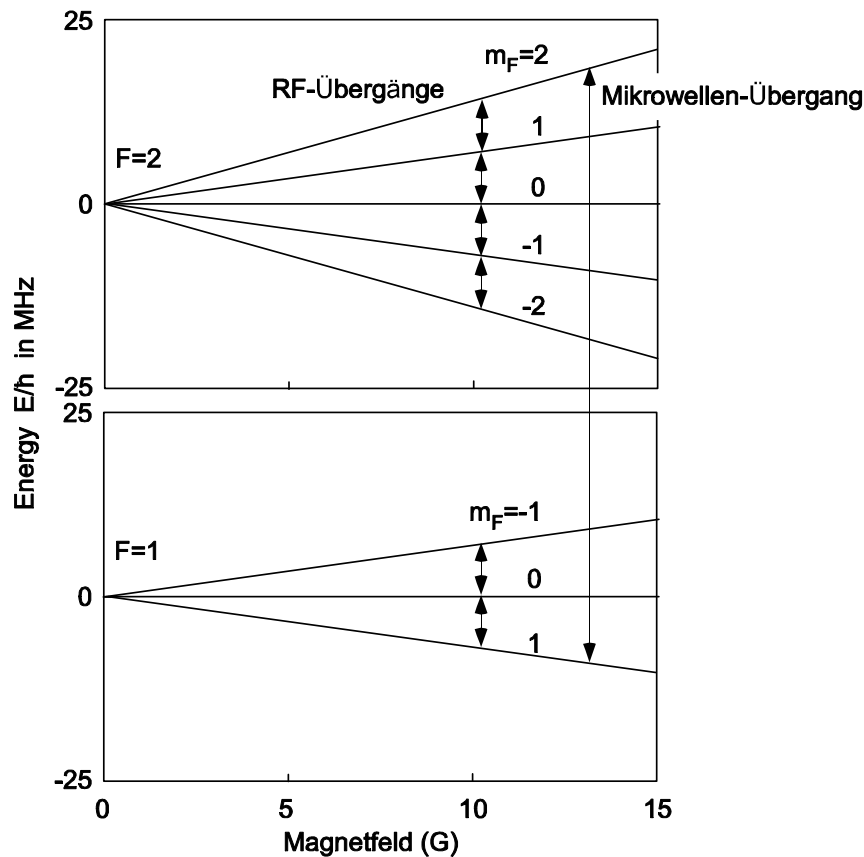
$$E_{\text{Rb}}^{(F=1)} = \mu_{\text{Bohr}} \cdot B \cdot 2 \cdot m_F \cdot \left(\frac{1(1+1) + 1/2(1/2+1) - 3/2(3/2+1)}{2(1+1)} \right)$$

$$= -1.4 \text{ MHz/G} \cdot \frac{1}{2} m_F$$

und

$$E_{\text{Rb}}^{(F=2)} = \mu_{\text{Bohr}} \cdot B \cdot 2 \cdot m_F \cdot \left(\frac{2(2+1) + 1/2(1/2+1) - 3/2(3/2+1)}{2 \cdot 2(2+1)} \right)$$

$$= 1.4 \text{ MHz/G} \cdot \frac{1}{2} m_F$$



Die eingestrahelte Radiofrequenz koppelt die gefangenen mit den ungefangenen Zuständen und entfernt dadurch die gefangenen Atome bei einer bestimmten Energie. Man

kann auch Mikrowellen einstrahlen, die einen Zustand mit $F = 2$ an einen ungefangenen Zustand mit $F = 1$ koppelt.

- Temperatur und Teilchenzahl

Zunächst berechnen wir, wie sich die Temperatur des Gases mit dem Teilchenzahl ändert. Jedes entwichene Atom nimmt die Energie $\epsilon_t + \kappa kT$ mit, wobei ϵ_t die Falltiefe ist und κkT die kinetische Energie des Atoms, nachdem es entwichen ist. Die Energieänderung pro entwichenem Atom ist also

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dN} &= \epsilon_t + \kappa kT \\ &= (\eta + \kappa) kT,\end{aligned}$$

mit dem "Abschneideparameter"

$$\eta := \frac{\epsilon_t}{kT}.$$

Er ist die Falltiefe gemessen in Einheiten von kT . Die mittlere Energie in der Falle besteht aus kinetischer und potentieller Energie

$$E = N \cdot \left(\frac{3}{2} + \delta \right) k_B T.$$

Der Parameter δ gibt den Anteil der potentiellen Energie an und wird später bestimmt. Wir können jetzt feststellen wie sich die Temperatur mit der Teilchenzahl ändert. Dazu lösen wir nach T auf und leiten nach N ab:

$$T = \frac{1}{N} \cdot \frac{E}{k_B} \cdot \frac{1}{3/2 + \delta}$$

$$\frac{dT}{dN} = \frac{1}{(3/2 + \delta) k_B} \left(-\frac{E}{N^2} + \frac{1}{N} \cdot \frac{dE}{dN} \right).$$

Einsetzen des obigen Ausdrucks für dE/dN ergibt

$$\begin{aligned}\frac{dT}{dN} &= \frac{1}{(3/2 + \delta) k_B} \left(- (3/2 + \delta) N k_B T \frac{1}{N^2} + \frac{1}{N} \cdot (\eta + \kappa) k_B T \right) \\ &= \left(\frac{\eta + \kappa}{3/2 + \delta} - 1 \right) \frac{T}{N} \\ &= \alpha \frac{T}{N},\end{aligned}$$

wobei

$$\alpha := \frac{\eta + \kappa}{3/2 + \delta} - 1.$$

Damit erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}\frac{dT}{T} &= \alpha \frac{dN}{N} \\ \frac{T}{T_0} &= \left(\frac{N}{N_0}\right)^\alpha.\end{aligned}$$

Für $\alpha > 1$ sinkt die Temperatur überproportional schneller als die Teilchenzahl.

- Potentielle Energie

Um α zu bestimmen müssen wir δ kennen, also die mittlere potentielle Energie in einer Falle, gemessen in Einheiten von $k_B T$. Hier hilft das Äquipartitionstheorem der Thermodynamik

$$k_B T = \left\langle q_i \frac{dH}{dq_i} \right\rangle,$$

wobei q_i die i -te Komponente des $3N$ -dimensionalen Impulsvektors oder des $3N$ -dimensionalen Ortsvektors ist. H ist die klassische Hamiltonfunktion. Wir betrachten ein Teilchen, d.h. $i \in [1..3]$ und wenden das Theorem auf den Ortsvektor an. Offenbar gilt dann:

$$\left\langle x \frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle + \left\langle y \frac{\partial H}{\partial y} \right\rangle + \left\langle z \frac{\partial H}{\partial z} \right\rangle = 3k_B T$$

Für das Fallenpotential nehmen wir ein Potenzgesetz an und erhalten für die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + U_0 |r|^q.$$

Wir bilden die Ableitungen

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial x} &= U_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right)^q \\ &= U_0 \frac{q}{2} 2x (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2-1},\end{aligned}$$

und

$$x \frac{\partial H}{\partial x} = U_0 q \cdot x^2 (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2-1}.$$

Entsprechendes erhält man für die Ableitungen nach y und nach z . Damit lautet unsere

Gleichung jetzt

$$\begin{aligned}
 3k_B T &= \left\langle U_0 q \cdot x^2 (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2-1} \right\rangle + \\
 &\quad \left\langle U_0 q \cdot y^2 (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2-1} \right\rangle + \\
 &\quad \left\langle U_0 q \cdot z^2 (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2-1} \right\rangle \\
 &= \left\langle U_0 q \cdot (x^2 + y^2 + z^2) (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2-1} \right\rangle \\
 &= \left\langle q \cdot U_0 \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2} \right\rangle \\
 &= q \left\langle U_0 \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{q/2} \right\rangle \\
 &= q \langle U(r) \rangle
 \end{aligned}$$

oder

$$\langle U(r) \rangle = \frac{3}{q} k_B T,$$

und

$$\delta = \frac{3}{q},$$

wodurch dann

$$\alpha = \frac{1}{3} \frac{\eta + \kappa}{\frac{1}{2} + \frac{1}{q}} - 1.$$

In einem harmonischen Potential mit $q = 2$ gilt

$$\alpha_{HO} = \frac{1}{3} (\eta + \kappa) - 1.$$

Um während des Kühlens so wenig Atome zu verlieren wie möglich, sollte α so groß wie möglich sein. Das kann man erreichen, wenn man den Abschneideparameter η , also die Falltiefe beliebig groß macht. Im Extremfall macht man die Falle so tief wie die gesamte Energie aller gefangenen Atome. Wenn dann ein Atom über den Fallenrand entweicht, muss es die gesamte Energie des Gases mitnehmen und das verbleibende Gas wäre durch Verlust nur eines Atoms mit einem Schlag beliebig kalt. Die Wahrscheinlichkeit für einen solchen Entweichungsvorgang ist allerdings extrem klein und man müsste unrealistisch lange warten. Wir müssen also nach der Kühlgeschwindigkeit fragen. Zuvor schreiben wir noch auf, wie sich die anderen Größen mit der Teilchenzahl ändern.

- Phasenraumdichte und Teilchenzahl

Später werden wir sehen, dass das Phasenraumvolumen und nicht die Temperatur die eigentlich wichtige Größe ist. Die Phasenraumdichte ist definiert als

$$\Lambda := n \cdot \lambda_{th}^3$$

mit der thermischen de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda_{th} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \sim T^{-1/2}$$

Darüber später mehr. Um die Phasenraumdichte zu bestimmen, benötigen wir die Dichte und dazu das Volumen. Das Volumen V , das das Gas einnimmt, skaliert mit dem Radius r der Wolke gemäß

$$\frac{V}{V_0} = \frac{r^3}{r_0^3}.$$

Die Ausdehnung hängt mit der potentiellen Energie über ein Potenzgesetz zusammen

$$\frac{U}{U_0} = \frac{r^q}{r_0^q}.$$

Damit gilt

$$\frac{r}{r_0} = \left(\frac{U}{U_0}\right)^{1/q}.$$

und

$$\frac{V}{V_0} = \left(\frac{U}{U_0}\right)^{3/q}.$$

Die potentielle Energie ist proportional zur Temperatur und diese skaliert über α mit der Teilchenzahl:

$$\frac{V}{V_0} = \left(\frac{U}{U_0}\right)^{3/q} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/q} = \left(\frac{N}{N_0}\right)^{\delta\alpha}.$$

Im letzten Schritt haben wir das Ergebnis von oben verwendet $\delta = \frac{3}{q}$. Die Dichte n skaliert entsprechend

$$\frac{n}{n_0} = \frac{NV_0}{N_0V} = \left(\frac{N}{N_0}\right)^{1-\delta\alpha}.$$

Man erhält also

$$\begin{aligned} \frac{\Lambda}{\Lambda_0} &= \frac{n \cdot \lambda^3}{n_0 \cdot \lambda_0^3} = \frac{n \cdot T_0^{3/2}}{n_0 \cdot T^{3/2}} \\ &= \left(\frac{N}{N_0}\right)^{-\delta\alpha+1} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-3/2} \\ &= \left(\frac{N}{N_0}\right)^{1-\alpha(\delta+3/2)}. \end{aligned}$$

Schließlich ist noch die Streurrate $\Gamma = n \cdot v \cdot \sigma$ interessant.

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma}{\Gamma_0} &= \frac{n \cdot v \cdot \sigma}{n_0 \cdot v_0 \cdot \sigma} = \frac{n \cdot T^{1/2}}{n_0 \cdot T_0^{1/2}} \\ &= \left(\frac{N}{N_0}\right)^{-\delta\alpha+1} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/2} \\ &= \left(\frac{N}{N_0}\right)^{1-\alpha(\delta-1/2)}. \end{aligned}$$

- Run away Regime

Die Gleichungen zeigen, dass trotz sinkender Atomzahl die Dichte zunehmen kann und zwar dann, wenn der Exponent in der Gleichung für die Dichte negativ wird:

$$1 - \delta\alpha < 0.$$

Außerdem kann die Stoßrate mit dem Kühlen zunehmen. Damit sinkt die Thermalisierungszeit und man kann den Fallenrand schneller absenken. Die Kühlgeschwindigkeit steigt also mit fallender Temperatur und man spricht vom "run away cooling". Fast alle Experimente arbeiten in diesem Regime. Man erreicht es, wenn der Exponent im Ausdruck für die Stoßrate negativ wird.

$$1 - \alpha(\delta - 1/2) < 0$$

In einer harmonischen Falle ist $\delta = 3/2$ und man erhält die Bedingung

$$\alpha_{HO} > 1.$$

Die Temperatur sinkt in diesem Regime also überproportional mit der Atomzahl. Mit $\alpha_{HO} = \frac{1}{3}(\eta + \kappa) - 1$ erhält man außerdem

$$\eta + \kappa > 6.$$

Da die kinetische Energie eines entwichenen Atoms sicherlich deutlich kleiner ist als der Fallenrand, kann man κ gegenüber η vernachlässigen und man erhält die Bedingung für "run away cooling":

$$\eta > 6.$$

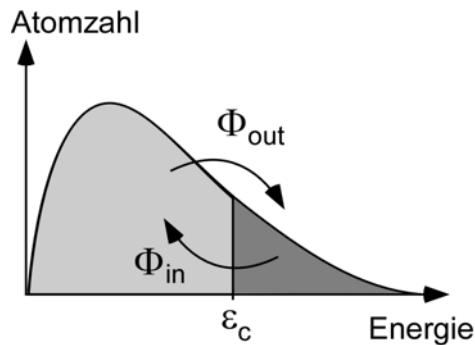
Der Fallenrand muss also mindestens 6 mal höher sein als die mittlere thermische Energie. Hier sind allerdings sonstige Verluste, z.B. durch Stöße mit dem Restgas nicht berücksichtigt. Das können wir tun, wenn wir die Kühlgeschwindigkeit kennen.

- Stoßrate

In einem Gas werden ständig durch Stöße Atome zwischen verschiedenen Energieklassen umverteilt. Im Gleichgewicht gilt, dass die Rate, mit der Atome aus einer Energieklasse

in eine andere gestreut werden genauso groß ist wie die für den umgekehrte Streuvorgang. Damit können wir abschätzen, wieviel Atome in eine Energieklasse gestreut werden, die oberhalb einer bestimmten kritischen Energie liegt. Es sind nämlich genauso viele wie von oberhalb der kritischen Energie in Klassen unterhalb der kritischen Energie gestreut werden:

$$\phi_{out} = \phi_{in} = \frac{1}{\tau} \cdot \int_{\epsilon_c}^{\infty} n(\epsilon) d\epsilon.$$



Das Integral beschreibt die Anzahl der Atome mit Energien oberhalb der kritischen Energie ϵ_c . Die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen τ für diese Atome bestimmt die Stoßrate. Die Stoßzeit τ kann man abschätzen:

$$\frac{1}{\tau} = n \cdot \sigma \cdot v_c,$$

wobei

$$\frac{1}{2} m v_c^2 = \epsilon_c = \eta \cdot kT.$$

Also

$$v_c = \sqrt{\frac{2\eta \cdot kT}{m}} = \frac{1}{2} \bar{v} \sqrt{\pi\eta},$$

mit der mittleren themischen Geschwindigkeit

$$\bar{v} := \sqrt{\frac{4}{\pi}} \sqrt{\frac{2 \cdot kT}{m}}.$$

Die Stoßrate ist damit

$$\frac{1}{\tau} = n \cdot \sigma \cdot \frac{1}{2} \bar{v} \sqrt{\pi\eta}.$$

- Verdampfungsrate

Für den Fluß ϕ_{out} benötigen wir das Integral über die Dichte. Dazu kann man die Boltzman-Verteilung heranziehen

$$\int_{\epsilon_c}^{\infty} n(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{\epsilon_c}^{\infty} e^{-\epsilon(r)/kT} d\vec{r} = \int_{\epsilon_c}^{\infty} e^{-\epsilon(r)/kT} 4\pi r^2 dr$$

Hier haben wir eine kugelsymmetrische Falle angenommen und über alle Winkel integriert:

$$d\vec{r} = r^2 dr d\varphi d\sin\theta = 4\pi r^2 dr.$$

In einer harmonischen Falle ist die potentielle Energie

$$\epsilon(r) = c \cdot r^2$$

mit einer Konstanten c . Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon}{dr} &= 2c \cdot r \\ dr &= \frac{d\epsilon}{2c} \\ r^2 dr &= \frac{r}{2c} d\epsilon = \frac{1}{2c\sqrt{c}} \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \end{aligned}$$

Einsetzen liefert

$$\int_{\epsilon_c}^{\infty} n(\epsilon) d\epsilon = 4\pi \frac{1}{2c\sqrt{c}} \int_{\epsilon_c}^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\epsilon/k_B T} d\epsilon.$$

Die Konstante c ergibt sich aus der Normierung auf die Gesamtatomzahl N . Man erhält

$$\begin{aligned} \int_{\epsilon_c}^{\infty} n(\epsilon) d\epsilon &= N \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(k_B T)^{3/2}} \int_{\epsilon_c}^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\epsilon/k_B T} d\epsilon \\ &= N \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\eta}^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx \\ &= N \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left([-\sqrt{x} e^{-x}]_{\eta}^{\infty} - \int_{\eta}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{x}} (-e^{-x}) dx \right) \\ &\simeq N \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\eta} e^{-\eta}. \end{aligned}$$

Das Integral in der vorletzten Zeile kann man für $\eta \gg 1$ vernachlässigen. Für den Fluß erhält man also jetzt:

$$\begin{aligned} \phi_{out} &= n \cdot \sigma \cdot \frac{1}{2} \bar{v} \sqrt{\pi \eta} \cdot N \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\eta} e^{-\eta} \\ &= n \cdot \sigma \cdot \bar{v} \cdot N \cdot \eta \cdot e^{-\eta} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\tau_{el}} \cdot N \cdot \eta \cdot e^{-\eta}. \end{aligned}$$

- Kühlgeschwindigkeit

Definiert man als Verdampfungszeit

$$\tau_{ev} := \frac{N}{\phi_{out}}$$

kann man das Ergebnis schreiben als:

$$\tau_{ev} = \tau_{el} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{e^\eta}{\eta}$$

Die Verdampfungszeit steigt also mit wachsender relativer Falltiefe η exponentiell an. Die zeitliche Änderung der Atomzahl ergibt sich aus

$$\dot{N} = -\phi = -\frac{N}{\tau_{ev}}$$

Die Atomzahl sinkt exponentiell. Alle anderen Größen kann man jetzt mit den Ergebnissen von oben auch als Funktion der Zeit bestimmen. Besonders interessiert uns die Phasenraumdicke. Mit

$$\frac{\Lambda}{\Lambda_0} = \left(\frac{N}{N_0} \right)^{1-\alpha(\delta+3/2)}$$

folgt

$$\begin{aligned} \frac{\dot{\Lambda}}{\Lambda_0} &= (1 - \alpha(\delta + 3/2)) \left(\frac{N}{N_0} \right)^{-\alpha(\delta+3/2)} \frac{\dot{N}}{N_0} \\ &= (1 - \alpha(\delta + 3/2)) \left(\frac{N}{N_0} \right)^{-\alpha(\delta+3/2)} \frac{N}{-\tau_{ev} N_0} \\ &= \frac{1}{-\tau_{ev}} (1 - \alpha(\delta + 3/2)) \left(\frac{N}{N_0} \right)^{1-\alpha(\delta+3/2)} \\ &= \frac{1}{-\tau_{ev}} (1 - \alpha(\delta + 3/2)) \frac{\Lambda}{\Lambda_0} \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} \dot{\Lambda} &= \gamma \Lambda \\ \Lambda(t) &= \Lambda_0 e^{\gamma t} \end{aligned}$$

mit der Wachstumsrate

$$\begin{aligned} \gamma &: = \frac{1}{\tau_{ev}} \cdot (\alpha(\delta + 3/2) - 1) \\ &= \frac{1}{\tau_{el}} \cdot \sqrt{2} \cdot \frac{\eta}{e^\eta} \left(\left(\frac{1}{3} \frac{\eta + \kappa}{\frac{1}{2} + \frac{1}{q}} - 1 \right) (\delta + 3/2) - 1 \right) \end{aligned}$$

Bei Vernachlässigung der kinetischen Energie ($\kappa = 0$) und in einer harmonischen Falle ($q = 2, \delta = 3/2$) hängt die Rate nur noch von der Falltiefe η und der elastischen Streurrate ab.

$$\gamma(\eta) = \frac{1}{\tau_{el}} \cdot \frac{\sqrt{2}\eta(\eta - 4)}{e^\eta}$$

Wir suchen das Maximum der Funktion $\gamma(\eta)$:

$$\begin{aligned}\frac{d\gamma(\eta)}{d\eta} &= 0 = \frac{1}{\tau_{el}} \cdot \frac{d}{d\eta} \left(\frac{\sqrt{2}\eta(\eta-4)}{e^\eta} \right) \\ &= \frac{1}{\tau_{el}} \cdot \sqrt{2} (-6\eta + 4 + \eta^2) e^{-\eta}.\end{aligned}$$

oder

$$0 = -6\eta + 4 + \eta^2.$$

oder

$$\eta = 3 + \sqrt{5} = 5.23$$

Für diesen Wert ist

$$\gamma = \frac{1}{\tau_{el}} \cdot 0.048$$

und

$$\alpha = \frac{1}{3} \frac{3 + \sqrt{5}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}} - 1 = \frac{1}{3} \sqrt{5} = 0.745$$

Man ist damit knapp unterhalb des "run away regimes".

- Kühldauer bis zur Entartung

Wie lange dauert es, bis die Phasenraumdichte um 6 Größenordnungen gewachsen ist?

$$\frac{\Lambda(T)}{\Lambda_0} = 10^6 = e^{\gamma T}$$

oder

$$T = \frac{13.8}{\gamma} = \frac{13.8}{0.048} \tau_{el} \simeq 300 \cdot \tau_{el}.$$

Die Kühlzeit beträgt ungefähr 300 elastische Stoßzeiten, was etwa 6 s sind. In der Praxis hat man allerdings während dieser 6 s Verluste durch Stöße mit dem Restgas. Das verringert die Kühleffizienz und verlängert die Kühlzeit, was wiederum die Verluste erhöht. Die beste Strategie ist daher möglichst bald mit hoher Kühleffizienz, d.h. großem η das run away regime zu erreichen, auch wenn das zunächst länger dauert. Ist das Regime erreicht holt man die Zeit wieder auf und man erreicht sehr schnell das entartete Regime. Die meisten Experimente arbeiten daher mit einem $\eta = 6..8$ und einem $\alpha > 1$. Die Kühlzeiten betragen 10 s – 30 s. Das erfordert sehr lange Speicherzeiten und extrem gutes Vakuum. Man ist sozusagen überall am "limit" und es ist ein Glücksfall, dass alle Parameter gerade so zusammen passen.

- Entartete Gase

Durch Verdampfungskühlen erreicht man Phasenraumdichten von 1 und mehr. Damit betritt man das Regime der Quantengase. Im Fall von ununterscheidbaren Bosonen

erhält man bei Phasenraumdicke 1 einem Phasenübergang zum so genannte Bose Einstein Kondensat. Dies ist eine Ansammlung von bis zu 10^6 Atomen, die sich alle in ein und demselben Zustand befinden und eine so genannte makroskopische Wellenfunktion bilden. Eine solch große Menge an Atomen kann man leicht durch Schattenwurf eines resonanten Laserstrahls nachweisen. Damit kann man Materiewellen regelrecht fotografieren und über längere Zeit in einer magnetischen oder optischen Falle speichern und manipulieren. Die Wechselwirkung zwischen den Atomen ist dabei vergleichsweise schwach. In sehr guter Näherung bleibt die makroskopische Wellenfunktion auch bei Wechselwirkung erhalten und kann mit einer Differentialgleichung beschrieben werden. Sie hat die Form einer nichtlinearen Schrödingergleichung, was zu einer Fülle von Effekten führt. Wir beginnen zunächst mit einem nicht wechselwirkenden Gas bei extrem niedrigen Temperaturen und betrachten den Phasenübergang zu einem Kondensat. Die Wechselwirkung wird dann im dritten Kapitel behandelt.

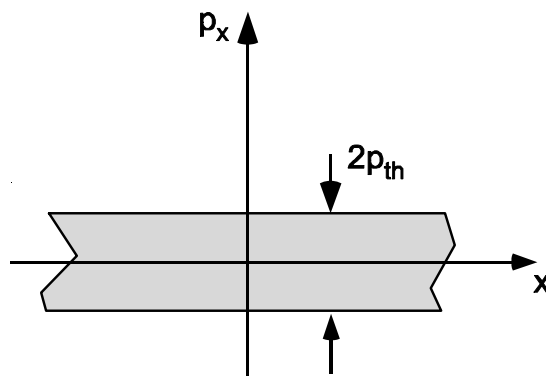
2. Bose-Gase

2.1. Phasenraumdicke

- Klassischer Phasenraum

Ein klassisches freies Teilchen hat 6 Freiheitsgrade: die drei Komponenten des Geschwindigkeitsvektors und drei Ortskoordinaten. Man kann den momentanen Zustand des Teilchens als Punkt im 6-dimensionalen Phasenraum auffassen. Bei einem idealen Gas besetzt jedes Teilchen einen bestimmten Punkt im Phasenraum. Im zeitlichen Verlauf wechselt das Teilchen den Punkt, entweder weil es sich im Ortsraum gleichmäßig fortbewegt, oder weil es durch einen Stoß seinen Geschwindigkeitsvektor ändert. Der einfachste Fall ist ein homogenes Gas. Es ist im Ortsraum bei konstanter Dichte unendlich ausgedehnt. Die Ausdehnung im Impulsraum hängt von der Temperatur des Gases ab:

$$\frac{p_{th}^2}{2m} := k_B T.$$



- Quantenmechanischer Phasenraum

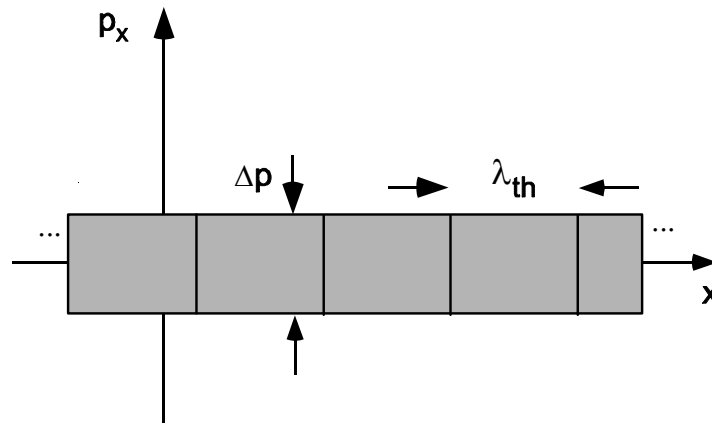
Aufgrund der Unschärferelation ist der Raumbereich, den das Teilchen einnimmt durch die Ausdehnung der Wellenfunktion $\Delta x \Delta y \Delta z$ gegeben. Entsprechend gilt für die Ausdehnung im Impulsbereich $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$. Der Zustand eines Teilchens ist keine Punkt im Phasenraum sondern ein Volumen der Größe h^3 : $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = h^3$. Der Phasenraum zerfällt also in Zellen.

- Entartung

Was geschieht, wenn man ein Gas immer weiter abkühlt? Die mittlere kinetische Energie pro Atom verringert sich. Die Ausdehnung im Impulsraum wird kleiner und es stehen immer weniger Zellen für eine feste Zahl von Teilchen zur Verfügung. Irgendwann gibt es weniger Zellen als Teilchen. Zwei oder mehr Teilchen müssen sich dieselbe Phasenraumzelle teilen. Das Gas heißt dann entartet. Bei ununterscheidbaren Teilchen erwartet man dramatische Effekte. Bei Fermionen verbietet das Pauliprinzip die Mehrfachbesetzung von Zuständen, d.h. Phasenraumzellen. Selbst bei $T = 0$ hat man dann immer noch eine Impulsverteilung und die Teilchen haben einen mittleren Impuls, den Fermiimpuls. Das Gas besitzt kinetische Energie selbst bei $T = 0$. Bei Bosonen ist Mehrfachbesetzung möglich und sogar bevorzugt. Die Teilchen kollabieren schlagartig in eine einzige Phasenraumzelle. Das ist die Bose-Einstein-Kondensation. Man erhält so bis zu 10^6 Atome alle im selben Quantenzustand. Man spricht von einem makroskopischen Quantenzustand.

- Thermische Wellenlänge

Der thermische Impuls ist durch die Temperatur gegeben. Mit Hilfe der Unschärferelation ergibt sich die mittlere Ortsausdehnung einer Phasenraumzelle.



$$\frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \Delta k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\Delta \lambda} \right)^2 = k_B T$$

$$\Delta\lambda = \sqrt{\frac{2\pi^2\hbar^2}{mk_B T}}$$

Man definiert die (fast gleiche) thermische Wellenlänge:

$$\lambda_{th} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$$

Sie ist ein Maß für die Größe der Wellenfunktion eines Atoms in einem Gas der Temperatur T .

- Kritische Phasenraumdichte

Für ein entartetes Gas überlappen die Wellenfunktionen benachbarter Atome. Die Anzahl der Zustände N_z im für die Atome zugänglichen Phasenraumvolumen ϕ ist

$$N_z = \frac{\phi}{h^3} = \frac{\phi_p V}{h^3}$$

bzw.

$$n_z = \frac{\phi_p}{h^3},$$

wobei n_z die Zustandsdichte ist und das Phasenraumvolumen als Produkt von Ort und Impulsanteil zerlegt wurde

$$\phi = \phi_p V.$$

Da das Impulsraumvolumen

$$\phi_p = \Delta p^3,$$

folgt:

$$n_z = \frac{p_{th}^3}{h^3} = \frac{1}{\lambda_{th}^3}.$$

An der Entartungsgrenze ist die Teilchendichte n gleich der Zustandsdichte n_z und man erhält

$$\lambda_{th}^3 n = 1.$$

Da $n^{-1/3}$ der Abstand d zwischen den Atomen ist, erhält man schließlich

$$\lambda_{th} = d.$$

Der Ausdruck

$$\Lambda := \lambda_{th}^3 n$$

heißt Phasenraumdichte. Entartung tritt ein, wenn die Phasenraumdichte größer ist als 1.

- Zahlen

In einem optischen gekühlten Gas erhält man: $T = 100\mu K$, $n = 10^{11} cm^{-3}$, $\Lambda = 10^{-6}$, $\lambda_{th} = 0.02\mu m$

In einem entarteten Gas ist: $T = 1\mu K$, $n = 10^{15} cm^{-3}$, $\Lambda > 1$, $\lambda_{th} = 2\mu m$

2.2 Bose-Einstein Kondensation

Bei der kritischen Temperatur erhält man für Bose-Gase einen Phasenübergang (Phase hier im thermodynamischen Sinn). Die Phasen der einzelnen atomaren Wellenfunktionen synchronisieren und es entsteht eine makroskopische Wellenfunktion. Sie bildet die neue thermodynamische Phase (analog etwa zum Wasser, zu dem der Dampf kondensiert). Welche Phase die Makroskopischen Wellenfunktion annimmt wird durch spontane Symmetriebrechung entschieden. Wir betrachten Einsteins Analyse des idealen Quantengases jetzt etwas genauer.

- Unterscheidbare Teilchen

Wir betrachten zunächst eine Anzahl von N nicht wechselwirkenden Atomen im thermischen Gleichgewicht. Wir fragen nach der Besetzungswahrscheinlichkeit eines Zustands im Energieintervall $(E, E + dE)$. Für ein Gas aus unterscheidbaren Teilchen gilt die Boltzmann-Statistik:

$$\begin{aligned}\rho(\epsilon)d\epsilon &= \exp(-(\epsilon - \mu)/kT) d\epsilon = \exp(\mu/kT) \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon \\ &= z \cdot \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon \\ z &: = \exp(\mu/kT)\end{aligned}$$

Die "Fugazität" z ist eine Abkürzung für den Ausdruck $\exp(\mu/kT)$. Das chemische Potential μ , ist der Lagrange-Parameter, mit dem die Verteilung auf die mittlere Gesamtteilchenzahl normiert wird:

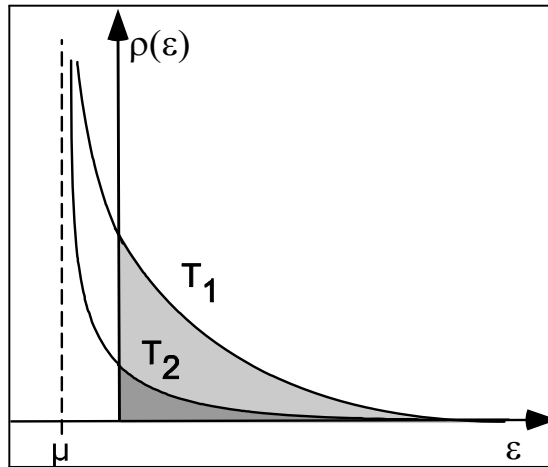
$$\bar{N} = \sum_j \rho(\epsilon_j)$$

Die Summe wird über alle Zustände gebildet (nicht zu verwechseln mit der Summe über alle Energien).

- Ununterscheidbare Teilchen

Für ununterscheidbare Bosonen gilt die Bose-Statistik:

$$\rho(\epsilon)d\epsilon = \frac{1}{\exp((\epsilon - \mu)/kT) - 1} d\epsilon = \frac{1}{z^{-1} \exp(\epsilon/kT) - 1} d\epsilon$$



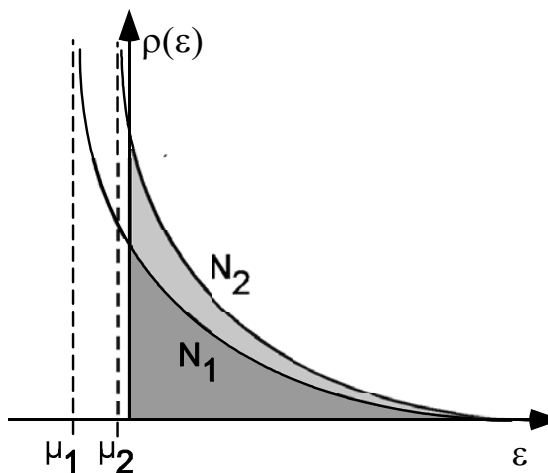
Die Fugazität z ist hier nicht einfach nur ein Vorfaktor. Anders als bei der Boltzmann-Verteilung ist jetzt das Besetzungsverhältnis zweier Energieniveaus auch von z abhängig, z kürzt sich nicht mehr heraus.

$$\frac{\rho(\epsilon_i)}{\rho(\epsilon_j)} \neq \frac{\exp(-\epsilon_i/kT)}{\exp(-\epsilon_j/kT)}$$

Die relative Besetzung der Niveaus hängt damit nicht nur von der Temperatur sondern auch von der Gesamtteilchenzahl ab!

- Erhöhung der Teilchenzahl bei konstanter Temperatur

Was geschieht, wenn wir uns dem entarteten Regime nähern, indem wir bei konstanter Temperatur die Teilchendichte erhöhen, also immer mehr Teilchen in die Falle füllen?



Um bei gleicher Temperatur mehr Teilchen unterzubekommen muss man das chemische Potential näher an die Null heranzufahren, denn dann wächst die Fläche der Verteilung im Bereich positiver Energien. Dabei vergrößert sich aber auch die relative Besetzung des Grundzustandes. Bei niedrigen Temperaturen erhöht sich der Effekt. Bei Erhöhung der Teilchenzahl wächst die Grundzustandsbesetzung also überproportional an. Ein kritischer Punkt ist erreicht, wenn das chemische Potential den maximalen Wert nämlich 0 erreicht hat.

- Maximale Teilchenzahl

Wir werden gleich feststellen, dass dann die Fläche unter der Verteilung durchaus endlich bleibt! Das bedeutet, dass die Verteilung nur eine endliche Anzahl von Teilchen enthalten kann. Für kleine Temperaturen ist die Fläche unter der Verteilung kleiner als für große Temperaturen und damit ist auch die maximale der Teilchenzahl für kleine Temperaturen kleiner. Senkt man also bei konstanter Teilchenzahl die Temperatur, oder erhöht man bei konstanter Temperatur die Teilchenzahl so gerät man in beiden Fällen irgendwann in einen Bereich in dem die tatsächliche Teilchenzahl größer ist als die maximale Teilchenzahl, die die Verteilung enthalten kann. Die überzähligen Teilchen gehen alle in den Zustand, der am wenigsten Energie kostet, nämlich den Grundzustand. Sie bilden das Bose-Einstein-Kondensat.

- Makroskopischer Zustand

Das ist um so spektakulärer als es normalerweise in einem homogenen Gas kein Teilchen bei einer festen Energie gibt sondern immer nur in einem Energieintervall. Ähnlich ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen an einem festen Punkt vorzufinden immer Null. Ein Punkt hat kein Volumen. In einem Kontinuum von Zuständen ist ein einzelner Zustand immer unbesetzt. Man kann nur von der Besetzung eines Intervalls reden. Hier ist das anders. Der Grundzustand als „Punkt“ in einem Kontinuum ist mit einer endlichen Teilchenzahl besetzt! Das ist das Wesen einer makroskopischen Zustandsbesetzung und der subtile Kern der Bose-Einstein-Kondensation. In einer realen Situation ist das Gas natürlich immer in einem Behälter mit diskreten Energiezuständen gefangen. Puristen streiten daher ab, dass es die Bose-Einstein-Kondensation im strengen Sinne wirklich gibt. Wenn allerdings der energetische Abstand benachbarter Niveaus kleiner ist als die experimentell realisierbare Energieauflösung wird der Streit akademisch.

- Kritische Teilchenzahl in einer harmonischen Falle

Einstein hat ein homogenes Gas betrachtet. Wir führen die Rechnung jedoch gleich für ein Gas in einem parabolischen Potential durch. Die mittlere Teilchenzahl erhält man durch Summation über alle Zustände j :

$$\bar{N} = \sum_j \frac{1}{z^{-1} \exp(\epsilon_j/kT) - 1}$$

Man kann die Summe in eine Summe über alle Energieniveaus umwandeln wenn man den Entartungsgrad berücksichtigt

$$\bar{N} = \sum_{\epsilon_n} g(\epsilon_n) \frac{1}{z^{-1} \exp(\epsilon_n/kT) - 1}$$

Der Entartungsgrad des j-ten Einteilchen-Energieniveaus in einer parabolischen Falle ist

$$g_n = \frac{1}{2} (n+1)(n+2) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right)^2$$

Da der Grundzustand, $\epsilon_0 = 0$, nach der Einsteinschen Hypothese eine besondere Rolle spielt, nehmen wir ihn aus der Verteilung heraus und schreiben

$$\bar{N} = \frac{1}{z^{-1} - 1} + \sum_{\epsilon_n \neq 0} \frac{g_n}{z^{-1} \exp(\epsilon_n/kT) - 1}$$

Bei genügend dicht liegenden Energieniveaus kann man die Summe durch eine Integral ersetzen.

$$\sum_{\epsilon \neq 0} \rightarrow \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty d\epsilon,$$

und man erhält den Ausdruck

$$\begin{aligned} G(z) &: = \sum_{\epsilon_n \neq 0} \frac{g_n}{z^{-1} \exp(\epsilon_n/kT) - 1} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{1}{z^{-1} \exp(\epsilon/kT) - 1} d\epsilon \\ &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{x^2}{z^{-1} \exp(x) - 1} dx \\ &= \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \varsigma_3(z) \end{aligned}$$

mit der Funktion

$$\varsigma_3(z) := \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{x^2}{z^{-1} \exp(x) - 1} dx.$$

Die Funktion $\varsigma_3(z)$ ist eine monoton wachsende Funktion von z und für alle endlichen Temperaturen wohldefiniert. Man erhält also für die mittlere Gesamtatomzahl den Ausdruck:

$$\bar{N} = N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \varsigma_3(z)$$

Im entarteten Regime ist das chemische Potential μ Null und damit $z = 1$. Damit ergibt sich:

$$\bar{N} = N_0 + \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \varsigma_3(1)$$

oder

$$N_0 = \bar{N} - \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \varsigma_3(1)$$

mit

$$\varsigma_3(1) = 1.202.$$

- Kritische Temperatur

Dies ist der Zusammenhang zwischen Gesamtatomzahl, Kondensatsatomzahl, Temperatur und Fallenfrequenz. Die Grundzustandsbesetzung muss eine positive Zahl sein, d.h. die Gleichung macht nur Sinn für Temperaturen unterhalb einer kritischen Temperatur T_c , bei der die Kondensatsatomzahl nicht negativ also mindestens Null ist. Bei der kritischen Temperatur ist das gerade der Fall

$$0 = \bar{N} - \left(\frac{kT_c}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \varsigma_3(1)$$

oder

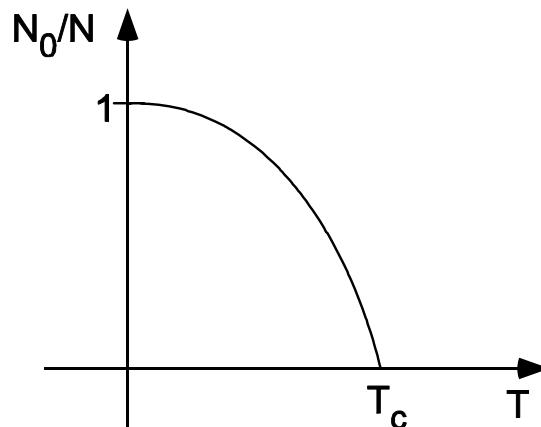
$$\begin{aligned} kT_c &= \hbar\omega N^{1/3} \cdot (\varsigma_3(1))^{-1/3} \\ &= \hbar\omega N^{1/3} \cdot 0.941. \end{aligned}$$

bzw.

$$T_c = 0.941 \frac{\hbar\omega}{k_B} N^{1/3}$$

Für kleinere Temperaturen wächst die Kondensatsatomzahl und man erhält für die relative Besetzung des Grundzustandes den Ausdruck:

$$\begin{aligned} \frac{N_0}{\bar{N}} &= 1 - \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^3 \cdot \varsigma_3(1) \frac{1}{\bar{N}} \cdot \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \\ &= 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3. \end{aligned}$$



3. Gross-Pitaevskii-Gleichung

Ein wechselwirkendes Bosegas kann man mit der Gross-Pitaevskii-Gleichung beschreiben, die wir jetzt herleiten.

3.1 Vielteilchen-Hamilton und Bogoliubov Näherung

- Vielteilchen Hamilton Operator

Der Hamiltonoperator für ein Vielteilchensystem lautet in zweiter Quantisierung

$$H = \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{trap}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) U(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t) d\vec{r}$$

mit der Masse des einzelnen Teilchens m , dem Fallenpotential $V(\vec{r})$ und dem Zweiteilchen-Wechselwirkungspotential $U(\vec{r} - \vec{r}')$. Der Faktor $1/2$ vor dem Integral korrigiert die Tatsache, dass man bei der Aufstellung der Wechselwirkungsenergie bei der Integration jedes Teilchen doppelt zählt. Der Feldoperator $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ gehorcht der Vertauschungsrelation

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \right] &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] &= \left[\hat{\Psi}^+(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \right] = 0 \end{aligned}$$

Er ist die Summe der Einteilchenoperatoren

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) := \sum \hat{\Psi}_n(\vec{r}, t) = \sum a_n(t) \Psi_n(\vec{r}, t)$$

mit den Wellenfunktionen $\Psi_n(\vec{r}, t)$ und den Vernichtungsoperatoren $a_n(t)$.

- Heisenberg-Gleichung

Um die Zeitentwicklung des Feldoperators zu ermitteln, benutzen wir die Heisenberg-Gleichung.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), H \right]$$

Mit

$$H = \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' + \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) U(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' d\vec{r}''$$

schreibt sich der Kommutator für den ersten Term als

$$\begin{aligned}
& \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' \right] \\
&= \int \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] d\vec{r}' \\
&= \int \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' - \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) d\vec{r}' \\
&= \int \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' - \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' \\
&= \int \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \right] H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' \\
&= H_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t).
\end{aligned}$$

In der dritten Zeile wird verwendet das $\left[\hat{\Psi}(\vec{r}', t), \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right] = 0$ (siehe oben) und dass H_0 nur auf r' wirkt, nicht aber auf r .

Entsprechend kann man den Kommutator

$$\int \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) \right] U(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' d\vec{r}''$$

des Wechselwirkungsterms auswerten:

$$\begin{aligned}
& \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) \right] \\
&= \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) - \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \\
&= \left(\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) - \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \\
&= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) + \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \left(\hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) - \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right) \\
&= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) + \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \delta(\vec{r} - \vec{r}'')
\end{aligned}$$

Für das Integral erhält man somit

$$\begin{aligned}
& \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) U(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' d\vec{r}'' \\
&+ \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) \delta(\vec{r} - \vec{r}'') U(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}'', t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' d\vec{r}'' \\
&= \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}'', t) U(\vec{r}'' - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}'', t) d\vec{r}'' \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \\
&+ \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) U(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}'
\end{aligned}$$

Da das Wechselwirkungspotential für ununterscheidbare Teilchen symmetrisch unter Teilchenvertauschung ist, also $U(\vec{r} - \vec{r}') = U(\vec{r}' - \vec{r})$ erhält man schließlich den Ausdruck

$$2 \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) U(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' \hat{\Psi}(\vec{r}, t),$$

und die Heisenberggleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) + \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}', t) U(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) d\vec{r}' \right) \hat{\Psi}(\vec{r}, t)$$

- Bogoliubov Näherung und makroskopische Wellenfunktion

Für viele Teilchen wird der Kommutator zunehmend bedeutungslos. Der Erwartungswert zum Beispiel des Teilchenzahloperators $\int \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle d\vec{r} = N$ unterscheidet sich vom Operator $\int \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^+(\vec{r}, t) \rangle d\vec{r}$ nur durch den Erwartungswert des Kommutators $\int \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}') \rangle d\vec{r} = 1$. Für große N ist das vernachlässigbar. Damit ist die Nichtkommutativität des Feldoperator nicht mehr bedeutend und man kann statt dessen auch eine komplexwertige Funktion verwenden. So motiviert man den folgenden Ansatz für den Feldoperator

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t) + \Delta \hat{\Psi}(\vec{r}, t).$$

Die komplexe Funktion $\phi(\vec{r}, t) = \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle$ ist der Erwartungswert des Feldoperators bezüglich des Zustands in dem sich das System befindet (und den man nicht kennt).

Integriert man das Betragsquadrat über den ganzen Raum erhält man die Gesamtteilchenzahl:

$$\begin{aligned} \int \langle \hat{\Psi}^+(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle d\vec{r} &= N \\ \int |\phi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} &= N \end{aligned}$$

Das Betragsquadrat der Funktion $\phi(\vec{r}, t)$ kann man daher als Teilchendichte interpretieren

$$n(\vec{r}, t) = |\phi(\vec{r}, t)|^2.$$

Die Funktion hat aber auch, wie eine normale Wellenfunktion, eine komplexe Phase und ist daher interferenzfähig.

$$\phi(\vec{r}, t) = \sqrt{n(\vec{r}, t)} e^{i\varphi(\vec{r}, t)}$$

Man nennt sie daher auch "makroskopische Wellenfunktion".

Der zweite, operatorwertige Teil des Feldoperators $\Delta \hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ soll die Fluktuationen um den Mittelwert beschreiben also die Quantenfluktuationen, in denen sich der Teilchencharakter bemerkbar macht. Er wird in der Bogoliubov-Näherung vernachlässigt also

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) \simeq \phi(\vec{r}, t).$$

- Kontaktpotential

Wie wir später sehen, kann man das Potential für die Wechselwirkung zwischen den Teilchen als Deltafunktion schreiben

$$U(r - r') = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Diesen Potentialtyp nennt man Kontaktpotential, da er nur wirkt, wenn die Teilchen an der selben Stelle sitzen, sich also berühren. Seine Stärke wird durch die so genannte Streulänge a bestimmt über die wir später noch sprechen. Für Rubidium ist $a \simeq 5$ nm, also etwa hundert Bohrradien. Für positive Streulängen ist die Wechselwirkung repulsiv. Die Streulänge kann auch negativ werden wie. z.B. bei ${}^7\text{Li}$. Das Potential ist dann attraktiv. Wir betrachten zunächst nur repulsive Wechselwirkung, also $a > 0$. Den Vorfaktor vor der Deltafunktion kürzt man ab und nennt ihn Kopplungskonstante

$$g := \frac{4\pi\hbar^2}{m} a$$

- Gross-Pitaevskii Gleichung

Die Heisenberggleichung lautet also in Bogoliubov-Näherung und mit Kontaktpotential:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{trap}}(\vec{r}) + g \int \phi^\dagger(\vec{r}', t) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \phi(\vec{r}', t) d\vec{r}' \right) \phi(\vec{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{trap}}(\vec{r}) + g |\phi(\vec{r}, t)|^2 \right) \phi(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Dies ist die Gross-Pitaevskii-Gleichung, mit der sich ein Kondensat sehr gut beschreiben lässt. Sie sieht aus wie eine Schrödingergleichung für eine Wellenfunktion $\phi(\vec{r}, t)$, die aber auf die Gesamtatomzahl normiert ist. Neben dem Fallenpotential hat man noch einen Wechselwirkungsterm, der selber die Wellenfunktion enthält. Die Differentialgleichung ist also nichtlinear. Dieser Gleichungstyp heißt daher "nichtlineare Schrödingergleichung". Man kennt sie aus der nichtlinearen Optik. Dort beschreibt sie Materialien mit intensitätsabhängigem Brechungsindex. Der Zusammenhang ist kein Zufall (siehe Abschnitt 4.3).

3.2 Stationäre Lösungen

- Stationäre GP-Gleichung

Wie bei der Behandlung der Schrödingergleichung kann man die Zeitabhängigkeit durch Variablentrennung abseparieren. Der Ansatz

$$\phi(\vec{r}, t) = e^{-i\mu/\hbar t} \phi(\vec{r})$$

liefert die stationäre GP-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{trap}(\vec{r}) + g |\phi(\vec{r})|^2 \right) \phi(\vec{r}) = \mu \phi(\vec{r})$$

- GP-Gleichung und Energie

Wir multiplizieren von links mit $\phi^*(\vec{r})$ und integrieren über den Raum:

$$\int \phi^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{trap}(\vec{r}) + g |\phi(\vec{r})|^2 \right) \phi(\vec{r}) d\vec{r} = \int \phi^*(\vec{r}) \mu \phi(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$E_{kin} + E_{trap} + 2E_{WW} = \mu N$$

Der Faktor 2 vor E_{WW} berücksichtigt die Doppelzählung bei der Integration über die δ -Funktion bei der Berechnung des Wechselwirkungsterms.

- Chemisches Potential im homogenen Gas

Wir betrachten das Gas in einem Kastenpotential mit Volumen V , also für

$$V_{trap}(\vec{r}) = 0.$$

Wir nehmen an, dass die Wellenfunktion dann auch räumlich homogen ist, also

$$\phi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{N}{V}}.$$

Nur die Wechselwirkung zwischen den Atomen liefert dann einen von Null verschiedenen Beitrag zur Gesamtenergie:

$$E_{kin} = - \int \phi^*(\vec{r}) \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi(\vec{r}) d\vec{r} = - \int \sqrt{\frac{N}{V}} \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \sqrt{\frac{N}{V}} d\vec{r} = 0$$

$$E_{pot} = \int \phi^*(\vec{r}) V_{trap}(\vec{r}) \phi(\vec{r}) d\vec{r} = 0$$

$$E_{ww} = \frac{1}{2} \int \phi^*(\vec{r}) g |\phi(\vec{r}, t)|^2 \phi(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{2} g \int \sqrt{\frac{N}{V}} |\phi(\vec{r}, t)|^2 \sqrt{\frac{N}{V}} d\vec{r}$$

$$= \frac{1}{2} g \frac{N}{V} \int |\phi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \frac{gN^2}{2V}$$

Die gesamte innere Energie steckt also in der Wechselwirkung

$$U := E_{WW} = \frac{gN^2}{2V}$$

Vergleich mit der Energiegleichung oben

$$2E_{WW} = \mu N$$

liefert für μ den Wert

$$2 \left(\frac{gN^2}{2V} \right) = \mu N$$
$$\mu = g \frac{N}{V}$$

Das Chemische Potential ist in der Thermodynamik definiert als

$$\frac{dU}{dN} = \frac{d}{dN} \left(\frac{gN^2}{2V} \right) = g \frac{N}{V} = \mu$$

Die Separationsvariable μ ist für ein homogenes Gas also gerade das chemische Potential.

- Zustandsgleichung im homogenen Gas

Der Druck ist definiert als

$$p = -\frac{dU}{dV} = -\frac{d}{dV} \left(\frac{gN^2}{2V} \right) = \frac{g}{2} \left(\frac{N}{V} \right)^2 = \frac{g}{2} n^2$$

Dies ist die Zustandsgleichung für ein wechselwirkendes, homogenes Bose-Gas bei $T = 0$ und von der idealen Gasgleichung völlig verschieden.

- Kompressibilität und Schallgeschwindigkeit im homogenen Gas

Die adiabatische Kompressibilität eines Gases (konstante Entropie) ist

$$\kappa := -\frac{1}{V} \frac{dV}{dp}$$

Mit

$$\frac{dV}{dp} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{g}{2}} N p^{-3/2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{g}{2}} N \left(\frac{g}{2} \left(\frac{N}{V} \right)^2 \right)^{-3/2} = \frac{1}{g} \frac{V^3}{N^2}$$

erhält man

$$\kappa = \frac{1}{g} \left(\frac{V}{N} \right)^2 = \frac{1}{gn^2}$$

Die Schallgeschwindigkeit ergibt sich daraus zu

$$c = \frac{1}{\sqrt{\kappa \rho}}$$

wobei

$$\rho = m \frac{N}{V}$$

die Massendichte ist. Also lautete die Schallgeschwindigkeit

$$c = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{g} \left(\frac{V}{N}\right)^2 m \frac{N}{V}}} = \sqrt{\frac{g}{m} \frac{N}{V}} = \sqrt{\frac{g}{m} n}$$

Dichteschwankungen breiten sich im homogenen Gas mit konstanter Geschwindigkeit c aus, die mit der Wurzel der Teilchendichte wächst.

- Ausheillänge im inhomogenen Gas

An der Kante eines Kastenpotentials kann das Kondensat nicht plötzlich aufhören, da sonst die Wellenfunktion eine unendliche Krümmung hätte mit entsprechend unendlicher kinetischer Energie. Das Kondensat muss also kontinuierlich auf Null abfallen. Wir betrachten testweise einen exponentiellen Abfall in x -Richtung bei sonst homogener Verteilung in y - und z -Richtung

$$\phi(\vec{r}) = \phi_0 e^{-x/x_0},$$

mit einer charakteristischen Länge x_0 des Abfalls. Der Erwartungswert der damit verbundene kinetischen Energiedichte lautet

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{kin} \rangle &= \phi_0 e^{-x/x_0} \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_0 e^{-x/x_0} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} |\phi_0|^2 e^{-x/x_0} \frac{1}{x_0^2} e^{-x/x_0} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{x_0^2} |\phi(\vec{r})|^2 \end{aligned}$$

Andererseits möchte sich das Kondensat bei repulsiver Wechselwirkung zwischen den Atomen möglichst weit ausbreiten und der Kante möglichst genau folgen. Die Wechselwirkungsenergie können wir ausrechnen zu

$$\langle \varepsilon_{WW} \rangle = g \phi_0 e^{-x/x_0} |\phi_0 e^{-x/x_0}|^2 \phi_0 e^{-x/x_0} = g |\phi(\vec{r})|^4$$

Im Gleichgewicht sind kinetische Energie und Wechselwirkungsenergie gleich.

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{kin} \rangle &= \langle \varepsilon_{WW} \rangle \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{x_0^2} |\phi(\vec{r})|^2 &= g |\phi_0 e^{-x/x_0}|^4 \\ x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{2gm |\phi(\vec{r})|^2}} = \sqrt{\frac{1}{8\pi a \cdot |\phi(\vec{r})|^2}} \end{aligned}$$

Wenn man die Dichte des Gases im exponentiellen Abfall durch die Dichte im homogenen Teil des Kondensats ersetzt also

$$|\phi(\vec{r})|^2 \rightarrow |\phi_0|^2$$

kommt man zur so genannten "Ausheillänge"

$$\xi := \frac{1}{\sqrt{8\pi a \cdot |\phi_0|^2}}$$

Da

$$|\phi(\vec{r})|^2 < |\phi_0|^2$$

folgt dass

$$x_0 > \xi.$$

Die Ausheillänge ist also die kürzeste räumliche Skala, auf der sich die Dichte des Kondensats verändern kann. Strukturen unterhalb der Ausheillänge sind im Kondensat nicht möglich. Zwingt man sie dem Kondensat dennoch auf, wird es zerstört und die Beschreibung durch die GP-Gleichung bricht zusammen. Typische Ausheillängen liegen im Bereich einiger 100 nm. In einem optischen Gitter kann die Gitterkonstante kleiner als die Ausheillänge werden und man muss zu einer neuen Beschreibung übergehen (Bose-Hubbard-Modell).

- Thomas Fermi Näherung im Fallenpotential

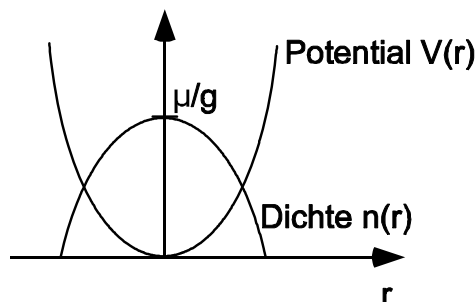
Für genügend viele Atome, die sich alle gegenseitig abstoßen, wächst das Kondensat an und wandert das Fallenpotential hoch. Sowohl die Wechselwirkungsenergie steigt als auch die potentielle Energie. Die kinetische Energie hingegen wächst nicht mit. Man kann also näherungsweise die kinetische Energie ganz streichen und erhält

$$(V_{trap}(\vec{r}) + g|\phi(\vec{r})|^2)\phi(\vec{r}) \simeq \mu\phi(\vec{r})$$

Dies ist eine rein algebraische Gleichung. Sie kann unmittelbar nach der Dichte aufgelöst werden.

$$|\phi(\vec{r})|^2 \simeq \frac{1}{g}(\mu - V_{trap}(\vec{r})).$$

Dies ist die Thoms Fermi Näherung für die Wellenfunktion. Die Dichte spiegelt direkt das Potential wider. In einer harmonischen Falle erhält man eine Dichteverteilung entsprechend einer invertierten Parabel.



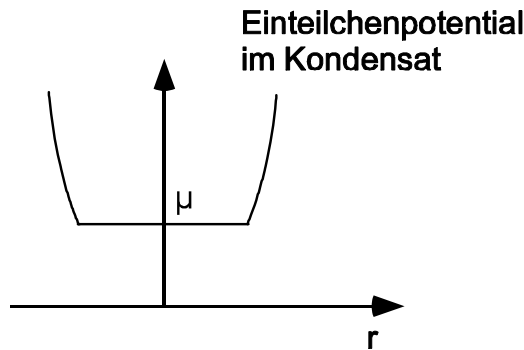


Figure 1:

Am Rand fällt die Dichte gemäß der Ausheillänge ab. Hier ist die atomare Dichte klein und die Thomas Fermi Näherung nicht sinnvoll. Durch Integration über die Dichte kann man das chemische Potential mit der Teilchenzahl in Verbindung bringen. Man erhält

$$\mu = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{15Na}{x_0} \right)^{2/5}$$

Für die Phase der Wellenfunktion nimmt die Thomas Fermi Näherung an, dass sie überall im Kondensat gleich ist. Die Thomas Fermi Näherung ist für atomare Kondensate in magnetischen Fallen sehr gut erfüllt.

- Einteilchenpotential

Ein Teilchen bewegt sich im Fallenpotential und im gemeinsamen Wechselwirkungspotential aller anderen Teilchen, das die Parabel der Falle gerade kompensiert. Innerhalb des Kondensats ist ein einzelnes Atom also frei.

- Attraktive Wechselwirkung

Für negative Streulängen, d.h. anziehende Wechselwirkung zieht sich das Kondensat zusammen und man kann die kinetische Energie nicht mehr vernachlässigen. Tatsächlich ist sie sehr wichtig um das Kondensat zu stabilisieren, das sonst einfach immer kleiner würde, bis die Dichte genügend hoch für Dreikörperstöße wird. Es können sich dann Moleküle bilden und das Kondensat macht das, was ein normales Gas macht, wenn es kalt wird: es kondensiert und wird schließlich fest. Mit Hilfe der kinetischen Energie lässt sich das verhindern. Um das zu sehen, benutzen wir die freie Gross-Pitaevskii-Gleichung und nehmen als Lösung irgendeine räumlich begrenzte kugelsymmetrische Funktion $\phi(r)$ mit einem Radius Δr an. Damit kann man die

Erwartungswerte für die kinetische und die Wechselwirkungsenergie abschätzen:

$$\left\langle -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right\rangle \simeq -\frac{\hbar^2}{2m \Delta r^2}$$

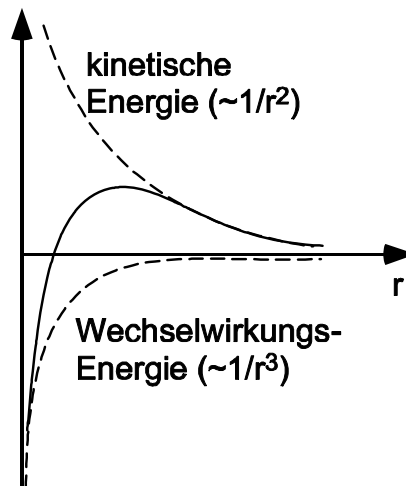
und

$$\langle g |\psi(r, t)|^2 \rangle = gn(r) \simeq g \frac{N}{V} = g \frac{N}{\frac{4}{3}\pi \Delta r^3}$$

Damit lautet die Energie

$$\langle E \rangle \simeq -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Delta r^2} + N \frac{g}{\frac{4}{3}\pi \Delta r^3}.$$

Trägt man die Energie als Funktion der Kondensatsgröße Δr auf, so erhält man



Unterschreitet das Kondensat eine bestimmte Größe, so kann es Energie gewinnen, wenn es noch kleiner wird. Das Kondensat kollabiert. Dies geht aber nur, wenn die Atomzahl genügend groß ist. Bildet man die Ableitung

$$\frac{d\langle E \rangle}{d\Delta r} \simeq 2 \frac{\hbar^2}{2m \Delta r^3} - 3N \frac{|g|}{\frac{4}{3}\pi \Delta r^4},$$

so ergibt sich das Maximum bei

$$0 = 2 \frac{\hbar^2}{2m \Delta r^3} - \frac{9}{4\pi} N \frac{|g|}{\Delta r^4}$$

$$N = \frac{4\pi \Delta r \hbar^2}{9 |g| m}.$$

Für den Radius kann man jetzt noch den des quantenmechanischen Einteilchen-Grundzustand einer harmonischen Falle annehmen, in der das Kondensat gefangen ist

$$\Delta r = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

und erhält eine kritische Atomzahl

$$\begin{aligned} N_c &= \frac{4\pi}{9} \frac{\hbar^{5/2}}{\omega^{1/2} |g| m^{3/2}} \\ &= \frac{2\pi}{9} \frac{1}{|a|} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}, \end{aligned}$$

ab der das Kondensat zusammenfällt. Für ${}^7\text{Li}$ mit einer Streulänge von $a = -28a_0$ und in einer Falle mit der Fallenfrequenz von $\omega = 2\pi \cdot 150\text{Hz}$ erhält man $N_c = 1542$. Experimentell beobachtet man einen Zusammenbruch bei $N < 1300$. Die Abschätzung ist also ziemlich gut. Genauere Werte erhält man, wenn man eine realistische Funktion für die Form des Kondensats annimmt. Macht man die Falle flacher, steigt auch die kritische Atomzahl und man bekommt größere Kondensate.

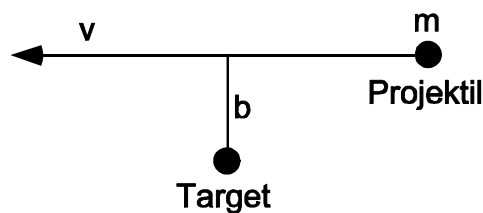
4. Mikroskopische Beschreibung der Wechselwirkung im Kondensat

4.1 s-Wellen-Stöße

- Stoßparameter und Drehimpuls

Wir betrachten Zweikörperstöße mit sphärischem Wechselwirkungspotential, das also nur vom Abstand der Stoßpartner abhängt. Den Stoßparameter b zwischen Projektil der Geschwindigkeit v und Target kann man mit dem Drehimpuls L in Verbindung bringen:

$$L = m \cdot v \cdot b.$$



Der Drehimpuls ist für rotationssymmetrische Wechselwirkungspotentiale während des Stoßes eine Erhaltungsgröße. Nimmt man an, dass für einen Stoß die Reichweite r_e des Wechselwirkungspotentials mindestens so groß sein sollte wie der Stoßparameter, also

$$r_e > b,$$

kann man eine Grenze für die beteiligten Drehimpulse angeben.

$$L < m \cdot v \cdot r_e.$$

Je kleiner die Temperatur, umso langsamer sind die Atome und umso kleiner ist der Drehimpuls der Projektile, die noch stoßen. Da der Drehimpuls quantisiert ist gilt

$$L = m_l \cdot \hbar < m \cdot v \cdot r_e.$$

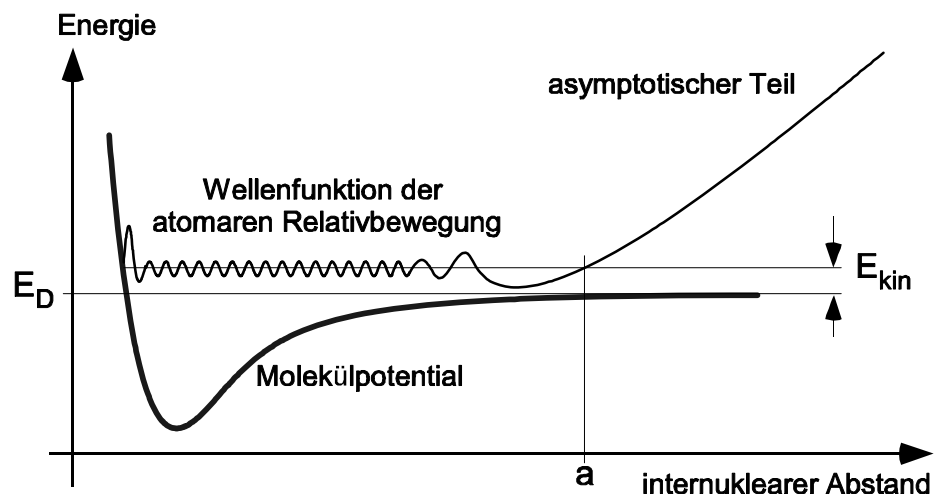
Falls der Drehimpuls der Stoßpartner \hbar unterschreitet

$$m \cdot v \cdot r_e < \hbar$$

spüren nur Projektile mit Drehimpuls Null das Streupotential. Die Wellenfunktion der Relativbewegung hat keine Winkelabhängigkeit mehr sondern hängt nur noch vom Ort ab. Dies sind die s-Wellen Stöße, die wir jetzt genauer betrachten.

- Streupotential

Die Atome wechselwirken mit einem Potential, wie man es für Dimere aus der Molekülphysik kennt.



Es ist nur vom Abstand der beiden Atome abhängig.

$$U = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Es gibt auch einen kleinen spinabhängigen Anteil aufgrund der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung abhängig zwischen den beiden Valenzelektronen des Alkaliatoms. Diesen Anteil kann man aber in sehr guter Näherung vernachlässigen. Für ein Zentralpotential schreibt man die Wellenfunktion am besten in Kugelkoordinaten

$$\psi(\vec{r}) = Y(\varphi, \theta)R(r).$$

Die Wellenfunktion ist eine s-Welle

$$Y_{00}(\varphi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

und es gibt keine Winkelabhängigkeit. Es bleibt eine Kugelwelle

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R(r).$$

Das Paar ist nicht gebunden, hat also eine positive Energie oberhalb der Dissoziationsgrenze

$$E = E_{kin} > E_D.$$

Bei großen Abständen wirkt hauptsächlich das van der Waals Potential.

- Asymptotische Lösung und Streulänge

Bei asymptotisch großen Abständen wo das Potential verschwindet, erhält man ein rein sinusförmige Kugelwelle

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0 \frac{1}{r} \sin(kr + \varphi) = \psi_0 \frac{1}{r} \sin(k(r - a)).$$

Die Phase φ der Kugelwelle wird mit Hilfe der Streulänge a ausgedrückt, die wir jetzt korrekt definieren können

$$a := -\frac{\varphi}{k}$$

Ihren Wert muss man mit Hilfe des Potentials berechnen oder messen. Eine positive Streulänge entspricht also einer Verschiebung des Schnittpunktes mit der x-Achse nach rechts.

- Typische Abstände

Bei kleineren Abständen wird die Relativbewegung durch das Wechselwirkungspotential beschleunigt und die Wellenlänge verkürzt sich entsprechend. Dieser Bereich entspricht der Reichweite des Potentials r_e . Sie ist viel kleiner als die Wellenlänge im asymptotischen Bereich.

$$r_e \ll \lambda$$

Die Wellenfunktion ist also zum ganz überwiegenden Teil eine langwellige Kugelwelle mit kleiner Wellenzahl k . Dazu kommt ein winziger Anteil der bei kleinsten Abständen schnell oszilliert. Die Atome befinden sich also die meiste Zeit bei Abständen, für die die Wellenfunktion als asymptotische Kugelwelle beschrieben werden kann. Im entarteten Regime ist der Teilchenabstand d kleiner als die Wellenlänge. Typische Werte für die Streulänge liegen zwischen Potentialreichweite und Teilchenabstand

$$r_e \ll a \ll d \ll \lambda$$

Typische Zahlenwerte bezogen auf den Bohrradius $a_0 \simeq 0.5 \cdot 10^{-10}$ m sind

$$(r_e \simeq a_0) \ll (a \simeq 100a_0) \ll (d \simeq 10^4 a_0) < (d \simeq 10^5 a_0)$$

- Streuphase

Für elastische s-Wellen-Stöße ändert sich die Energie nicht. Die Wellenzahl der asymptotisch auslaufenden Wellen ist also gleich der asymptotisch einlaufenden Kugelwelle.

$$k_{in} = k_{out}$$

Ist der Stoß außerdem verlustfrei, ändert sich auch die Amplitude der asymptotischen Kugelwellen nicht.

$$\psi_{in} = \psi_{out}$$

Es kann sich also nur die Phase der Wellen ändern

$$\varphi_{in} \neq \varphi_{out}$$

Es entsteht eine Stehwelle mit variabler Phase

$$\varphi = -ka.$$

4.2 Pseudopotential und Streulänge

- Pseudopotential

Die Wechselwirkung macht sich in sehr guter Näherung nur durch die Streulänge bemerkbar und man kann die Wirkung des komplizierten Molekülpotentials durch diese einzige reelle Zahl beschreiben. Formal kann man dem Rechnung tragen, indem man das Molekülpotential durch eine δ -Funktion ersetzt.

$$V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = 4\pi a \cdot \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$

Die ist ein so genanntes "Pseudopotential". In diesem Abschnitt leiten wir diesen Ausdruck her.

- Schrödingergleichung für ein freies Atompaar in einer harmonischen Falle

Der Hamilton für zwei gleiche Teilchen in einer harmonische Falle lautet

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r_2^2$$

Wir drücken die Orte in Schwerpunktskoordinaten und Relativkoordinaten aus:

$$\begin{aligned} r_1 &= R + \frac{r}{2} \\ r_2 &= R - \frac{r}{2} \\ r &:= r_1 - r_2 \\ R &:= \frac{mr_1 + mr_2}{m + m} = \frac{r_1 + r_2}{2} \end{aligned}$$

Mit

$$r_1^2 + r_2^2 = \left(R + \frac{r}{2}\right)^2 + \left(R - \frac{r}{2}\right)^2 = 2R^2 + \frac{1}{2}r^2$$

erhält man

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(2R^2 + \frac{1}{2}r^2\right) \\ &= \left(\frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 R^2\right) + \left(\frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2\right) \\ &= H_R + H_r \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} M &= m_1 + m_2 = 2m \\ \mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2} \end{aligned}$$

Die Schwerpunktsbewegung ist also harmonisch gefangen. Die Relativbewegung spürt ein harmonisches Potential.

- Wechselwirkung

Zum äußeren Potential kommt eine Zentralpotential $V(r)$ aufgrund der Wechselwirkung zwischen den Atomen. Der Hamilton für die Relativbewegung lautet also

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

Für genügend flache Fallen und genügend kleinen Abständen zwischen den Atomen kann man das Fallenpotential vernachlässigen. Die resultierende stationäre Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right)\psi = E\psi$$

lässt sich schreiben als

$$(\nabla^2 + k^2 - U(r))\psi = 0$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} k^2 &: = \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot E \\ U(r) &: = \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot V(r). \end{aligned}$$

- s-Wellen

Für s-Wellen gibt es keine Winkelabhängigkeit und man kann einen allgemeinen Ansatz machen, der nur von r abhängt.

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} u(r)$$

Das Target sieht das Projektil also als Kugelwelle von allen Seiten gleichzeitig auf sich zukommen. Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + k^2 \frac{1}{r} u(r) - U(r) \frac{1}{r} u(r) - 4\pi \delta(r) u(r) = 0$$

Hier wurde verwendet, dass

$$\nabla^2 \frac{1}{r} u(r) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - 4\pi u(r) \delta(r)$$

- Pseudopotential und Randbedingung

Bei allen Abständen r muss die Funktion u also die Gleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + k^2 u(r) - U(r) u(r) = 0$$

erfüllen. An $r = 0$ muss außerdem gelten,

$$4\pi u(r) \delta(r) = 0$$

d.h.

$$u(0) = 0.$$

Die Deltafunktion erzwingt eine Randbedingung für u , die nur eine bestimmte Menge von Lösungen erlaubt. In der Schrödingergleichung erscheint sie aber wie ein zusätzliches Potential

$$U_{pseudo} = 4\pi \delta(r)$$

Solche Potentiale heißen Pseudopotentiale. Sie bieten die Möglichkeit, Randbedingungen in eine Differentialgleichung einzubauen und dadurch bestimmte Lösungen auszuschließen. Wir machen gleich davon Verwendung. Zunächst betrachten wir konkrete Lösungen der Schrödingergleichung

- Freie Lösungen

Wir vernachlässigen zunächst das Potential, also

$$U(r) = 0.$$

Die erste Gleichung wird durch Kugelwellen-Lösungen

$$u(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$$

erfüllt mit reellem k und den positiven Energien

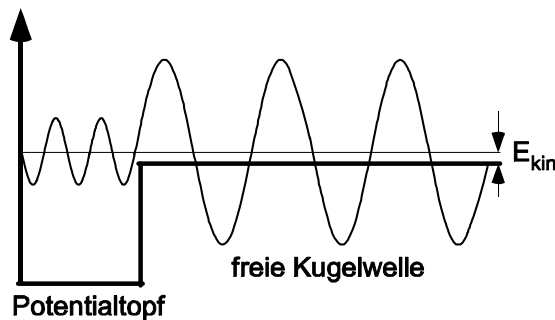
$$E := \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

Die Randbedingung $u(0) = 0$ erzwingt allerdings, dass die Kugelwelle am Ursprung verschwindet, also gelten muss $B = -A$ und damit

$$u(r) = 2iA \sin kr$$

- Kastenpotential

Wir nähern jetzt das Molekülpotential durch ein attraktives Kastenpotential. Innerhalb des Kastens ist die potentielle Energie konstant und man erhält dieselben Lösungen wie die freie Schrödingergleichung mit entsprechend verschobener Energie. Im Kasten existieren also oszillierende Lösungen, die die Randbedingung $u(0) = 0$ erfüllen. Außerhalb des Kastens schließt die oszillierende Lösung an die freie Kugelwelle an. Der Phasenversatz der freien Kugelwelle entspricht der Phase, die sich im Kasten angesammelt hat.



- Skaling Limit

Wir betrachten das sogenannte "scaling limit" in dem wir den Kasten immer schmaler und tiefer machen, so dass er sich im Grenzwert einer δ -Funktion annähert. Der im Kasten oszillierende Anteil wird immer kleiner und am Ende besteht die Wellenfunktion nur noch aus einer freien Kugelwelle mit einer bestimmten Phase φ . Das Kastenpotential sollte sich in dieser Näherung also durch ein Pseudopotential ersetzen lassen, das die Phase φ erzwingt. Diese Näherung ist dann gut, wenn die Wellenfunktion zum größten Teil aus der freien Kugelwelle besteht. Dies ist in der Tat fast immer der Fall. Die beiden Atome befinden sich die meiste Zeit weit getrennt von einander und nur während der kurzen Zeit eines Stoßes nahe bei einander. Es gibt allerdings die spektakuläre Ausnahme einer Streuresonanz, bei der die Wahrscheinlichkeit für kleine Abstände dramatisch anwächst und der relative Anteil der freien Kugelwelle sehr klein wird. Das scaling limit ist dann nicht mehr sinnvoll. Dazu später mehr.

- Pseudopotential und Randbedingungen

Wir suchen also ein deltaförmiges Pseudopotential, das nur die Lösung

$$u(r) = u_0 \sin(kr + \varphi)$$

zulässt mit einer vorgegebenen Streuphase φ . Die Ableitung dieser Funktion

$$\frac{d}{dr}u(r) = u_0 k \cos(kr + \varphi)$$

hat am Ursprung die Steigung

$$\left[\frac{d}{dr}u(r) \right]_{r=0} = u_0 k \cos(\varphi).$$

Wir wollen durch ein geeignetes Pseudopotential nur Lösungen mit dieser Steigung zulassen. Die Randbedingung $4\pi\delta(r)u(r) = 0$ der freien Lösung muss also durch die Randbedingung

$$\delta(r) \left(\frac{d}{dr}u(r) - u_0 k \cos(\varphi) \right) = 0$$

ersetzt werden: Statt der Wellenfunktion $u(r)$ muss jetzt die Klammer am Ursprung verschwinden, was nur für Lösungen mit der gewünschten Steigung erfüllt wird. Umformen liefert

$$\begin{aligned} \delta(r) \left(\frac{d}{dr}u(r) - u_0 k \cos(\varphi) \right) &= 0 \\ \delta(r) \left(\frac{d}{dr}u(r) - u_0 k \cos(\varphi) \frac{u(r)}{u(r)} \right) &= 0 \\ \delta(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{u_0 k \cos(\varphi)}{u(r)} \right) u(r) &= 0 \\ \delta(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{u_0 k \cos(\varphi)}{u_0 \sin(kr + \varphi)} \right) u(r) &= 0 \end{aligned}$$

Wegen der δ -Funktion wird die Klammer nur am Ursprung ausgewertet und man kann im Sinus $r = 0$ setzen. Damit erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \delta(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{k \cos(\varphi)}{\sin(\varphi)} \right) u(r) &= 0 \\ \delta(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{a} \right) u(r) &= 0 \end{aligned}$$

mit der Abkürzung

$$a := \frac{1 \sin(\varphi)}{k \cos(\varphi)} = -\frac{1}{k} \tan(\varphi),$$

die sich gleich als Streulänge herausstellen wird.

Multiplikation der Gleichung mit einem konstanten Faktor lässt die Randbedingung unverändert. Wir multiplizieren mit $a/4\pi$ und bringen die Bedingung in die Form

$$4\pi\delta(r) \left(a \frac{d}{dr} + 1 \right) u(r) = 0.$$

Warum diese Form praktisch ist, klärt sich im nächsten Schritt.

- Pseudopotential für s-Wellen-Stöße

Das gesuchte Pseudopotential $U(r)$ muss zunächst die alte Randbedingung eliminieren und dann die neue einfügen:

$$U(r) = -4\pi\delta(r) + 4\pi\delta(r) \left(a \frac{d}{dr} + 1 \right) = 4\pi\delta(r) a \frac{d}{dr}$$

Um von der Gleichung für $u(r)$ zurück zur Gleichung für $\psi(r) = u(r)/r$ zu kommen, benötigen wir ein Pseudopotential $\tilde{U}(r)$, das angewandt auf ψ dieselbe Wirkung hat wie U auf u :

$$U(r) \cdot u = U(r) \cdot (r\psi) = U(r) \cdot r \cdot \psi = \tilde{U}\psi$$

Also

$$\tilde{U}(r) = U(r) \cdot r = 4\pi a \delta(r) \left(\frac{d}{dr} \cdot r \right)$$

Die Klammer kann man auswerten

$$\left(\frac{d}{dr} \cdot r \right) \psi(r) = \psi(r) + r \frac{d}{dr} \psi(r)$$

Einsetzen liefert

$$\tilde{U}(r) = 4\pi a \delta(r) \psi(r) + 4\pi a \delta(r) r \frac{d}{dr} \psi(r)$$

Wenn die Steigung der Wellenfunktion am Ursprung keinen Pol hat verschwindet der zweite Term da $\delta(r)r = 0$. Damit lautet das Pseudopotential schließlich

$$\tilde{U}(r) = 4\pi a \delta(r)$$

Mit diesem Potential haben wir die GP-Gleichung hergeleitet. Der Wechselwirkungsterm in der GP-Gleichung ist also ein Pseudopotentialterm, der eine bestimmte Randbedingung für die makroskopische Wellenfunktion erzwingt. Mehr dazu in Abschnitt 4.3.

- Streulänge

Dass a gerade die Streulänge ist, erkennt man wenn man umformt

$$\begin{aligned} a &= -\frac{1}{k} \tan(\varphi) \\ ka &= -\tan(\varphi) \end{aligned}$$

und annimmt, dass die Streuphase klein ist, so dass man den \tan durch sein Argument nähert

$$ka = -\varphi.$$

Dieser Ausdruck entspricht der obigen Definition der Streulänge.

- Streuwirkungsquerschnitt

Der Wirkungsquerschnitt ist ebenfalls durch die Streuphase gegeben

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\varphi).$$

Dieser Zusammenhang ist ein Ergebnis der üblichen Streutheorie und wird in typischen Lehrbüchern hergeleitet. Wir übernehmen nur das Ergebnis und setzen die Streuphase ein

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\arctan(-ka)) \simeq 4\pi a^2.$$

In der Näherung kleiner Temperatur also kleiner Wellenzahlen kann man den \arctan und den \sin durch ihr Argument ersetzen. Dieser Querschnitt gilt für unterscheidbare Teilchen.

- Quantenstatistik

Für ununterscheidbare Teilchen fordert die Quantenstatistik für Bosonen eine symmetrische Wellenfunktion und für Fermionen eine antisymmetrische Wellenfunktion unter Teilchenaustausch. Die Symmetrisierung der Wellenfunktion liefert für Bosonen einen weiteren Faktor 2

$$\sigma_{Boson} = 8\pi a^2.$$

Fermionen können keine s-Wellen-Stöße durchführen, da die s-Welle symmetrisch unter Teilchenaustausch ist. Bei tiefen Temperaturen stoßen Fermionen gar nicht!

- Exponentielle Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung

Formal existieren auch Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung, bei denen k komplex ist, also

$$k = \frac{i}{a}$$

wobei a eine reelle Länge ist. Die Lösung der Form

$$u = Ae^{r/a} + Be^{-r/a}$$

hat dann die negative Energie

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$$

und ist gebunden, was für freie Teilchen seltsam wäre. Allerdings erzwingt die Randbedingung dass

$$u(0) = Ae^{0/a} + Be^{-0/a} = 0$$

$$A = -B.$$

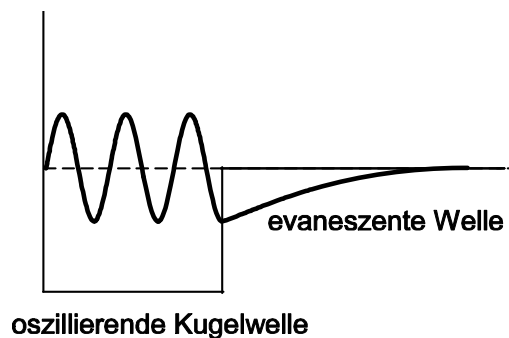
Also

$$u = A(e^{r/a} - e^{-r/a})$$

Man erhält also immer auch einen exponentiell divergenten Teil, den man nicht mehr normieren kann. Diese Lösungen gibt es also für freie Teilchen nicht. In Gegenwart eines Kontaktpotentials gibt es sie aber doch was wir uns jetzt klar machen.

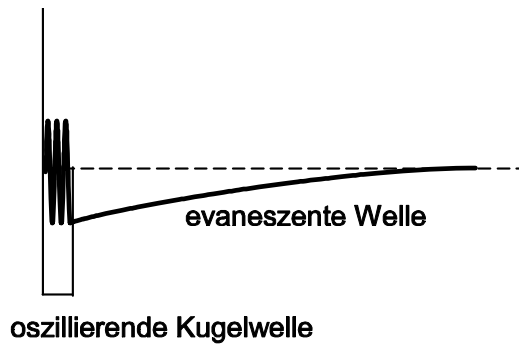
- **Kastenpotential**

Wie oben nähern wir das Molekülpotential wieder durch ein Kastenpotential. Im Kasten existieren oszillierende Lösungen, die die Randbedingung $u(0) = 0$ erfüllen. Außerhalb des Kastens schließt die oszillierende Lösung an eine exponentielle Lösung der freien Schrödingergleichung an. Die exponentiell divergente Lösung ist nicht mehr zwingend, denn die Bedingung $u(0) = 0$ wird durch den oszillierenden Teil bereits erfüllt. Außerhalb des Kastens erhält man eine "evaneszente" Welle die mit der Länge a exponentiell abfällt.



- **Halo-Zustände und Feshbach-Moleküle**

Für den letzten gebundenen Zustand im Potential kann die Zerfallslänge a sehr groß werden, wenn die Bindungsenergie des Zustand sehr klein ist. Die Wellenfunktion hat dann eine Ausdehnung, die viel weiter reicht als das Potential. Solche Zustände nennt man Halo-Zustände und die Moleküle, die in diesen Zuständen gebunden sind nennt man auch Feshbach-Moleküle.



- **Scaling Limit**

Wir betrachten das scaling limit, in dem wir den Kasten immer schmaler und tiefer machen, so dass er sich im Grenzwert einer δ -Funktion annähert. Der oszillierende Anteil wird immer kleiner und am Ende besteht die Wellenfunktion nur noch aus einer evaneszenten Welle. Der Kasten ist hier also eine Art Randbedingungsadapter für exponentielle Lösungen: Im Kasten erfüllt Wellenfunktion die Poisson-Randbedingung $u(0) = 0$ und gleichzeitig kann am äußeren Rand des Kastens eine evaneszente Welle angeschlossen werden. Die Steigung der evaneszenten Welle am Anschlusspunkt bestimmt als einziger Parameter sowohl Form der Wellenfunktion als auch Energie des Zustands. Diese Steigung

$$\frac{d}{dr}u(r) \Big|_{r=0} = \frac{d}{dr}u_0 e^{-r/a} \Big|_{r=0} = -\frac{u_0}{a}$$

ergibt sich aus der Tiefe und Breite des Kastens, also der Form der oszillierenden Welle im Kasten. Diese Details sind aber nur interessant, wenn man die Länge a ab initio berechnen will. Im scaling limit verschwinden die Details im Kasten und man charakterisiert das kurzreichweitige Potential durch die Länge a , die man als Parameter des Problems behandelt (und am Ende messen muss).

- **Pseudopotential für gebundene Zustände**

Wir suchen ein passendes Pseudopotential für die gebundenen Zustände. Es soll am Ursprung eine Steigung von

$$\frac{d}{dr}u(r) \Big|_{r=0} = -\frac{u_0}{a}$$

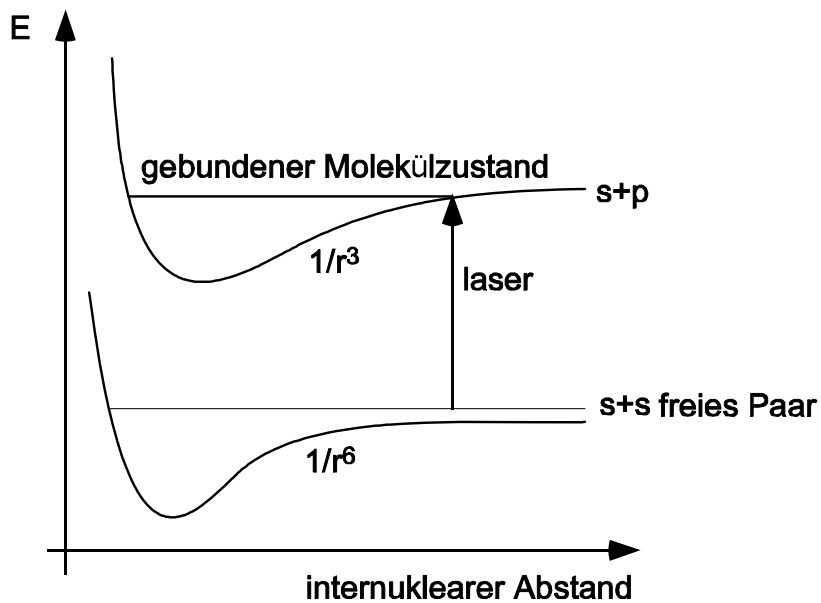
erzwingt. Also

$$\begin{aligned} \delta(r) \frac{d}{dr}u(r) &= -\frac{u_0}{a} \\ \delta(r) \left(\frac{d}{dr}u(r) - \frac{u_0}{a} \right) &= 0 \\ \delta(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{a} \right) u(r) &= 0 \end{aligned}$$

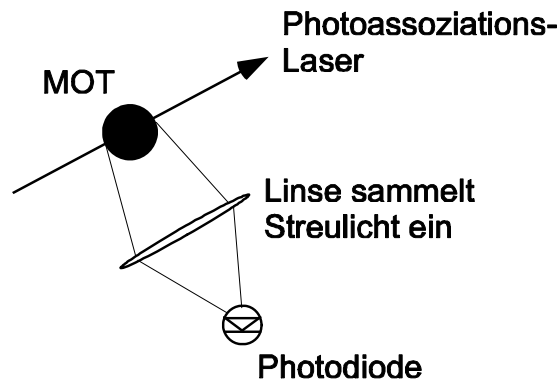
Dies ist aber genau die selbe Gleichung mit der wir oben das Pseudopotential für die s-Wellen-Streuung bestimmt haben. Damit ist die Zerfallslänge a also gerade die Streulänge a .

- Messen der Streulänge durch Photoassoziation

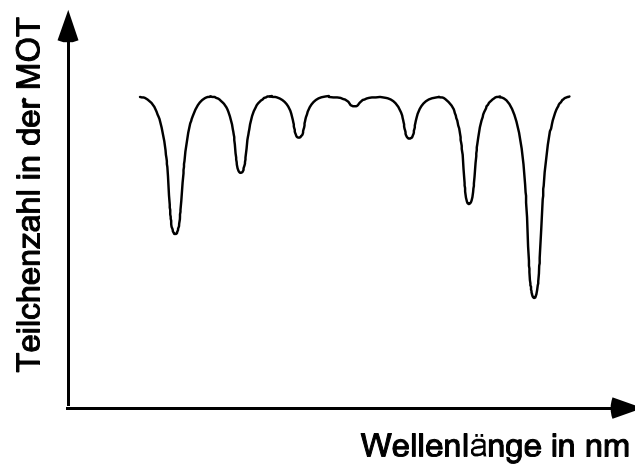
Sind die beiden Stoßpartner im elektronischen Grundzustand, gehorcht das Wechselwirkungspotential für große Abstände einem $1/r^6$ - Gesetz. Die Ursache des Potentials ist eine induzierte Dipol-Dipol-Wechselwirkung (van der Waals Kraft). Ist einer der Stoßpartner im elektronisch angeregten Zustand, ist das Potential proportional zu $1/r^3$. Für Abstände, bei denen sich die Grundzustandsatome noch nicht sehen, gibt es bereits gebundene elektronisch angeregte Molekülzustände.



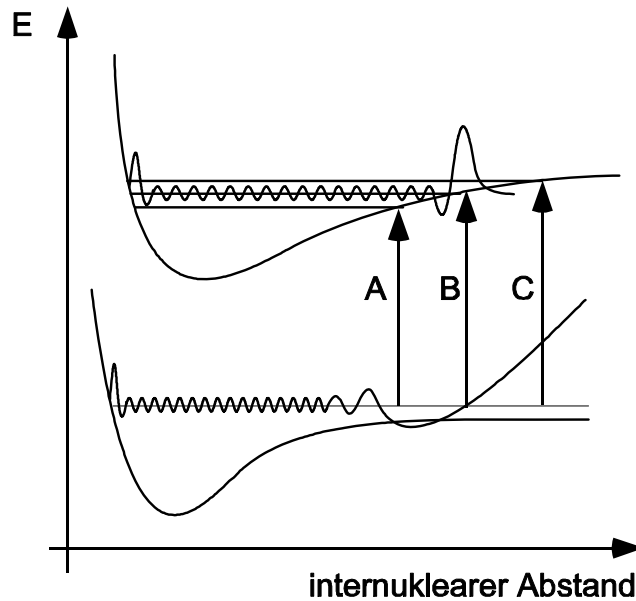
Mit einem Laser kann man einen Übergang vom freien Paarzustand in den elektronisch angeregten Molekülzustand induzieren. Das Experiment macht man mit sehr kalten Atomen in einer magnetooptischen Falle.



Da die Energie des freien Paarzustands bei niedrigen Temperaturen vernachlässigbar klein ist, erhält man scharfe Resonanzen je nach Lage des gebundenen Molekülzustands. Das angeregte Molekül zerfällt wiederum in zwei Atome, wobei aber ein Teil der Bindungsenergie in kinetische Energie übergeht, d.h. die Atome sind sehr schnell und entweichen aus der Falle. Man erhält also laserinduzierte Verluste und damit eine verminderte Teilchenzahl in der magnetooptischen Falle (MOT). Ein typisches Spektrum sieht dann so aus.



Immer wenn der Laser einen gebundenen Molekülzustand trifft bricht die Teilchenzahl in der magnetooptischen Falle ein. Interessant ist die Größe des Einbruchs, die stark variiert (Condon Oszillationen). Für bestimmte Zustände gibt es fast gar keine Verluste. Das liegt daran, dass das Matrixelement für diesen Übergang verschwindet. Der Überlapp der Grundzustands-Wellenfunktion des freien Paares mit der Wellenfunktion des angeregten Moleküls ist immer dann sehr klein, wenn der klassische Umkehrpunkt des Molekülzustands auf einen Knoten der Grundzustands-Wellenfunktion trifft. Ein Übergang findet nämlich hauptsächlich am klassischen Umkehrpunkt statt (Frank-Condon-Prinzip), da dort die Molekül-Wellenfunktion ein Maximum hat. Die Relativbewegung der Atome wird kurzzeitig Null was zu einem Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit führt.



Im Fall B fällt der Übergang gerade auf den Nulldurchgang. Hier ist die Grundzustands-Wellenfunktion fast noch gar nicht vom Wechselwirkungspotential beeinflusst und hat praktisch die Form des asymptotischen Zustands für große Abstände. Der Nulldurchgang markiert also gerade die Streulänge. Kennt man das Molekülpotential des angeregten Zustands kann man aus der Frequenz die Streulänge berechnen.

4.3 GP-Gleichung und Lorentz-Modell in der Optik

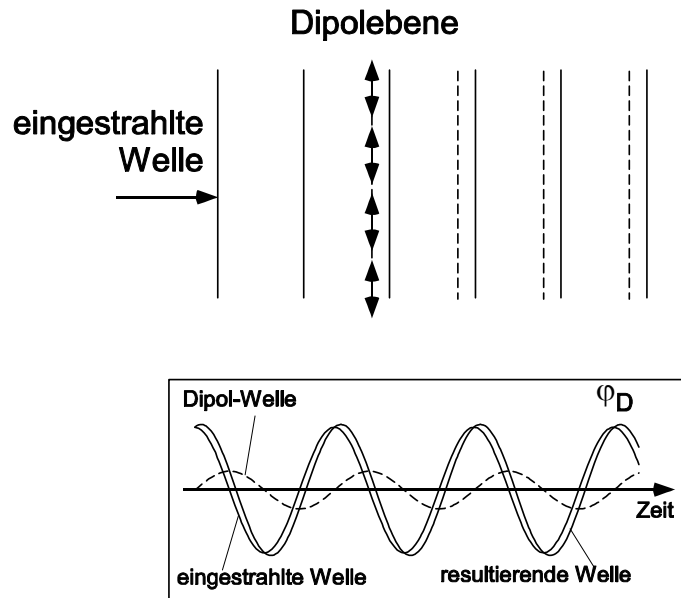
Um die mikroskopische Physik im Kondensat besser zu verstehen, kann man den Vergleich zur Ausbreitung von Licht in Medien mit Brechungsindex ziehen. Dazu betrachten wir zunächst das Lorentz-Modell in der Optik.

- Lorentz-Modell

Das Lorentzmodell beschreibt die Ausbreitung von Licht in dielektrischen Medien wie z.B. Kristallen oder Glas. Die Atome werden als klassische Hertzsche Dipole betrachtet, die durch die Wellenfronten einer einfallenden ebenen Lichtwelle angetrieben werden. Die Dipole kann man in Ebenen zusammenfassen, die parallel zu den Wellenfronten orientiert sind. Jede Dipolebene strahlt eine ebene Welle ab, die allerdings gegenüber der Dipolschwingung um 90° verzögert schwingt. Dieses Resultat erhält man, wenn man viele Dipolfelder einer Ebene überlagert und erfordert eine längere Rechnung, die wir hier aber nicht vorführen.

Liegt die Frequenz des eingestrahlt Lichts weit unterhalb der Resonanz der Dipole, schwingen die Dipole mit dem anregenden Licht in Phase und die von den Dipolen abgestrahlte ebene Welle addiert sich in Vorwärtsrichtung zur anregenden Welle mit

90° Phasenverzögerung. Das resultierende Licht, also die Summe der einfallenden und der von den Dipolen abgestrahlten Welle hinter einer Dipolebene ist damit ebenfalls um eine bestimmte kleine Phase φ_D verzögert.



Die Phasenverzögerung $\Delta\varphi$, die sich so entlang einer Strecke x zusätzlich ansammelt, berechnet sich aus der Anzahl der Dipolebenen x/d entlang der Strecke x , wobei d der Abstand zwischen zwei Dipolebenen ist.

$$\Delta\varphi = \varphi_D \frac{x}{d}$$

Diese zusätzliche Phase muss man zur Phase $k \cdot x$ addieren, die sich entlang der Strecke auch im Vakuum sowieso ansammelt.

$$\varphi_{tot} = k \cdot x + \Delta\varphi$$

Die Wellenzahl k bezieht sich auf das Vakuum. Die Gesamtphasenverschiebung φ_{tot} entlang x kann man durch die Wellenzahl im Medium $n \cdot k$ ausdrücken, wobei n der Brechungsindex ist:

$$n \cdot k \cdot x = \varphi_{tot} = k \cdot x + \varphi_D \frac{x}{d}$$

$$n = 1 + \frac{1}{kd} \varphi_D$$

Der Brechungsindex hängt also direkt mit der Phasenverzögerung der resultierenden Welle zusammen. Ohne die Details zu kennen, wie sich genau die einzelnen abgestrahlten Dipolwellen zu einer phasenverzögerten ebenen Welle überlagert, können wir

doch vermuten, dass die Amplitude der Dipolwelle und damit die resultierende Phasenverschiebung proportional zur Anzahl der Dipole in der Ebene also zur Dipolflächendichte wächst. Diese ist gerade $1/d^2$. Der Term φ_D/d ist damit proportional zur atomaren Teilchendichte

$$\rho := \frac{1}{d^3}$$

und man kann ansetzen

$$n = 1 + \frac{K}{k^3} \cdot \rho$$

Mit einer dimensionslosen Konstanten K , die die Details der Überlagerung enthält.

- Helmholtz-Wellengleichung

Die Ausbreitung von Licht in dielektrischen Medien wird durch die Helmholtzgleichung beschrieben:

$$\nabla^2 E + \frac{n^2 \omega^2}{c^2} E = 0.$$

Für Brechungsindizes in der Nähe von 1 kann man nähern

$$n^2 = \left(1 + \frac{K}{k^3} \rho\right)^2 = 1 + 2\frac{K}{k^3} \rho + \left(\frac{K}{k^3} \cdot \rho\right)^2 \simeq 1 + 2\frac{K}{k^3} \rho$$

$$\nabla^2 E + \left(1 + 2\frac{K}{k^3} \rho\right) \frac{\omega^2}{c^2} E = 0$$

$$\nabla^2 E + \left(1 + 2\frac{K}{k^3} \rho\right) k^2 E = 0$$

$$\nabla^2 E + 2\frac{K}{k} \rho E = -k^2 E$$

- Kondensat als Lorentzmodell

Ein binärer Stoß verschiebt die Wellenfunktion um die Streuphase und wirkt auf die Materiewelle genau wie ein Hertzscher Dipol auf die Lichtwelle. Wir können das Kondensat mit dem Lorentzmodell in Verbindung bringen, wenn wir jedes Atom sowohl als Teil der makroskopischen Wellenfunktion betrachten als auch als Streutarget, das die Phase der makroskopischen Welle verschiebt. Wir machen die Ersetzung

$$\begin{aligned} E &\rightarrow \psi \\ \rho &\rightarrow |\psi|^2. \end{aligned}$$

Einsetzen ergibt

$$\nabla^2 \psi + 2\frac{K}{k} |\psi|^2 \psi = -k^2 \psi$$

Multiplikation mit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}$$

liefert

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\hbar^2 K}{m k} |\psi|^2\right) \psi = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m c^2} \psi$$

Die Gleichung hat die selbe Struktur wie die GP-Gleichung,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{4\pi\hbar^2}{m} a |\psi|^2\right) \psi = \mu\psi.$$

Vergleicht man die Vorfaktoren des nichtlinearen Terms erhält man

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2 K}{m k} &= \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \\ K &= -4\pi \cdot k a = 4\pi \cdot \varphi \end{aligned}$$

Die Konstante K ist also bis auf einen Faktor 4π identisch mit der Streuphase des s-Wellen-Stoßes!

Das chemische Potential

$$\mu = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m c^2}$$

auf der rechten Seite enthält die Photonenenergie $\hbar\omega$. Im Grenzwert gegen $T = 0$ wird die Lichtfrequenz immer kleiner und man könnte meinen, dass damit auch das chemische Potential verschwindet. Was aber bleibt, ist der Teil der Energie, der als Polarisationsenergie in den Dipolen steckt. Im Zusammenhang zwischen Frequenz und Brechungsindex,

$$\omega^2 = n^2 k^2 = k^2 \left(1 + \frac{K}{k^3} \rho\right)^2 \simeq k^2 \left(1 + 2\frac{K}{k^3} \rho\right),$$

vernachlässigen wir den Teil, der nicht von der Streuphase ($K = 4\pi \cdot \varphi$) abhängt:

$$k^2 \left(1 + 2\frac{K}{k^3} \rho\right) \rightarrow k^2 \left(2\frac{|K|}{k^3} \rho\right)$$

Die Frequenz ω sollte also sinnvollerweise diesen Teil repräsentieren. so wählen, dass sie nur die Korrektur zur Energie aufgrund des Brechungsindex widerspiegelt. Damit erhält man das chemische Potential μ als

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m c^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(2\frac{|K|}{k^3} \rho\right) k^2 = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{|K|}{k} \rho\right) = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{4\pi \cdot \varphi}{k} \rho\right) \\ &= \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \cdot \rho \end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit der GP-Gleichung (siehe oben). Dabei haben wir uns auf positive Streuphasen (Streulängen) beschränkt. Das Kondensat lässt sich also direkt auf ein Lorentz-Modell abbilden, bei dem die Dichte der Oszillatoren und damit der Brechungsindex proportional zur Lichtintensität ist. Medien mit intensitätsabhängigem Brechungsindex heißen in der nichtlinearen Optik "Kerr-Medien" (siehe Skript "Nichtlineare Optik").

- Expansion und Kollaps eines Kondensats

lässt man ein Kondensat fallen, indem man plötzlich die Falle öffnet, erwartet man, dass ein Kondensat mit positiver Streulänge expandiert: Bei positiver Streulänge ist der Brechungsindex kleiner 1 und das konvexe Kondensat wirkt wie eine Streulinse. Die Materiewelle bricht sich an sich selber wie Licht an einer Streulinse. Für positive Streulänge ist der Brechungsindex größer als 1 und man erwartet, dass eine konvexe Verteilung wie eine Sammellinse wirkt. In der Tat zieht sich das Kondensat zusammen. Das kann es auch in einer Falle. Das Kondensat kollabiert analog zur Selbstfokussierung eines Laserstrahls in einem Kerrmedium.

- Resonanzen

Man kann die Analogie zum Lorentz-Modell erweitern für resonante Streuung. Ähnlich wie dann im optischen Fall Photonen durch die Atome absorbiert werden, erhält man für Kondensate die Bildung von Molekülen. Diese so genannten Feshbach Moleküle sind extrem schwach gebunden und haben eine Bindungslänge, die größer sein kann als der Abstand zwischen zwei Atomen.