

Stoßlawinen in einem Bose-Einstein-Kondensat

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
des Doktors der Naturwissenschaften
an der Universität Konstanz
Fachbereich Physik

vorgelegt von

Johannes Schuster

Tag der mündlichen Prüfung: 27. Juni 2002

Referent: Professor Dr. G. Rempe

Referent: Professor Dr. P. Leiderer

Referent: Privatdozent Dr. P. Marzlin

Zusammenfassung

Atomare Bose-Einstein-Kondensate stellen nahezu ideale Quantengase dar und können seit gut sechs Jahren experimentell untersucht werden. Dem hohen technologischen Aufwand, der zu ihrer Erzeugung betrieben werden muß, steht ein beachtliches Forschungspotential gegenüber. Es beruht darauf, daß atomare Kondensate nicht nur extrem rein und hervorragend isoliert sind, sondern sich zudem verhältnismäßig leicht manipulieren und untersuchen lassen. Zu den interessantesten Aspekten des Systems gehört die Tatsache, daß sich die Stärke seiner Wechselwirkung in Grenzen variieren läßt. Dadurch gelingt es, den Übergang vom idealen zum realen Quantengas im Experiment kontrolliert zu vollziehen. Atomare Kondensate bieten daher die Möglichkeit, die Theorien des schwach wechselwirkenden, verdünnten Bose-Gases zu testen, welche im Zuge der Bemühungen, die Suprafluidität und die Supraleitung auf die Bose-Einstein-Kondensation zurückzuführen, entwickelt wurden. Da Kondensate jedoch stark unterkühlte Gase darstellen, sind sie metastabil und zerfallen in der Regel durch Rekombination, einem inelastischen Stoßprozeß, der zur Bildung von Molekülen führt. Mit der Wechselwirkung steigt nicht nur die elastische Stoßrate kondensierter Atome, sondern auch deren Rekombinationsrate, so daß mit zunehmender Wechselwirkung die Lebensdauer des Kondensats abnimmt.

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit elastischen und inelastischen Stößen zwischen ultrakalten Rubidium-Atomen, insbesondere werden Auswirkungen erhöhter Wechselwirkung auf die Stabilität von Bose-Einstein-Kondensaten untersucht. Dabei gelingt es, einen bisher unberücksichtigten Prozeß zu identifizieren, der die Lebensdauer von Kondensaten auf wesentlich kürzere Zeitskalen beschränken kann, als sie ausgehend von der Rekombinationsrate erwartet werden. Er ist auf die „Undurchdringbarkeit“ des Kondensats für niederenergetische Atome zurückzuführen, die mit der Wechselwirkung zunimmt und bedingt, daß die Produkte exothermer Stöße ganze Lawinen elastischer Kollisionen auslösen können. Stoßlawinen werden durch die Isotropie des differentiellen Wirkungsquerschnitts für elastische Stöße im niederenergetischen, sogenannten s-Wellen-Regime begünstigt und treten auf, sobald die Stoßrate in dem System über ein kritisches Maß hinaus erhöht wird. Durch die Kaskade elastischer Stöße kann ein signifikanter Teil der Energie, die durch den auslösenden inelastischen Stoß freigesetzt wird, im Kondensat dissipiert werden. Da Stoßlawinen nicht allein die Lebensdauer des Gases drastisch reduzieren, sondern auch sein thermodynamisches Gleichgewicht stören, hat ihr Auftreten nachteilige Konsequenzen für das Studium der Wechselwirkung in atomaren Kondensaten. Es wird ein einfaches Modell eingeführt, in dessen Rahmen sich die Auswirkungen von Stoßlawinen quantifizieren lassen und dessen Prognosen gut mit Messungen übereinstimmen. Die Arbeit enthält ferner die Beschreibung und die Charakterisierung einer neuen Apparatur, die es erlaubt, atomare Kondensate mit hoher Wiederholrate und Genauigkeit zu reproduzieren und damit beste Voraussetzungen für das geplante Studium feldinduzierter elastischer Streuresonanzen bietet.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Bose-Einstein-Kondensation im Experiment	1
1.2	Die vorliegende Arbeit	7
2	Bose-Einstein-Kondensation des idealen Gases	10
2.1	Ununterscheidbarkeit und Symmetrie	10
2.2	Zustandssumme und Besetzungsstatistik	12
2.3	Das ideale Bose-Gas im harmonischen Potential	15
3	Die Realität: Wechselwirkende Bosonen	20
3.1	Elastische Stöße	21
3.1.1	Identische Teilchen	23
3.1.2	Grenzfall niedriger Energien: Die Streulänge	24
3.2	Inelastische Zwei-Körper-Stöße: Spinrelaxation	28
3.2.1	Das Streupotential	28
3.2.2	Spinaustausch	31
3.2.3	Dipolare Relaxation	34
3.2.4	Feshbach-Resonanzen	34
3.2.5	Ratenbestimmung	35
3.2.6	Auswirkungen der Kohärenz	40

3.3	Inelastische Drei-Körper-Stöße: Rekombination	40
4	Der Grundzustand in der Molekularfeldnäherung	46
4.1	Die Gross-Pitaevskii-Gleichung	47
4.2	Hohe Teilchenzahlen: Die Thomas-Fermi-Näherung	50
4.3	Auswirkungen auf den Phasenübergang	53
4.4	Freie Expansion als Signatur des Kondensats	54
5	Experimentelle Methoden	57
5.1	Das Konzept des Experiments	57
5.2	Die magnetooptische Falle	61
5.2.1	Die Spontankraft	61
5.2.2	Die Populationsdynamik	64
5.3	Das Doppel-MOT-System	71
5.4	Präparation für die magnetische Speicherung	77
5.4.1	Kompression in der MOT	77
5.4.2	Polarisationsgradientenkühlen	78
5.4.3	Optisches Pumpen	80
5.5	Magnetische Speicherung	82
5.5.1	Ioffe-Pritchard Magnetfalle	83
5.5.2	Transfer in die magnetische Falle	86
5.5.3	Kompression in der magnetischen Falle	87
5.5.4	Charakterisierung des Systems	88
5.6	Verdampfungskühlung	92
5.6.1	Das Prinzip der Verdampfungskühlung	92
5.6.2	„Schlechte“ Stöße und Antievaporation	94

5.6.3	Rf-induzierte Verdampfungskühlung	96
5.6.4	Optimierung der Verdampfungskühlung	100
6	Detektion und Bestimmung der Systemgrößen	103
6.1	Fluoreszenzmessungen	103
6.2	Teilchenzahlmessung durch optisches Pumpen	107
6.3	Absorptionsmessungen	109
6.4	Phasenkontrastmikroskopie	115
7	Experimenteller Aufbau	119
7.1	Vakuumsystem	119
7.2	Lasersystem	123
7.3	Magnetische Falle	127
7.4	Steuerung und Datenaufnahme	133
8	Eine Atomquelle höchsten Flusses	134
8.1	Optimierung der Dampfzellenfalle	134
8.1.1	^{87}Rb in einer magnetooptischen Dampfzellenfalle	134
8.1.2	Test der Vorhersagen	139
8.1.3	Temperatur und Polarisationsgradientenkühlen	143
8.2	Optimierung des Transfers im Doppel-MOT-System	145
9	Charakterisierung des Kondensats	148
9.1	Der Phasenübergang	148
9.2	Lebensdauer kalter Atomwolken	150
9.2.1	Das Konzept der Oortschen Wolke	153
9.2.2	Diskussion	158

10 Stoßlawinen in einem Bose-Einstein-Kondensat	159
10.1 Stoßwahrscheinlichkeit von Zerfallsprodukten	160
10.2 Entstehung von Stoßlawinen	166
10.3 Ein einfaches Modell	168
10.3.1 Direkte und indirekte Verluste	172
10.3.2 Prognosen	173
10.4 Vergleich mit dem Experiment	176
10.5 Diskussion	182
11 Ausblick	184
ANHANG	188
A Expansion des Bose-Gases	188
B Polynomiale Näherungen der Bose-Einstein-Funktionen	191
C Klein-Winkel-Streuung in der semiklassischen Näherung	193
D Mittelung der Säulendichte	196
D.1 Auswertung am Beispiel der Boltzmann-Verteilung	196
E Eigenschaften des Isotops ^{87}Rb	200
LITERATURVERZEICHNIS	203
ABBILDUNGS- UND TABELLENVERZEICHNISSE	216
DANKSAGUNG	221

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Bose-Einstein-Kondensation im Experiment

Als Einstein im Jahre 1924 die erste Abhandlung zur „Quantentheorie des einatomigen idealen Gases“ veröffentlichte, gelang ihm damit, „die Hypothese einer weitgehenden formalen Verwandtschaft zwischen Strahlung und Gas“ zu konkretisieren [1]. Inspirieren ließ er sich dazu von Boses Ableitung der Planckschen Strahlungsformel, die Einstein zuvor übersetzt hatte und die auf der Quantisierung des Phasenraums, also auf dessen Einteilung in Zellen des Volumens h^3 , beruhte. Als eine der ersten unmittelbaren Konsequenzen der hiermit begründeten Quantenstatistik erkannte Einstein kurz darauf in seiner zweiten Abhandlung die Tatsache, daß es im idealen Gas „bei jeder Temperatur eine maximale Dichte in Agitation befindlicher Moleküle“ geben müsse, bei deren Überschreitung ein Teil des Gases in dessen „I. Quantenzustand (Zustand ohne kinetische Energie)“ übergehe, während der Rest ein „gesättigtes ideales Gas“ darstelle [2]. Dieses heute als *Bose-Einstein-Kondensation* (BEK) bekannte Phänomen konnte erst sieben Jahre später in seiner Reinkultur beobachtet werden und erfreut sich seither – nicht zuletzt infolge der Verleihung des letztjährigen Nobelpreises an die Pioniere der experimentellen BEK – wachsender Popularität.

Um ein Gas in Einsteins Sinne zu kondensieren, muß es gelingen, seine Phasenraumdichte so weit zu erhöhen, daß die Mehrfachbesetzung einer Phasenraumzelle wahrscheinlich wird. Diese Situation tritt ein, wenn der mittlere Abstand der Teilchen und die de Broglie-Wellenlänge, die ihrem mittleren Impuls entspricht, eine vergleichbare Größe besitzen. Anschaulich gesprochen, verlieren die Teilchen unter diesen Voraussetzungen ihre Identität: Auch wenn ihre Ausdehnung – im Sinne des idealen Gases – stets punktförmig bleibt, kann ihr Abstand kleiner als die Ortsauflösung sein, mit der sie der Unschärferelation entsprechend bestenfalls lokalisiert werden können. Ein klassisches Gas läßt sich daher am leichtesten in diesen exotischen Materiezustand versetzen, wenn es zugleich verdichtet *und* gekühlt wird.

Das Erstaunliche an der BEK ist, daß es sich bei ihr nicht um das Ergebnis einer Wechselwirkung handelt, da die Kondensation ja bereits im idealen Gas stattfindet. In der heutigen Sprechweise steht die Ununterscheidbarkeit der Teilchen, aus denen sich das Gas zusammensetzt, an ihrem Ursprung. Ihre Konsequenz sind die beiden möglichen Vertauschungssymmetrien der Vielteilchen-Wellenfunktion, die jeweils Bosonen und Fermionen zugeordnet werden und fundamentale Auswirkungen auf die Statistik des Gases haben. Der Spin-Statistik-Zusammenhang, der von Pauli im Jahre 1940 bewiesen wurde, verbindet die Vertauschungssymmetrien der Wellenfunktion mit einem ganz- oder halbzahligen Spin der Teilchen [3]. Ohne sich der Alternative bewußt zu sein, hat Einstein seinen Abhandlungen, von der Analogie zum Strahlungsfeld ausgehend, die Statistik der Bosonen zugrundegelegt und konnte daher nicht wissen, daß sein Vorschlag fehlschlagen mußte, die gleiche Statistik auf das freie Elektronengas der Metalle in der Hoffnung anzuwenden, dadurch Inkonsistenzen des Drude-Modells aufzulösen. Er hatte jedoch erkannt, daß auch in diesem Zusammenhang die Quantenstatistik eine entscheidende Rolle spielen könnte und wurde darin wenig später von Sommerfeld bestätigt, der die Fermi-Statistik erfolgreich auf das Elektronengas übertrug. Bezeichnenderweise hat sich mittlerweile erwiesen, daß die BEK tatsächlich mit der Supraleitung in Zusammenhang steht, wenn auch in anderer Weise, als von Einstein in seiner zweiten Abhandlung angedacht: In der BCS-Theorie, deren Begründung 1972 mit dem Nobelpreis honoriert wurde, kann die Supraleitung als Kondensation von sog. Cooper-Paaren aufgefaßt werden, die sich aus jeweils zwei Elektronen komplementärer Impulse und antiparalleler Spins zusammensetzen und der Bose-Statistik gehorchen. Das System ist allerdings vom Modell des idealen Gases so weit entfernt, daß der Vergleich mit Einsteins Theorie nur eingeschränkt möglich ist.

Ähnlich schwierig stellte sich der Versuch dar, einen quantitativen Zusammenhang zwischen der BEK und der Suprafluidität von ^4He zu finden. Auf die mögliche Verwandtschaft beider Phänomene wies London bereits 1938 hin [4]. Anlaß zu seiner Vermutung hatte die erstaunlich gute Übereinstimmung der Übergangstemperatur von etwa 2 K mit der kritischen Temperatur gegeben, die sich für die entsprechende Dichte – allerdings unter Vernachlässigung von Wechselwirkungen – aus Einsteins Theorie zu 3 K ergibt. Zudem war inzwischen bekannt, daß es sich bei ^4He um ein Boson handelt, und es war erwartungsgemäß nicht gelungen, die Suprafluidität des fermionischen Isotops ^3He zu beobachten. Heute weiß man, daß die mittlerweile entdeckte Suprafluidität von ^3He unterhalb einer Temperatur von etwa 10^{-3} K die Folge eines BCS-Übergangs ist, bei dem sich, anders als im Falle der Supraleitung, Atome mit parallelen Spins zu Cooper-Paaren zusammenschließen.

Die erste Realisierung der BEK in einem vergleichsweise gering wechselwirkenden Bose-Gas gelang im Jahre 1993 mit Paraexzitonen in einem Halbleiter [5]. Hierbei handelt es sich um ein Gas von Elektron-Loch-Paaren deren Gesamtspin sich zu Null addiert. Sie lassen sich mit Hilfe von Laserpulsen in Halbleitern erzeugen und sind bei kryogenen Temperaturen stabil genug, um innerhalb ihrer Lebensdauer von wenigen μs ein thermalisiertes Gas zu bilden, das bei hinreichend hohen Dichten kondensiert. Exzitonen-Gase können zwar verhältnismäßig leicht erzeugt werden, ihr Studium ist jedoch äußerst schwierig, weil sie zum einen durch Phononenstreuung schnell zerfallen und weil es zum anderen

kaum Möglichkeiten gibt, das Gas zu manipulieren und zu beobachten. Zudem ist die Wechselwirkung zwischen Exzitonen kompliziert und nicht vollständig verstanden.

Demgegenüber stellt die BEK verdünnter atomarer Gase in vielerlei Hinsicht ein Lehrbuchbeispiel für die ideale Gastheorie dar. In diesen Systemen spielt die Wechselwirkung eine untergeordnete – wenn auch, wie weiter unten deutlich wird, subtile – Rolle. Sie sind außerdem extrem rein, hervorragend isoliert und vergleichsweise leicht zu untersuchen. Warum also gibt es atomare Kondensate erst seit wenigen Jahren?

Die Antwort liegt in dem technologischen Aufwand, der zu ihrer Erzeugung betrieben werden muß: In Experimenten zur BEK atomarer Gase werden Temperaturen von wenigen 10 nK erreicht, ein Regime, das mit herkömmlichen kryogenen Methoden nicht zugänglich ist. Solch tiefe Temperaturen sind auf die Tatsache zurückzuführen, daß im thermodynamischen Gleichgewicht nahezu alle Gase in den festen Zustand übergehen, bevor die kritische Phasenraumdichte erreicht ist, die für die BEK erforderlich wäre. Die einzige Ausnahme bildet Helium, dessen Molekülpotentiale keine gebundenen Zustände zulassen, wodurch es stets flüssig bleibt. Diesem Umstand ist zu verdanken, daß die BEK in flüssigem Helium bei einer beachtlichen Dichte und einer infolgedessen „hohen“ Temperatur auftritt. Alle anderen Gase müssen stark unterkühlt werden, soll ihre Entartung erreicht werden. Dies ist jedoch nur möglich, wenn Molekülbildung unterdrückt ist, und setzt daher eine geringe Dichte des Gases und den Verzicht auf materielle Wände bei seiner Speicherung voraus. Aus Energie- und Impulserhaltungsgründen können sich nämlich Moleküle durch sog. Rekombination nur bilden, wenn zwei Teilchen in der Nähe einer Wand stoßen oder (mindestens) drei Teilchen gleichzeitig aufeinandertreffen. Die starke Verdünnung atomarer Kondensate ist also keineswegs gewollt, sondern eher eine Auflage der Natur. Daß Gleichgewichtsthermodynamik unter Bedingungen kontaktloser Speicherung überhaupt möglich ist, ist eine Folge davon, daß elastische Stöße im Gegensatz zu inelastischen auch in einem stark verdünnten Gas immer noch häufig stattfinden können. Sie gewährleisten die Thermalisierung des Ensembles und ermöglichen damit auch seine Kühlung. Bemerkenswerterweise ist also die Wechselwirkung zwischen *realen* Atomen, die sich ja durch Stöße äußert, Voraussetzung für die Beobachtung der BEK in ausgezeichneter Übereinstimmung mit der Theorie des *idealen* Gases. Entsprechende Verhältnisse liegen bei typischen Dichten von 10^{14} cm^{-3} vor, was allerdings bedeutet, daß die kritische Phasenraumdichte bei Temperaturen im sub- μK -Regime erreicht wird.

In greifbare Nähe ist die Realisierung solch harter Bedingungen erstmalig im Zuge der Entwicklungen am MIT in Boston und an der Universität Amsterdam gerückt, die Ende der achtziger Jahre zur magnetischen Speicherung [6] und zur Verdampfungskühlung [7] atomaren Wasserstoffs geführt haben. Als einfachstes Atom mit der zudem größten de Broglie-Wellenlänge galt Wasserstoff lange als idealer Kandidat für die BEK. Seine Eigenschaften waren gut bekannt, insbesondere aber war in einem spinpolarisierten Wasserstoffgas, wie es in der magnetischen Falle vorliegt, mit einer geringen Rekombinationswahrscheinlichkeit zu rechnen, weil das Triplett-Molekülpotential des Dimers keine gebundenen Zustände zuläßt und Molekülbildung daher das Umlappen eines der Spins erfordert. Bis heute ist die Verdampfungskühlung, die im Rahmen der Experimente an Wasserstoff entwickelt und theoretisch modelliert wurde, die einzige Methode, mit der es gelungen ist,

atomare Gase in Einsteins Sinne zu kondensieren. Sie beruht darauf, dem Gas gezielt hochenergetische Teilchen zu entnehmen. Daß dadurch die mittlere Energie der verbleibenden Teilchen abnimmt, ist offensichtlich, hat allerdings zunächst keine Auswirkungen auf die Besetzungswahrscheinlichkeit niederenergetischer Zustände, auf deren Erhöhung es letztlich ankommt. Diese tritt erst durch die Stoßthermalisierung des Gases ein, die auch bewirkt, daß fortlaufend hochenergetische Atome nachgeliefert werden, durch deren „Verdampfen“ dem System erneut Energie entzogen wird. Um den Prozeß aufrechtzuerhalten, muß die Energieschwelle, oberhalb derer Teilchen entfernt werden, kontinuierlich abgesenkt werden, was sich durch eine Reduktion der Potentialtiefe erreichen läßt. Geschieht dies langsam auf der Zeitskala der elastischen Stoßrate, befindet sich das Gas stets in einem quasi-stationären Gleichgewicht, dem eine Temperatur zugeordnet werden kann. In einem BEK-Experiment gelingt es, diese Temperatur durch Verdampfung um bis zu fünf Größenordnungen zu reduzieren. Allerdings, und das ist der große Nachteil der Methode, geschieht dies auf Kosten eines ähnlich dramatischen Teilchenverlustes. Er kann nur in Kauf genommen werden, wenn vor der Verdampfungskühlung eine entsprechend hohe Anzahl von Atomen vorliegt. Die komplexen Apparaturen der Wasserstoff-Experimente gestatteten jedoch wenig Spielraum bei der Optimierung des Speicherpotentials und der Verdampfungskühlung, für die sich Wasserstoff aufgrund seines äußerst geringen elastischen Streuquerschnittes ohnehin schlecht eignet. Dies hat den Weg zur BEK von Wasserstoff sehr beschwerlich gestaltet, und es ist daher besonders zu würdigen, daß er im Jahre 1998 von Erfolg gekrönt wurde [8].

Indessen war die Kondensation drei Jahre zuvor mit Alkaliatomen gelungen [9, 10, 11]. In diesen Experimenten hatte man sich des Problems zunächst unter Einsatz völlig anderer Methoden angenommen, deren Entwicklung im Jahre 1975 mit den ersten Vorschlägen begann, Licht zur Kühlung von Ionen und neutralen Atomen einzusetzen [12, 13]. Die Grundidee der sog. Dopplerkühlung besteht darin, die Doppler-Verstimmung eines bewegten Atoms so zu nutzen, daß es bei der Absorption von Licht weniger Energie aufnimmt als es bei der anschließenden spontanen Emission abgibt. Die Energiedifferenz findet sich dann in einer entsprechenden Abnahme seiner kinetischen Energie wieder. Erreicht wird dies durch eine quasi-isotrope Beleuchtung des Atoms mit monochromatischem Licht, das bezüglich einer Resonanz des ruhenden Atoms leicht rotverstimmt ist. Einen Meilenstein in der Geschichte der Laserkühlung stellte die Entwicklung der magneto-optischen Falle dar [14], die es fortan ermöglichte, neutrale Atome mit Hilfe von Licht nicht nur zu kühlen, sondern auch gleichzeitig zu speichern. Hier bedient man sich eines inhomogenen Magnetfeldes, um der Absorptionsrate des Atoms neben der Geschwindigkeits- auch eine Ortsabhängigkeit aufzuprägen. Fallen dieses Typs gehören heute zum Standardinstrumentarium der Atomphysik und finden in unterschiedlichsten Experimenten Anwendung. Die Tatsache, daß sich mit ihrer Hilfe Gase von einigen 10^{10} Atomen bei Temperaturen im sub-mK-Bereich und Dichten von etwa 10^{11} cm^{-3} bereitstellen lassen, nährte bald Hoffnungen, die BEK mit optischen Kühl- und Speichermethoden zu erreichen. Trotz intensiver Bemühungen, in deren Rahmen immer raffiniertere lichtbasierte Kühltaschemata entwickelt wurden, gelang es jedoch bis heute noch nicht, die kritische Phasenraumdichte durch Laserkühlung zu erreichen. Als Problem stellte sich insbesondere die Reabsorption spontan emittierter Photonen durch benachbarte Atome heraus, die nicht nur die Dichte des Gases nach oben beschränkt, sondern auch den Zusammenbruch der Kühlmechanismen

zur Folge hat. Nichtsdestotrotz kommt heute kein BEK-Experiment ohne den Einsatz optischer Methoden zur Vorkühlung des Gases aus¹. Nicht zuletzt diese Anwendung der Laserkühlung wurde mit dem Nobelpreis des Jahres 1997 gewürdigt.

Die Übertragung der Verdampfungskühlung auf die magnetisch gespeicherten, optisch vorgekühlten Alkali-Gase ^{87}Rb , ^7Li und ^{23}Na verhalf 1995 schließlich zum Durchbruch. Dabei war zugleich die Methode der Radiofrequenz-induzierten Verdampfung eingeführt worden [15, 16], die es ermöglicht, die Tiefe des Speicherpotentials zu variieren, ohne dessen Steilheit zu beeinflussen. Dieser Umstand und die Tatsache, daß Alkaliatome vergleichsweise große elastische Streuquerschnitte besitzen, erlaubt eine erheblich effizientere Gestaltung der Verdampfungskühlung als im Falle von Wasserstoff. Wie schmal der Grat auf der einen Seite immer noch ist, auf dem man sich in einem BEK-Experiment dem Phasenübergang nähert, ist daran zu erkennen, daß nahezu alle der mittlerweile über 30 erfolgreichen Experimente den gleichen prinzipiellen Ablauf haben wie ihre prominenten Vorgänger. Auf der anderen Seite hat die Optimierung einzelner experimenteller Schritte in den letzten sieben Jahren reiche Früchte getragen. Zum Teil erhebliche Fortschritte gab es zunächst bei der Verkürzung des experimentellen Zyklus, der Verbesserung der Reproduzierbarkeit und der Steigerung der Teilchenzahl des Kondensats. Aufsehen erregte in jüngster Zeit die Beobachtung des Phasenübergangs in miniaturisierten Fallen [17, 18] und die Kondensation in einer sog. optischen Dipolfalle, also unter Verzicht auf die magnetische Speicherung des Gases [19]. Mit ^1H , ^{85}Rb , ^{41}K und $^4\text{He}^*$ gelang schließlich die Kondensation von vier weiteren Gasen [8, 20, 21, 22, 23].

Eine Besonderheit der BEK atomarer Gase ist, daß sie aufgrund der inhomogenen Speicherung auch im Ortsraum stattfindet. Dadurch läßt sich das Kondensat im wahrsten Wortsinne optisch identifizieren. Zudem hat die geringe Wechselwirkung zwischen neutralen Atomen zur Folge, daß es gelingt, nahezu alle Atome des Gases in das Kondensat zu überführen. Damit steht dem Experimentator ein reines Quantengas zur Verfügung, das sich leicht manipulieren und beobachten läßt. Dabei kann er auf eine Vielzahl von Methoden zurückgreifen, die während der letzten Jahrzehnte auf den Gebieten der Spektroskopie, der Atom- und der Quantenoptik entwickelt wurden. Dementsprechend groß ist die Vielfalt an Untersuchungen, die in der noch kurzen Geschichte der BEK atomarer Gase bereits durchgeführt wurden. Experimente an Kondensaten berühren mittlerweile unterschiedlichste Fragestellungen der statistischen Mechanik, der nichtlinearen- und der Quantenoptik, der Atom- und Molekülphysik, der Festkörperphysik und der Quanteninformation. Sie sind so zahlreich, daß bereits die Würdigung der wichtigsten Arbeiten den Rahmen dieser Einleitung sprengen würde. An dieser Stelle muß daher auf Übersichtspublikationen, wie etwa die Referenzen [24, 25, 26, 27], verwiesen werden. Allgemein läßt sich jedoch feststellen, daß Kondensate heute immer häufiger als Mittel zum Zweck eingesetzt werden, daß also ihre besonderen Eigenschaften eher genutzt als untersucht werden. In diesem Zusammenhang ist insbesondere die Kohärenz des Gases zu nennen, aber auch seine extrem niedrige Energie und seine vergleichsweise hohe Dichte.

¹ Eine Ausnahme bildet das bisher einzige Wasserstoff-Experiment, das in jeder Hinsicht eine Sonderrolle einnimmt.

Zu den interessantesten Aspekten atomarer Kondensate gehört die subtile Rolle der Wechselwirkung. Obwohl sie unter typischen experimentellen Bedingungen kaum Auswirkungen auf den Phasenübergang hat, ist der Grundzustand des Gases nahezu ausschließlich durch sie bestimmt: Da die Kondensation auch im Ortsraum stattfindet, steigt die Dichte des Grundzustands mit der Anzahl kondensierter Atome schnell an, was auf der einen Seite dazu führt, daß die Wechselwirkungsenergie in der Energiebilanz des Systems bereits bei einer geringen Besetzung des Grundzustands dominiert. Auf der anderen Seite bleibt das Kondensat stets so verdünnt, daß die Beschreibung der Wechselwirkung durch ein Molekularfeld in der Regel ausgezeichnet mit dem Experiment übereinstimmt. In dieser sog. Mean-Field-Theorie wird die Summe der Paarwechselwirkungen zwischen den Atomen durch ein effektives Potential ersetzt, dem jedes Atom für sich genommen ausgesetzt ist. Dies entspricht der Vernachlässigung von Teilchenkorrelationen auf einer Längenskala, die durch die Reichweite des interatomaren Wechselwirkungspotentials gegeben ist. Die extrem niedrige Temperatur des Gases impliziert zudem reine s-Wellen-Streuung. Unter diesen Voraussetzungen ist das effektive Potential allein von der Masse, der Streulänge und der Dichte der Atome abhängig.

Die BEK verdünnter atomarer Gase bietet damit die einmalige Möglichkeit, die Rolle der Wechselwirkung in einem entarteten Vielteilchensystem gezielt zu variieren und zu verstehen. Von großem Vorteil erweist sich in diesem Zusammenhang, daß auf weit entwickelte mikroskopische Theorien zurückgegriffen werden kann, die in den fünfziger und sechziger Jahren im Zuge der Bemühungen entstanden, den Zusammenhang zwischen der Suprafluidität von ^4He (oder der Supraleitung) und der BEK zu klären. Hier waren Versuche unternommen worden, ein fiktives, gering wechselwirkendes Bose-Gas als Ausgangspunkt zu wählen, um durch kontrollierte Variation der Wechselwirkung zu einem mikroskopischen Verständnis der realen Quantenflüssigkeit zu gelangen. Die oben erwähnte Mean-Field-Theorie etwa stellt ein Produkt dieser Bemühungen dar. Mit atomaren Bose-Einstein-Kondensaten ist also genau das „fiktive“ System realisiert worden, an dem sich die Theorien testen lassen.

Die Wechselwirkung bestimmt die einzelnen Eigenschaften des Systems in unterschiedlichem Maße. Neben der Dichteverteilung des Kondensats beeinflußt sie das Spektrum und die Dämpfung seiner kollektiven Anregungen. Sie hat außerdem Auswirkungen auf die Übergangstemperatur und die relative Besetzung des Grundzustands bei gegebener Temperatur. Im Extremfall kann die Wechselwirkung, wie im Falle suprafluiden Heliums, bewirken, daß das Kondensat auch im Grenzfall verschwindender Temperatur nur wenige Prozent der Gesamtteilchenzahl enthält. In diesem sog. hydrodynamischen Regime stoßen die Teilchen so häufig, daß das thermodynamische Gleichgewicht eine lokale Charakteristik erhält. Dadurch kann es in dem System beispielsweise zur Ausprägung von Temperaturgradienten kommen. Während einige Aspekte der Wechselwirkung bereits untersucht werden konnten², sind viele der interessanten Effekte unter heutigen experimentellen Bedingungen zu klein, um sich beobachten zu lassen. Seit den ersten Tagen der experimentellen

² Eine ausgezeichnete Übersicht theoretischer und experimenteller Arbeiten findet sich in Referenz [24].

BEK atomarer Gase motiviert dieser Umstand das Bestreben, immer größere und dichtere Kondensate zu erzeugen.

Im Hinblick auf die Variation der Wechselwirkung in Kondensaten haben sich in jüngster Zeit neue, vielversprechende Perspektiven ergeben. Bemerkenswerterweise ist diese Entwicklung auf die einzigartigen Möglichkeiten zurückzuführen, die Kondensate für das Studium ultrakalter Stöße bieten. In den letzten Jahren wurden diese Möglichkeiten genutzt, um die Wechselwirkungspotentiale und die Streulängen der kondensierten Atome mit nie dagewesener Präzision zu bestimmen. Dadurch konnten feldinduzierte Resonanzen im elastischen Streuquerschnitt ultrakalter Atome (sog. Feshbach-Resonanzen) mit hoher Genauigkeit prognostiziert und schließlich im Experiment beobachtet werden [28, 29, 30, 31]. Sie lassen sich dazu einsetzen, die Wechselwirkung in Kondensaten attraktiv oder repulsiv zu gestalten und über Größenordnungen zu variieren.

1.2 Die vorliegende Arbeit

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit einer direkten, nachteiligen Konsequenz erhöhter Wechselwirkung in Kondensaten. Unabhängig davon, ob sie durch eine Variation der Dichte (bzw. Größe) oder des Streuquerschnitts erreicht wird, steigt mit ihr die Stoßrate der Atome und damit auch die Häufigkeit inelastischer Stoßprozesse. In einem spinpolarisierten Gas handelt es sich dabei um Spinrelaxations- und Rekombinationsstöße, die beide auf die Metastabilität des Kondensats, also auf die Tatsache zurückzuführen sind, daß es nicht den „echten“ Grundzustand des Systems darstellt. Bei inelastischen Stößen werden mit der Zeeman- bzw. der Hyperfeinenergie der Atome oder der Bindungsenergie des Moleküls in der Regel erheblich höhere Energien freigesetzt, als die Teilchen im Grundzustand des Systems besitzen. Paradoxerweise erweist sich dieser Umstand im Hinblick auf die Stabilität von Kondensaten geringer Dichte als vorteilhaft: Da der totale elastische Stoßquerschnitt generell mit der Energie der Stoßpartner abnimmt, können die Produkte inelastischer Prozesse hinreichend verdünnte Kondensate verlassen, ohne dabei einen Teil ihrer Energie durch elastische sog. Sekundärstöße auf das Kondensat zu übertragen. Unter diesen Voraussetzungen, die in den meisten Experimenten realisiert sind, verliert das Kondensat „nur“ jene Teilchen, die zuvor inelastisch gestoßen haben. Mit der Wechselwirkung im Kondensat steigt nun aber auch die Stoßwahrscheinlichkeit der Produkte inelastischer Streuprozesse. Je nach Energieübertrag bewirken Sekundärstöße dieser Teilchen entweder unmittelbar zusätzliche Verluste oder eine „Heizrata“, die den Zerfall des Kondensats mittelbar beschleunigt. Bei einem Sekundärstoß eines hochenergetischen Teilchens mit einem ultrakalten Atom wird zumeist wenig Energie auf letzteres übertragen, weil der differentielle Streuquerschnitt bei hohen Energien Kleinwinkelstreuung bevorzugt. Das bedeutet, daß durch einen Sekundärstoß in der Regel zwei Teilchen entstehen, deren totaler elastischer Streuquerschnitt für weitere Stöße mit ultrakalten Atomen unterschiedlich groß ist. Es kann also die Situation eintreten, daß die Stoßwahrscheinlichkeit eines Zerfallsproduktes zwar klein ist, daß aber durch einen Sekundärstoß dieses Produktes ein Teilchen mit einer empfindlich größeren Stoßwahrscheinlichkeit entsteht.

Eine besondere Situation tritt ein, wenn entweder die Energie der inelastischen Stoßprodukte von Anfang an so niedrig ist, daß zukünftige Sekundärstöße mit kondensierten Atomen prinzipiell im s-Wellen-Regime stattfinden, oder wenn durch wenige Sekundärstöße der Stoßprodukte Teilchen entstehen, auf die dies zutrifft. Im s-Wellen-Regime ist der differentielle Streuquerschnitt im Schwerpunktsystem isotrop, was im Laborsystem bedeutet, daß die Energie des einfallenden Teilchens im Mittel zu gleichen Teilen auf die Stoßpartner verteilt wird. Zudem ist hier der totale Streuquerschnitt groß und von der Energie unabhängig. Unter diesen Umständen entstehen durch einen Sekundärstoß zwei Teilchen gleicher, unverändert hoher Stoßwahrscheinlichkeit. Ist diese nun im Mittel größer als $1/2$, wächst mit jedem Sekundärstoß die mittlere Anzahl von „Projektilen“, die für weitere Sekundärstöße zur Verfügung stehen: eine Stoßlawine nimmt ihren Lauf. Auf diese Weise kann ein beachtlicher Teil der Energie des inelastischen Stoßproduktes, das die Lawine ausgelöst hat, auf viele Atome verteilt werden, die dem Kondensat verloren gehen. Mit abnehmender Verdünnung zerfallen ultrakalte Gase daher nicht allein aufgrund exothermer Stoßprozesse, sondern auch infolge einer zunehmend effizienten Übertragung der freigesetzten Energie auf „unbeteiligte“ Atome. Besonders nachteilig wirkt sich dabei aus, daß inelastische Stöße aufgrund ihrer Dichteabhängigkeit vorzugsweise im dichten Zentrum des inhomogenen Gases stattfinden, wo auch die Stoßwahrscheinlichkeit ihrer Produkte besonders hoch ist.

Der Prozeß weist eine starke Analogie zu einer nuklearen Kettenreaktion auf, wo die Dichte der Neutronen, die Kernspaltungen induzieren, oberhalb einer kritischen Masse mit jeder Kernreaktion zunimmt. Anders als dort, nimmt hier allerdings die insgesamt freigesetzte Energie nicht zu, sondern wird durch die Stoßlawine teilweise oder ganz im Kondensat dissipiert. In welchem Maße dies geschieht, ist eine Frage der „Opazität“ des Gases, hier im Sinne seiner Undurchdringbarkeit für niederenergetische Teilchen. Sie ist eine Funktion der Dichte und der Ausdehnung des Gases sowie des totalen elastischen Streuquerschnitts für s-Wellen-Streuung. Die Opazität hängt damit von den gleichen Parametern ab wie die Mean-Field-Wechselwirkung, deren Erhöhung das Interesse häufig gilt. Analog zur kritischen Masse läßt sich in einem Kondensat die *kritische Opazität* definieren, die einer mittleren Stoßwahrscheinlichkeit von 0,5 entspricht und deren Überschreiten zu Stoßlawinen führt. Es zeigt sich, daß die meisten der heutigen BEK-Experimente unterhalb der kritischen Opazität durchgeführt werden, wo die Lebensdauer des Kondensats nicht durch Stoßlawinen begrenzt ist. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Stoßlawinen hingegen als Ursache für einen achtfach beschleunigten Zerfall von Rubidium-Kondensaten überkritischer Opazität identifiziert, der die Lebensdauer des Systems auf etwa 200 ms beschränkt. Dies führt zu der Schlußfolgerung, daß sich die Wechselwirkung in Kondensaten mit „konventionellen“ Methoden kaum über das heute bereits erreichte Maß hinaus erhöhen läßt.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 werden die Grundlagen der BEK des idealen Gases von Symmetrieüberlegungen ausgehend zusammengefaßt und auf die im Experiment realisierte Situation eines inhomogenen Systems endlicher Teilchenzahl übertragen. Elastische und inelastische Stöße ultrakalter Atome stehen am Ursprung der Wechselwirkung in realen Gasen, bestimmen ihre Stabilität und sind Grundlage für die Beschreibung von Stoßlawinen. Dieser Themenkreis wird daher in Kapitel 3 theoretisch behandelt und

stellt einen der Schwerpunkte der Arbeit dar. Motiviert ist diese Gewichtung auch durch die Tatsache, daß in modernen BEK-Experimenten immer häufiger von den Möglichkeiten Gebrauch gemacht wird, die Streuung ultrakalter Atome zu beeinflussen. Dies setzt auf der einen Seite das Verständnis der komplexen Streuprozesse voraus, auf der anderen Seite findet sich in der Fachliteratur noch keine zusammenhängende Darstellung, die den schnellen Einstieg in das Gebiet ermöglicht. Die theoretischen Grundlagen der Arbeit werden schließlich mit Kapitel 4 abgeschlossen: Ausgehend von den zuvor gewonnenen Erkenntnissen mit Bezug auf ultrakalte Stöße werden hier die Wesenszüge der Mean-Field-Theorie zusammengefaßt und für das Experiment relevante Aspekte ausgearbeitet. Der verbleibende Teil der Arbeit ist von dem Umzug der Arbeitsgruppe von der Universität Konstanz an das MPI für Quantenoptik in Garching geprägt, der im Herbst des Jahres 1999 stattfand. Viele der im folgenden präsentierten Messungen wurden in Konstanz mit Hilfe der Apparatur durchgeführt, die in der Dissertation von Urban Ernst beschrieben ist [32]. Der Umzug bot die Gelegenheit, eine neue Apparatur mit den Zielen aufzubauen, die Stabilität des Experiments zu verbessern, die Erzeugung größerer Kondensate zu ermöglichen und die Dauer des experimentellen Zyklus zu reduzieren. Konstruktion und Charakterisierung dieser Apparatur bilden den zweiten Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit, ein dritter und letzter Schwerpunkt ist schließlich der experimentellen und theoretischen Untersuchung von Stoßlawinen gewidmet.

Der experimentelle Teil beginnt mit Kapitel 5 und einer Beschreibung der Methoden, die in beiden Apparaturen zur Kühlung und Speicherung des Gases eingesetzt werden. Der erste Abschnitt dieses Kapitels ergänzt die vorliegende Einleitung im Sinne einer Übersicht und Motivation der verschiedenen Schritte des Experiments, die im weiteren Verlauf des Kapitels einzeln behandelt werden. Eine Gegenüberstellung der Funktionsweise beider Apparaturen ist in Abschnitt 5.3 zu finden. Alle Methoden, auf die im Rahmen von Messungen bei der Detektion und der Bestimmung von Systemgrößen zurückgegriffen wird, sind anschließend in Kapitel 6 beschrieben. Es folgen mit Kapitel 7 Aspekte der technischen Realisierung insbesondere der neuen Apparatur. Mit der Atomquelle höchsten Flusses ist Kapitel 8 dem Herzstück der neuen Apparatur gewidmet. Hier wird insbesondere auf die Optimierung des Systems eingegangen, die auf einfachen theoretischen Überlegungen beruht und es ermöglicht, 6×10^9 Atome innerhalb von nur einer Sekunde mit den Methoden der Laserkühlung einzufangen und vorzukühlen.

Erste Hinweise auf Stoßlawinen ergeben sich aus Messungen zur Charakterisierung des Phasenübergangs bzw. des Kondensats, die in Kapitel 9 vorgestellt werden. Die Untersuchung von Stoßlawinen schließlich ist Gegenstand von Kapitel 10. Dieser letzte Abschnitt der Arbeit beruht auf der Publikation [33] und beginnt mit der Ausarbeitung eines Formalismus, der es ermöglicht, die Stoßwahrscheinlichkeiten der verschiedenen Zerfallsprodukte des Kondensats zu berechnen. Er bildet die Grundlage für ein einfaches Modell, in dessen Rahmen sich die Auswirkungen von Stoßlawinen auf die Lebensdauer ultrakalter Atomwolken quantifizieren lassen. Nach einem Vergleich zwischen Theorie und Experiment schließt die Arbeit mit einem Ausblick.

Kapitel 2

Bose-Einstein-Kondensation des idealen Gases

2.1 Ununterscheidbarkeit und Symmetrie

Die Bose-Einstein-Kondensation beruht, anders als der Begriff der *Kondensation* vermuten läßt, nicht auf einer Wechselwirkung, sondern auf dem Prinzip der Ununterscheidbarkeit von Teilchen. Damit handelt es sich um ein reines Quantenphänomen. Während nämlich in der klassischen Physik selbst „baugleiche“ Teilchen anhand ihrer Trajektorien stets zu verfolgen und somit prinzipiell unterscheidbar sind, erlaubt die Unschärferelation die Lokalisierung von „quantenmechanischen“ Teilchen im Phasenraum bestenfalls mit einer Auflösung, die dem Volumen h^3 einer Phasenraumzelle entspricht. Statt von einer Trajektorie kann man nur noch von einem Bereich sprechen, über den ein Teilchen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit „verschmiert“ ist: seiner Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Zwei Teilchen der gleichen Art sind daher nur unterscheidbar, solange sie sich in ihrer Vergangenheit im Phasenraum nie so nahe gekommen sind, daß ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeiten einen Überlapp hatten. Nach einem solchen Kontakt im Phasenraum sind die Teilchen prinzipiell nicht mehr identifizierbar. Das Pauli-Prinzip ist sicherlich die bekannteste Konsequenz der Ununterscheidbarkeit. Im folgenden soll kurz an ihre Rolle bei der Bose-Einstein-Kondensation erinnert werden.

Besetzung von Zuständen

Die unmittelbare Konsequenz der Ununterscheidbarkeit für die quantenmechanische Beschreibung eines Systems von N Teilchen ist die Invarianz des Hamilton-Operators bezüglich der Vertauschung aller Koordinaten zweier beliebiger Teilchen. Sie gewährleistet, daß sich Konfigurationen, die durch Vertauschen von Teilchen zustande kommen, nicht durch Messungen unterscheiden lassen. Formal bedeutet das, daß der Hamilton-Operator

und der Permutationsoperator $\hat{P}_{i,j}$ kommutieren und somit einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen besitzen. Diese sind Lösungen der Eigenwertgleichung

$$\hat{H} \Phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E_n \Phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N). \quad (2.1)$$

Da durch Wiederholung der gleichen Permutation die ursprüngliche Wellenfunktion reproduziert werden muß, gilt offensichtlich

$$\hat{P}_{i,j}^2 \Phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \lambda^2 \Phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \equiv \Phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N). \quad (2.2)$$

Die Eigenwerte λ des Permutationsoperators können daher nur ± 1 sein. Das bedeutet, daß die Eigenfunktionen bezüglich der Vertauschung entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein müssen. Jeder beliebige Zustand des Systems läßt sich somit als Superposition von Eigenfunktionen $\Phi_n^{(+)}$ bzw. $\Phi_n^{(-)}$ mit definiertem Symmetriecharakter schreiben. Da die Ununterscheidbarkeit durch keine Wechselwirkung aufgehoben werden kann, muß jeder in Betracht zu ziehende Operator ebenfalls invariant unter Teilchenvertauschung sein. Damit ist gesichert, daß die Symmetrie einer Eigenfunktion nicht durch die Wirkung eines Operators geändert werden kann, daß also die beiden durch die Symmetrie definierten Teilräume des Hilbertraums nicht mischen. Daher genügt es stets, Systeme zu betrachten, deren Zustände sich *entweder* aus symmetrischen *oder* aus antisymmetrischen Eigenfunktionen zusammensetzen. Sinngemäß unterscheidet man in der Quantenmechanik zwischen Bosonen und Fermionen. Diese Zweiteilung der Natur deckt sich mit allen bisherigen Beobachtungen des Menschen.

So gleichberechtigt die beiden Symmetrien auch erscheinen, so fundamental verschieden sind ihre Auswirkungen auf das Verhalten von Teilchensystemen. Am einfachsten erkennt man das an dem Zusammenhang zwischen den Zuständen, die einem einzelnen Teilchen zur Verfügung stehen, und dem Gesamtzustand des N-Teilchen-Systems. In der Abwesenheit von Wechselwirkungen zerfällt der Hamilton-Operator eines Systems identischer Teilchen in die Summe der Ein-Teilchen-Operatoren:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{h}_k. \quad (2.3)$$

Sind $\phi_i(\vec{r})$ die Eigenfunktionen des Ein-Teilchen-Problems, so erfüllen alle Produktzustände $\phi_i(\vec{r}_1) \cdots \phi_j(\vec{r}_N)$ die Eigenwertgleichung des Gesamtsystems. Da sie jedoch (falls nicht alle Indizes i, j gleich sind) offensichtlich weder symmetrisch noch antisymmetrisch sind, muß man erst durch geeignete Superpositionen Zustände mit der geforderten Symmetrie schaffen. Dies geschieht durch *Symmetrisierung* bzw. *Antisymmetrisierung* mit Hilfe der verallgemeinerten Permutationsoperatoren \hat{P} . Sie überführen einen Produktzustand $\phi_1(\vec{r}_1) \cdots \phi_i(\vec{r}_i) \cdots \phi_N(\vec{r}_N)$ durch Vertauschen der Koordinaten in die Konfigurationen $\text{sgn}(P) \cdot \phi_1(\vec{r}_{P_1}) \cdots \phi_i(\vec{r}_{P_i}) \cdots \phi_N(\vec{r}_{P_N})$. Dabei hat $\text{sgn}(P)$ für Bosonen stets den Wert 1 und für Fermionen ± 1 , je nach dem, ob eine gerade oder eine ungerade Anzahl sukzessiver Vertauschungen zweier Koordinaten die entsprechende Permutation erzeugt. Die Zustände des Systems erhalten dann die Form:

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{Fermi}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \text{Norm} \sum_P \text{sgn}(P) \hat{P} \phi_1(\vec{r}_1) \cdots \phi_i(\vec{r}_i) \cdots \phi_N(\vec{r}_N), \\ \Phi_{\text{Bose}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \text{Norm} \sum_P \hat{P} \phi_1(\vec{r}_1) \cdots \phi_i(\vec{r}_i) \cdots \phi_N(\vec{r}_N), \end{aligned} \quad (2.4)$$

wobei über alle möglichen Permutationen der Koordinaten summiert wird. Offenbar läßt sich die Wellenfunktion eines fermionischen Systems als Determinante¹ schreiben:

$$\Phi_{\text{Fermi}}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \text{Norm} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) & \cdots & \phi_1(\vec{r}_N) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) & \cdots & \phi_2(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(\vec{r}_1) & \phi_N(\vec{r}_2) & \cdots & \phi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (2.5)$$

Es ist leicht zu erkennen, daß die Determinante identisch Null ist, wenn zwei der Ein-Teilchen-Zustände ϕ_i, ϕ_j gleich sind, wenn also in dem System zwei Teilchen den gleichen Zustand besetzen². In einem fermionischen System dürfen daher alle Zustände *höchstens* einfach besetzt sein. Dies ist nichts anderes als das Pauli-Prinzip. Es ist somit allein auf die Symmetrie der Wellenfunktion zurückzuführen und sorgt dafür, daß sich Fermi-Gase fundamental anders verhalten als klassische Gase. Demgegenüber unterliegen Bosonen keiner Einschränkung der Besetzungszahlen. Daß die Symmetrie auch in ihrem Fall zu erheblichen Abweichungen vom klassischen Gas führt, wird im folgenden Abschnitt deutlich.

2.2 Zustandssumme und Besetzungsstatistik

Um die thermodynamischen Eigenschaften eines Teilchensystems zu bestimmen, verfolgt man in der statistischen Mechanik einen Wahrscheinlichkeitsansatz: Gesucht werden dabei stets die Wahrscheinlichkeiten, unter gegebenen Randbedingungen mikroskopische, energetisch stationäre Zustände des Systems vorzufinden. Kennt man die Verteilung dieser Wahrscheinlichkeiten, ist es prinzipiell möglich, die makroskopischen Zustandsgrößen des Systems durch eine Mittelung über mikroskopische Eigenschaften zu gewinnen.

Die Energie eines vollständig isolierten Systems ist bis auf einen infinitesimal kleinen Bereich festgelegt, und es ist gleich wahrscheinlich, eine der mikroskopischen Konfigurationen (sog. Mikrozustände) vorzufinden, die zu der entsprechenden Energie führen. Für ein offenes System hingegen, das mit einem Wärme- und einem Teilchenreservoir in Kontakt steht, sind lediglich die Temperatur T , das Volumen V und das chemische Potential μ festgelegt³. Das System kann daher theoretisch alle Energie-Eigenzustände annehmen und eine beliebige Zahl von Teilchen enthalten. Bei bekannter Symmetrie ist ein Quantenzustand des Systems vollständig durch den Satz $\{n_k\}$ der Besetzungszahlen der Ein-Teilchen-Zustände ϕ_k (mit den Energieeigenwerten ϵ_k) charakterisiert. Für Energie und Teilchenzahl des Zustands gelten dann die Relationen

$$E = \sum_k \epsilon_k n_k \quad \text{und} \quad N = \sum_k n_k. \quad (2.6)$$

¹ Die sog. *Slaterdeterminante*.

² In diesem Fall sind zwei der Zeilen der Determinante gleich.

³ Man spricht in diesem Zusammenhang vom großkanonischen Ensemble.

Die Wahrscheinlichkeit $p_{\{n_k\}}$, eine bestimmte Konfiguration vorzufinden, die zu E und N führt, wird jetzt proportional zu der Anzahl der Mikrozustände des *Reservoirs* sein, die mit dem Energie-Eigenzustand und der Teilchenzahl des betrachteten Systems kompatibel sind. Ausgehend von dieser Überlegung ist es leicht zu zeigen, daß

$$p_{\{n_k\}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp \left(-\beta \sum_{k=0}^{\infty} n_k (\epsilon_k - \mu) \right) \quad (2.7)$$

gilt [34], mit $\beta = (k_B T)^{-1}$. Um die Normierungskonstante \mathcal{Z} zu bestimmen, muß die Exponentialfunktion in Gleichung (2.7) über alle erlaubten Konfigurationen des Systems zu allen Energien und Teilchenzahlen aufsummiert werden. Dies kommt einer Abzählung der erlaubten Zustände des Systems gleich. Daher wird \mathcal{Z} als *Zustandssumme* bezeichnet. Es gilt also,

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_k\}} \exp \left(-\beta \sum_k n_k (\epsilon_k - \mu) \right) \quad (2.8)$$

zu berechnen. Dazu muß zunächst die formale Summation über Sätze von Besetzungszahlen in eine Funktion der einzelnen Besetzungszahlen umgewandelt werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{n_k\}} \prod_{k=0}^{\infty} \exp(-\beta n_k (\epsilon_k - \mu)) \\ &= \prod_{k=0}^{\infty} \sum_{n_k} \exp(-\beta n_k (\epsilon_k - \mu)) . \end{aligned} \quad (2.9)$$

Nun werden Annahmen über die Symmetrie der N-Teilchen-Wellenfunktionen eine entscheidende Rolle spielen: Sie bewirkt für Fermionen $n_k = 0, 1$, während Ein-Teilchen-Zustände durch Bosonen beliebig oft besetzt werden können. Man erhält daher:

$$\mathcal{Z}_{\text{Fermi}} = \prod_{k=0}^{\infty} \{1 + \exp[-\beta (\epsilon_k - \mu)]\} , \quad (2.10)$$

$$\mathcal{Z}_{\text{Bose}} = \prod_{k=0}^{\infty} \frac{1}{1 - \exp[-\beta (\epsilon_k - \mu)]} . \quad (2.11)$$

Um zur Beziehung (2.11) zu gelangen, muß vorausgesetzt werden, daß die Zustandssumme und damit die geometrische Reihe in Gleichung (2.9) konvergieren. Das Gegenteil wäre natürlich unphysikalisch. Da dies auch für den Grundzustand mit $k = 0$ gelten muß, folgt daraus sofort, daß das chemische Potential für Bosonen stets kleiner als die Energie des Ein-Teilchen-Grundzustandes sein muß⁴.

In einem klassischen Gas kann man zwar die Ununterscheidbarkeit der Teilchen zusätzlich postulieren, eine zur Symmetrie der Wellenfunktion äquivalente Eigenschaft kann jedoch

⁴ Im thermodynamischen Limes ist diese Null, und das chemische Potential muß daher negativ sein.

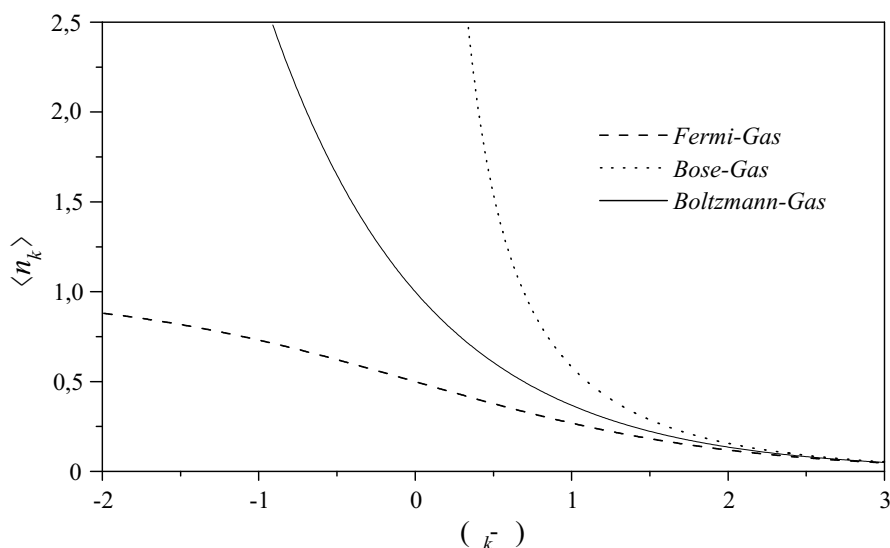


Abbildung 2.1: Mittlere Besetzungszahl von Ein-Teilchen-Zuständen in klassischen und Quantengasen.

nicht eingeführt werden. Läßt man die Forderung der Symmetrie fallen, entspricht ein Satz $\{n_k\}$ von Besetzungszahlen nicht einem, sondern $g = (n_1!n_2!\cdots)$ Zuständen. In einem solchen Gas ist die Wahrscheinlichkeit *einen* dieser Zustände vorzufinden daher $p_{\{n_k\}}/g$. Hier deutet sich bereits an, daß die klassische und die quantenmechanische Beschreibung zu unterschiedlichen Ergebnissen führen werden, sobald die Mehrfachbesetzung von Ein-Teilchen-Zuständen wahrscheinlich wird. Für den klassischen Fall erhält man als Normierung:

$$\mathcal{Z}_{\text{Klass}} = \prod_{k=0}^{\infty} \exp \{ \exp [-\beta(\epsilon_k - \mu)] \}. \quad (2.12)$$

Da nun die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zustände des Systems bekannt ist, kann der Erwartungswert für die Besetzung der Ein-Teilchen-Zustände entsprechend $\langle n_k \rangle = \sum_{\{n_k\}} p_{\{n_k\}} n_k$ durch Mittelung gewonnen werden. Für die drei Fälle erhält man die Ergebnisse:

$$\langle n_k \rangle_{\text{Fermi}} = \frac{1}{\exp [\beta(\epsilon_k - \mu)] + 1}, \quad (2.13)$$

$$\langle n_k \rangle_{\text{Bose}} = \frac{1}{\exp [\beta(\epsilon_k - \mu)] - 1}, \quad (2.14)$$

$$\langle n_k \rangle_{\text{Klass}} = \exp [-\beta(\epsilon_k - \mu)]. \quad (2.15)$$

In Abbildung 2.1 werden die mittleren Besetzungszahlen (2.15), (2.13) und (2.14), eines klassischen mit jenen von Fermi- und Bose-Gasen verglichen. Für $\epsilon_k \gg k_B T$ sind die Besetzungszahlen in den drei Systemen identisch. Bildlich gesprochen spiegelt dies die Tatsache wider, daß bei hohen Energien quantenmechanische Teilchen ähnlich gut lokalisiert sind wie klassische. Die mittlere Besetzung niederenergetischer Zustände ist jedoch in einem Bose-Gas höher, in einem Fermi-Gas geringer als die klassisch vorhergesagte.

Zusammenfassend kann also folgendes festgehalten werden: Die Symmetrie der N-Teilchen-Wellenfunktion (oder ihr Fehlen) bestimmt die Abzählvorschrift der Konfigurationen, die das System einnehmen kann, und damit auch die mittlere Besetzungszahl der Ein-Teilchen-Zustände im System. In Quantengasen führt dies zu der erstaunlichen Tatsache, daß Teilchen, die dem System hinzugefügt werden, entweder Zustände bevorzugen, die bereits mit hoher Wahrscheinlichkeit besetzt sind, oder solche, für die das Gegenteil zutrifft, je nach dem, welche Symmetrie die Wellenfunktion des Systems besitzt. Bosonen ziehen sich also gewissermaßen an, auch wenn zwischen ihnen keinerlei Wechselwirkung im eigentlichen Sinne vorliegt. Darauf beruht die Bose-Einstein-Kondensation, auf die nun genauer eingegangen werden soll.

2.3 Das ideale Bose-Gas im harmonischen Potential

Die Bose-Einstein-Kondensation (im folgenden als BEK bezeichnet) eines idealen Gases wird in der Regel im dreidimensionalen Kastenpotential und im thermodynamischen Limes behandelt (siehe z.B. [35, 36]). Da sich beides im Experiment nicht realisieren läßt, wird hier der Fall eines harmonischen Potentials

$$U(x, y, z) = \frac{m}{2} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2) \quad (2.16)$$

betrachtet und auf die Rolle der endlichen Teilchenzahl eingegangen [37, 38, 26]. Dabei sind $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ die Oszillationsfrequenzen der Teilchen mit der Masse m .

Ausgangspunkt der Diskussion ist die Frage, wie sich die Symmetrie bzw. „Anziehung“ der Bosonen auf den Erwartungswert der Teilchenzahl in angeregten Zuständen des Systems auswirkt. Gemäß Gleichung (2.6) erhält man die Gesamtteilchenzahl durch Summation der mittleren Besetzungszahlen (2.14). Im Falle $k_B T \gg (\hbar\omega_x, \hbar\omega_y, \hbar\omega_z)$ kann das Energiespektrum als kontinuierlich angesehen werden und die Grundzustandsenergie beträgt in guter Näherung Null. In dieser semiklassischen Näherung ist es erlaubt, die Summe in Gleichung (2.6) in ein Integral über die Energie umzuschreiben, wobei der Anzahl von Zuständen mit einer Energie ϵ durch die Gewichtung mit der *Zustandsdichte* $D(\epsilon)$ Rechnung getragen wird:

$$N = \int_0^\infty \frac{D(\epsilon) d\epsilon}{\tilde{z}^{-1} \exp(\beta\epsilon) - 1} + N_0 \quad \text{mit} \quad D(\epsilon) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^3}. \quad (2.17)$$

Dabei wurden die *Fugazität* $\tilde{z} = e^{\beta\mu}$ und das geometrische Mittel $\omega = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ der Oszillationsfrequenzen eingeführt. Da der Zustand $\epsilon = 0$ in der Zustandsdichte nicht berücksichtigt ist, muß die Besetzung $N_0 = \tilde{z}/(1 - \tilde{z})$ des Grundzustandes gesondert betrachtet werden. Das Integral in Gleichung (2.17) läßt sich leicht auf die Form

$$g_\nu(\tilde{z}) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1} dx}{\tilde{z}^{-1} e^x - 1} = \sum_{l=1}^\infty \frac{\tilde{z}^l}{l^\nu} \quad (2.18)$$

einer Polylogarithmusfunktion bringen⁵. Man erhält schließlich:

$$N - N_0 = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 g_3(\tilde{z}) \quad \text{mit} \quad N_0 = \frac{\tilde{z}}{1 - \tilde{z}}. \quad (2.19)$$

Da das chemische Potential den Überlegungen in Abschnitt 2.1 zufolge stets kleiner als die Energie des Grundzustands sein muß, gilt $0 \leq \tilde{z} \leq 1$. In diesem Bereich erreicht $g_3(\tilde{z})$ höchstens den Wert $g_3(1) = 1,202$. Das bedeutet, daß die Anzahl der Teilchen in den angeregten Zuständen für einen festen Wert von ω beschränkt ist. Diese „Sättigung“ tritt ein, sobald die Temperatur erreicht wird, bei der das chemische Potential die Grundzustandsenergie erreicht. Bei geringeren Temperaturen finden alle überschüssigen Teilchen nur im Grundzustand des Potentials Platz, für dessen Besetzung es keine Einschränkung gibt. Eine solche makroskopische Besetzung des Zustands niedrigster Energie würde in einem klassischen Gas nur im trivialen Grenzfall $T \rightarrow 0$ auftreten. Demgegenüber setzt in einem Quantengas gemäß Gleichung (2.19) die Bose-Einstein-Kondensation bei der endlichen Temperatur

$$T_c = \frac{\hbar \omega}{k_B} \left(\frac{N}{1,202} \right)^{1/3} \quad (2.20)$$

ein (zu sehen für $N_0 \rightarrow 0$). Durch Einsetzen von (2.20) in (2.19) erhält man den Verlauf der relativen Grundzustandsbesetzung mit der Temperatur:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \quad \text{für} \quad T \leq T_c. \quad (2.21)$$

Streng genommen ist die Übergangstemperatur im Sinne eines Phasenübergangs nur im thermodynamischen Limes wohldefiniert. Da das Gas im harmonischen Potential ein Volumen $V \propto \omega^{-3}$ einnimmt, ist der thermodynamische Grenzfall durch $N \rightarrow \infty$ und $\omega \rightarrow 0$ unter der Nebenbedingung $N\omega^3 = \text{const.}$ zu vollziehen. Dadurch kommt dem Ausdruck (2.20) tatsächlich die Bedeutung einer Übergangstemperatur zu.

Im Experiment läßt sich dieser Grenzfall nur bedingt realisieren. Zudem bricht die semi-klassische Näherung für geringe Teilchenzahlen zusammen, da die Übergangstemperatur mit der Teilchenzahl abnimmt. Ist $k_B T \gg \hbar \omega$ nicht mehr erfüllt, muß statt des Integrals in Gleichung (2.17) entweder die Summe über das exakte Energiespektrum ausgewertet [37] oder zumindest auf eine genauere Darstellung der Zustandsdichte $D(\epsilon)$ zurückgegriffen werden [39, 40]. Dies führt dazu, daß die relative Grundzustandsbesetzung bei T_c nicht mehr sprunghaft ansteigt, sondern stetig differenzierbar. Die Übergangstemperatur kann dann lediglich durch Extrapolation bestimmt werden. Bezüglich (2.20) erhält man in erster Ordnung die Korrektur [39]

$$\frac{\delta T_c}{T_c^{(0)}} = -\frac{g_2(1)}{2 g_3(1)^{2/3}} \frac{\bar{\omega}}{\omega} N^{-1/3} = -0,73 \frac{\bar{\omega}}{\omega} N^{-1/3} \quad \text{mit} \quad \bar{\omega} = \frac{\omega_x + \omega_y + \omega_z}{3}. \quad (2.22)$$

⁵ Die wichtigsten Eigenschaften dieser Funktionen im Zusammenhang mit der BEK sind z.B. in [36] zusammengefaßt.

Die Grundzustandsbesetzung folgt dem Verlauf

$$\frac{N_0}{N} \simeq 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(0)} + \delta T_c} \right)^3 - 3 \frac{\delta T_c}{T_c^{(0)}} \left(\frac{T}{T_c^{(0)} + \delta T_c} \right)^2. \quad (2.23)$$

Unter typischen experimentellen Bedingungen liegen beide Korrekturen im Bereich von 1-2 %. Daher behält die BEK auch unter realistischen Bedingungen die Signatur eines Phasenübergangs.

Aus dem gleichen Grund kann die semiklassische Näherung auch im Falle endlicher Teilchenzahlen zur Berechnung der Dichteverteilung herangezogen werden. Für die Teilchen in angeregten Zuständen geschieht dies, indem man in den mittleren Besetzungszahlen (2.14) die Energie als Funktion der Phasenraumkoordinaten darstellt und anschließend über den Impulsraum abintegriert:

$$n_T(x, y, z) = \frac{1}{h^3} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{\tilde{z}^{-1} \exp\{\beta [p^2/2m + U(x, y, z)]\} - 1}. \quad (2.24)$$

Durch Variablensubstitution läßt sich das Integral wieder auf die Form (2.18) bringen, mit dem Ergebnis:

$$n_T(x, y, z) = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2} \left(\tilde{z} e^{-\beta U(x, y, z)} \right). \quad (2.25)$$

Die thermische de Broglie-Wellenlänge $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ ist ein Maß für die Größe des Bereiches, über den ein Teilchen „verschmiert“ ist. Damit kommt der Kondensation in dieser Schreibweise eine anschauliche Bedeutung zu: Sie tritt ein, wenn die zentrale Dichte $n_p = n_T(0, 0, 0)$ und die Temperatur die Bedingung

$$n_p \lambda_T^3 = g_{3/2}(1) = 2,612 \quad (2.26)$$

erfüllen⁶. Da $1/\sqrt[3]{n_p}$ dem mittleren Abstand der Teilchen im Zentrum des Gases entspricht, bedeutet dies, daß die Kondensation einsetzt, sobald hier die Teilchen „überlappen“.

Im Grenzfall $\tilde{z} \rightarrow 0$ gilt $g_{3/2}(\tilde{z}) \rightarrow \tilde{z}$ und Gleichung (2.25) geht in die gaußförmige Dichteverteilung eines klassischen Gases über. In diesem Fall sind die Breiten der Verteilung unabhängig von der Teilchenzahl und im Mittel durch $\sigma = \sqrt{(k_B T)/(m \omega^2)}$ gegeben. Für $\tilde{z} \rightarrow 1$ zeichnet sich (2.25) gegenüber der klassischen Verteilung durch eine Überhöhung der zentralen Dichte aus, wie in Abbildung 2.2 zu sehen ist. Die Breiten der Verteilung sind in diesem Fall von der Temperatur *und* der Teilchenzahl abhängig, jedoch nach wie vor von der Größenordnung σ .

Die Dichteverteilung der kondensierten Teilchen ergibt sich aus der Grundzustands-Wellenfunktion des harmonischen Oszillators:

$$n_0(x, y, z) = N_0 |\phi_0(x, y, z)|^2 = N_0 \left(\frac{m \omega}{\pi \hbar} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{\hbar} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2) \right]. \quad (2.27)$$

Das Kondensat hat somit eine gaußförmige Dichteverteilung, deren mittlere Breite durch

⁶ Die Größe $n_p \lambda_T^3$ wird als (dimensionslose) Phasenraumdichte bezeichnet.

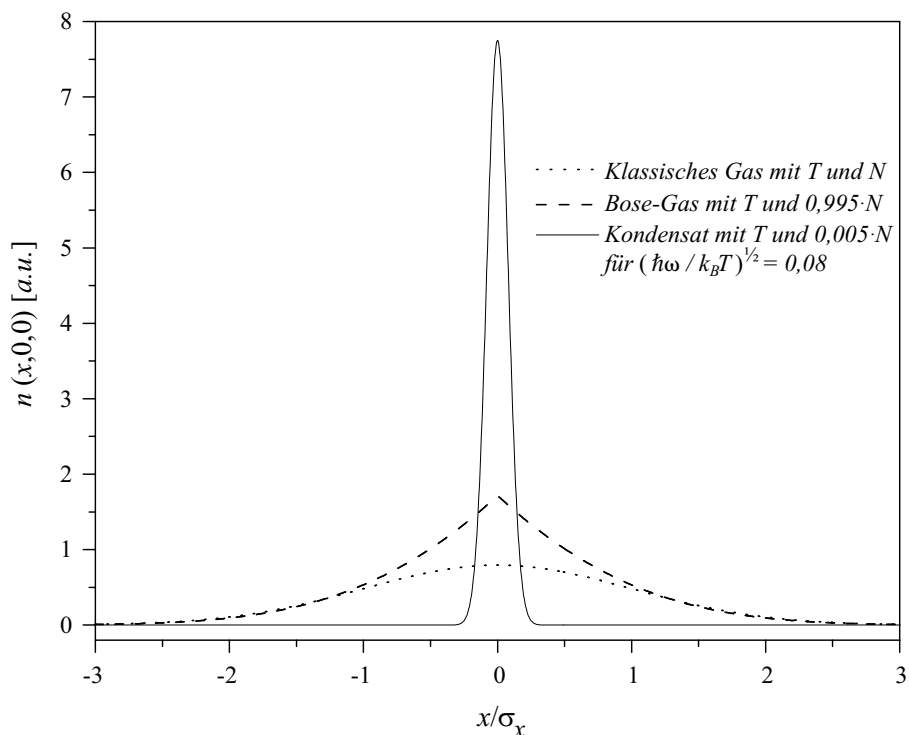


Abbildung 2.2: Dichteverteilung eines Bose- und eines klassischen Gases bei gleicher Teilchenzahl und Temperatur, aufgetragen über eine der Koordinaten. T ist so gewählt, daß im Bose-Gas bereits 0,5 % der Teilchen kondensiert sind.

die Oszillatorlänge $a_{\text{ho}} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ gegeben ist. Da die Gültigkeit der semiklassischen Näherung vorausgesetzt wurde, gilt stets $a_{\text{ho}}/\sigma = \sqrt{(\hbar\omega)/(k_B T)} \ll 1$. Im harmonischen Potential findet daher die Kondensation, anders als im Kastenpotential, auch im Ortsraum statt und äußert sich durch einen ausgeprägten Anstieg der zentralen Dichte. Dieses Verhalten bietet eine einfache Möglichkeit, die Kondensation experimentell nachzuweisen. Es ist in Abbildung 2.2 dargestellt, wobei für a_{ho}/σ der im Experiment realisierte Wert gewählt wurde. Der Grundzustand enthält lediglich ein halbes Prozent der Gesamtteilchenzahl, die Temperatur beträgt somit $0,998 T_c$. Man lasse sich nicht dazu verleiten, die Flächen der Verteilungen als ein Maß für die Teilchenzahl aufzufassen, da bei ihrer dreifachen Integration weit vom Zentrum entfernte Bereiche verstärkt zur Teilchenzahl beitragen.

Die Kondensation im Ortsraum birgt eine weitere Signatur der BEK in einem anisotropen harmonischen Potential: Die Impulsverteilung der nichtkondensierten Teilchen erhält man analog zu Gleichung (2.24) durch Integration über den Ortsraum. Sie ist stets räumlich isotrop; ihre Breite beträgt $\sigma_p = \sqrt{m k_B T}$ und ist erwartungsgemäß allein durch die Temperatur gegeben. Im Gegensatz dazu sind die Teilchen im Grundzustand mit minimaler Unschärfe lokalisiert. Entsprechend der Unschärferelation ist ihre Impulsbreite in einem anisotropen Potential ebenfalls anisotrop und entspricht jeweils $\sigma_{p,i} = \hbar/a_{\text{ho}}[\omega_i]$. Es bietet sich daher an, das Gas durch eine instantane Vergrößerung des Speichervolumens frei

expandieren zu lassen. Mit fortschreitender Dauer der Expansion wird die Ortsverteilung des Gases zunehmend seine Impulsverteilung widerspiegeln und somit im nichtkondensierten Fall isotrop werden (siehe Anhang A). Im Gegensatz dazu expandiert das Kondensat anisotrop und schneller in Richtungen, entlang derer es zuvor schärfer lokalisiert war.

Aufgrund der geringen Ausdehnung des Grundzustandes übersteigt die Dichte des Kondensats jene der Teilchen in den angeregten Zuständen sehr schnell um Größenordnungen. Da dem Experimentator ausschließlich reale Gase zur Verfügung stehen, behält die ideale Gastheorie nur im Falle sehr starker Verdünnung ihre Gültigkeit. Es ist daher notwendig, Effekte der Wechselwirkung zwischen den Teilchen zu untersuchen. Dies ist Gegenstand des folgenden Kapitels.

Kapitel 3

Die Realität: Wechselwirkende Bosonen

Atome sind bekanntlich zusammengesetzte Teilchen mit einer komplizierten inneren Struktur. Entscheidend für ihr statistisches Verhalten ist jedoch allein ihre Spinquantenzahl. Die meisten Atome des Periodensystems weisen einen ganzzahligen Spin auf und verhalten sich daher, dem Spin-Statistik-Theorem entsprechend, wie Bosonen [3]. Anders als zwischen den Teilchen des idealen Gases können jedoch zwischen Atomen erhebliche Kräfte wirken. Im großen Abstand sind diese attraktiv und spiegeln die Dispersions- oder van der Waals-Wechselwirkung wider, während das Pauli-Prinzip zu einer starken, repulsiven Austauschwechselwirkung führt, sobald die Elektronenwolken der Atome überlappen.

Auf den ersten Blick verbietet die interatomare Wechselwirkung die BEK eines realen Gases: Die Bedingung $n \lambda_T^3 = 2,612$ erreichen nahezu alle bekannten Gase nur im festen Zustand, wo es natürlich keinen Sinn macht, von der BEK zu sprechen¹. Tatsächlich erweist sich jedoch die Wechselwirkung zwischen den Atomen als eine der wichtigsten Voraussetzungen für die experimentelle Realisierung der BEK in einem verdünnten Gas. Die Wechselwirkung äußert sich durch Stöße zwischen den Teilchen. Im Gegensatz zu einem idealen Gas gewährleisten sie die Thermalisierung des Ensembles auch in der Abwesenheit von materiellen Wänden. Dies ermöglicht zum einen das Experimentieren an rein magnetisch (oder optisch) gespeicherten Gasen in einem Vakuumsystem, das sich bei Raumtemperatur befindet. Wie sich in Kapitel 7.3 zeigt, ist in einem solchen System die Isolation des Gases von der Umwelt so gut, daß es bei einer für das Experiment typischen Temperatur von ca. $1 \mu\text{K}$ einer umweltbedingten „Heizrata“ von lediglich etwa 20 nK/s ausgesetzt ist. Zum anderen erlauben die kontaktlose Speicherung und die Stoßthermalisierung den Einsatz phasenraum- oder ensemblespektiver Kühlmethode wie der Verdampfungskühlung (siehe Kapitel 5.6) und der sympathetischen Kühlung [42]. Mit Hilfe dieser Verfahren ist es überhaupt erst möglich, Temperaturen von wenigen 10 nK zu erreichen

¹ Die einzige Ausnahme bildet Helium, das sogar bei extrem tiefen Temperaturen flüssig bleibt. Die seit langem etablierte Annahme, daß ^4He in der Tat BEK aufweist, konnte erst kürzlich unmittelbar bestätigt werden [41].

und damit in Bereiche vorzustößen, die mit kryogenen Methoden unzugänglich sind. Der kontaktlosen Speicherung kommt jedoch eine zusätzliche, nicht minder wichtige Bedeutung zu: Die erste Stufe auf dem Weg zu einem Festkörper besteht in der Molekülbildung. In der Abwesenheit von Wänden ist diese aus Energie- und Impulserhaltungsgründen nur möglich, wenn in dem Gas (mindestens) drei Atome gleichzeitig aufeinandertreffen. Bei geringen Dichten sind solche Ereignisse jedoch so selten, daß sich das Gas extrem stark unterkühlen läßt. Die Kondensation erreicht man schließlich in einem metastabilen Zustand, dessen Lebensdauer Minuten betragen kann, eine Zeitspanne, die für nahezu alle denkbaren Experimente ausreicht.

Die extrem tiefe Temperatur, bei der die Kondensation eintritt, erfordert die quantenmechanische Beschreibung von Stößen. Elastische Stöße entsprechen dabei in guter Näherung der Streuung an einem Zentralpotential. Im folgenden wird daher kurz auf deren Grundbegriffe eingegangen. Da Atome jedoch eine Struktur besitzen, kann sich ihr innerer Zustand bei einem Streuprozess ändern. Ein solcher, inelastischer Stoß führt stets zu einem Verlust der beteiligten Atome. Zum einen, weil ein unterscheidbares Teilchen nicht mehr zur Phasenraumdichte des Ensembles beiträgt, und zum anderen, weil bei dem Prozess in der Regel sehr viel mehr Energie freigesetzt wird, als kondensierte Atome im Mittel besitzen dürfen. Die Berechnung der entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten (und damit der relevanten Verlustraten) ist eine Wissenschaft für sich. Daher kann an dieser Stelle nur auf ihren Ursprung eingegangen werden.

3.1 Elastische Stöße

Die Streuung zweier Teilchen, die über ein Zentralpotential miteinander wechselwirken, entspricht in Relativkoordinaten der Streuung eines Teilchens mit der reduzierten Masse $m_r = m/2$ an dem Zentralpotential. Zwar stellt das einfallende Teilchen ein Wellenpaket mit einer Unschärfe in Impuls und Ort dar, jedoch läßt sich dieses als Superposition von ebenen Wellen $\psi_k^{(0)}(z) \sim e^{ikz}$ mit scharfem Impuls schreiben. Da es sich um elastische Streuung handelt, ändert sich die Energie der ebenen Wellen durch den Streuprozess nicht. Gesucht werden daher Eigenzustände von

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi_k(\vec{r}) = E_k\psi_k(\vec{r}) \quad (3.1)$$

zur wohldefinierten Energie $E_k = (\hbar k)^2/(2m_r)$. Die einlaufende Welle $\psi_k^{(0)}(z)$ erzeugt am Streuzentrum eine Streuwelle $\psi_k^{(s)}(\vec{r})$, so daß die Lösung des Streuproblems die Form $\psi_k(\vec{r}) = \psi_k^{(0)}(z) + \psi_k^{(s)}(\vec{r})$ hat. Für ein kurzreichweitiges Potential ist dieser Zustand für $r \rightarrow \infty$ wieder kräftefrei und muß daher ebenfalls eine ebene Welle sein. Man sucht somit Zustände mit der asymptotischen Form

$$\psi_k(r, \theta) \sim e^{ikr \cos \theta} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (3.2)$$

wobei θ der Streuwinkel und $f(k, \theta)$ die Streuamplitude sind. Dieses formale Ergebnis ist insoweit von Bedeutung, als es den Streuzustand mit den relevanten physikalischen

Größen des Streuprozesses in Verbindung setzt: dem differentiellen und dem totalen Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(k, \theta)}{d\Omega} &= |f(k, \theta)|^2 \quad \text{bzw.} \\ \sigma(k) &= \int d\Omega \frac{d\sigma(k, \theta)}{d\Omega}.\end{aligned}\quad (3.3)$$

Das Problem reduziert sich somit auf die Bestimmung der Streuamplitude. Für sie kann die Integralform

$$f(k, \theta) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik(\vec{e}_r \cdot \vec{r}')} V(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}') d^3r' \quad (3.4)$$

angegeben werden, die die asymptotischen Werte der Wellenfunktion (also $f(k, \theta)$) mit jenen aus dem Wirkungsbereich des Potentials implizit verknüpft (siehe z.B. [43, 44]). Für schwache Potentiale oder Potentiale endlicher Stärke, die für $\vec{r} \rightarrow \infty$ sehr schnell verschwinden, ist die Annahme gerechtfertigt, daß sich die gestreute Welle nur unwesentlich von der einlaufenden unterscheidet. In diesem Fall läßt sich das Integral in der Bornschen Näherung mit $\psi_k(\vec{r}') \simeq e^{i\vec{k}\vec{r}'}$ auswerten, und das Streuproblem ist in einem störungstheoretischen Ansatz erster Ordnung gelöst.

Im Falle eines Zentralpotentials kann die Form der Streuamplitude durch einen Vergleich des Ausdrucks (3.2) mit der asymptotischen Lösung der Schrödingergleichung (3.1) genauer spezifiziert werden. Aufgrund der Kugelsymmetrie des Potentials ist der Drehimpuls erhalten, und es bietet sich eine Entwicklung von $\psi_k(\vec{r})$ nach dessen Eigenfunktionen, den Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\theta, \phi)$, an. Da die Streuung nicht vom Azimutwinkel ϕ abhängen wird ($m = 0$), reduzieren sich diese auf die Legendre-Polynome $P_l(\cos \theta)$ und so lautet der Ansatz:

$$\psi_k(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_{k,l}(r)}{r} P_l(\cos \theta). \quad (3.5)$$

Damit erhält man aus der Schrödingergleichung (3.1) die eindimensionalen Radialgleichungen

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{k,l}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r) \right) u_{k,l}(r) = 0. \quad (3.6)$$

Im kräftefreien Fall ($V(r) = 0$) sind die Lösungen $u_{k,l}^{(0)} = i^l (2l+1) r j_l(kr)$ dieser Differentialgleichung durch die sphärischen Bessel-Funktionen gegeben. Ausgehend von deren Verhalten für große r (siehe z.B. [45]) läßt sich die einlaufende Welle asymptotisch als

$$\psi_k^{(0)}(r, \theta) \sim \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[(-1)^{l+1} \frac{e^{-ikr}}{r} + \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (3.7)$$

darstellen. Dies entspricht einer paarweisen Überlagerung ein- und auslaufender Partialwellen mit einer relativen Phase von 0 oder π , je nach Parität von l .

Wie bereits erwähnt, gilt $V(r) = 0$ auch nach der Streuung für hinreichend große r . Die Streuung wird jedoch den auslaufenden Anteil von (3.7) verändern. Da aber die Teilchenzahl bei der elastischen Streuung erhalten ist, müssen der ein- und der auslaufende Fluß gleich sein. Aufgrund der Drehimpulserhaltung betrifft diese Forderung jedes einzelne Paar von Partialwellen, deren Amplituden folglich gleich sein müssen. Daher wird sich die Lösung des vollen Streuproblems asymptotisch von der des kräftefreien Falles allein durch Phasenverschiebungen $2\eta_l(k)$ der auslaufenden Partialwellen unterscheiden. Es gilt somit

$$\psi_k(r, \theta) \sim \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[(-1)^{l+1} \frac{e^{-ikr}}{r} + e^{2i\eta_l(k)} \frac{e^{ikr}}{r} \right]. \quad (3.8)$$

Andererseits sollte sich die Lösung des Streuproblems asymptotisch gemäß (3.2) auch als Summe der einlaufenden Welle (3.7) und einer mit der Streuamplitude multiplizierten Kugelwelle darstellen lassen. Durch Koeffizientenvergleich erhält man dann sofort

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{2i\eta_l(k)} - 1 \right) P_l(\cos \theta). \quad (3.9)$$

Der differentielle und der totale Wirkungsquerschnitt berechnen sich somit aus den Streuphasen $\eta_l(k)$, zu deren Bestimmung die Radialgleichungen (3.6) mit den Randbedingungen (3.8) und $u_{k,l}(0) = 0$ gelöst werden müssen. An dieser Stelle wird häufig das sog. S-Matrixelement

$$S_l(k) = e^{2i\eta_l(k)} \quad (3.10)$$

eingeführt, aus dessen Betragsquadrat sich die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Eigenzuständen weit vor und weit nach der Streuung ergeben. Im vorliegenden Falle elastischer Stöße werden alle Quantenzahlen, die Energie und der Drehimpuls bei dem Streuprozess erhalten. Daher sind nur die Diagonalelemente der S-Matrix von Null verschieden und haben einen Betrag von Eins. Dementsprechend sind alle Streuphasen $\eta_l(k)$ reell. Dies ist für inelastische Stöße, wie sich in Kapitel 3.2 zeigt, nicht mehr der Fall. Aus den S-Matrixelementen ergeben sich dann die für das Experiment relevanten Ratenkonstanten für Teilchenverluste.

3.1.1 Identische Teilchen

Die bisherigen Überlegungen beziehen sich auf unterscheidbare Teilchen. Identische Teilchen hingegen lassen sich nach dem Stoß nicht mehr identifizieren, man kann daher nicht zwischen der Streuung um θ und um $\pi - \theta$ unterscheiden (siehe Abbildung 3.1 (a)). Für Bosonen muß der Zustand (3.2) symmetrisiert werden, und für den differentiellen Wirkungsquerschnitt ist

$$\frac{d\sigma(k, \theta)}{d\Omega} = |f(k, \theta) + f(k, \pi - \theta)|^2 \quad (3.11)$$

anzusetzen. Die Addition der beiden supplementären Streuamplituden führt dazu, daß Partialwellen mit ungerader Parität nicht zur Streuung beitragen, während sich der Effekt von Partialwellen gerader Parität verdoppelt. Ausgehend von (3.3), (3.11) und der

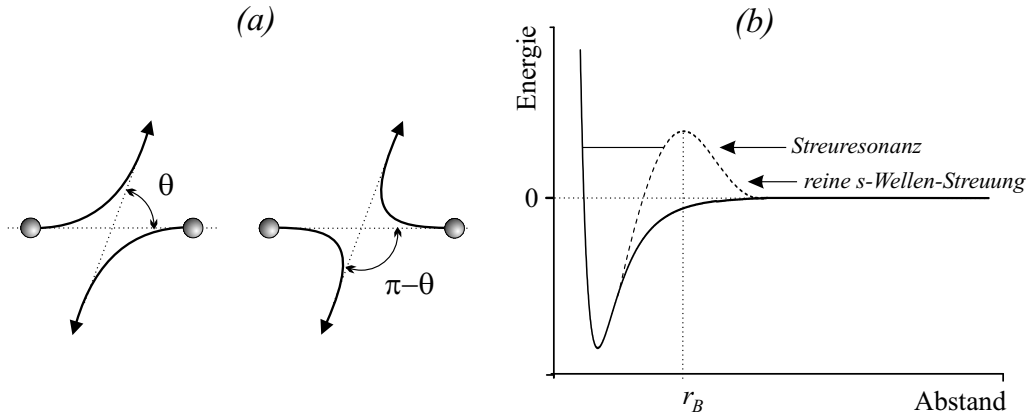


Abbildung 3.1: (a): Ununterscheidbare Situationen bei der Streuung identischer Teilchen. (b) Qualitatives Wechselwirkungspotential für s-Wellen-Streuung (durchgezogen) und höhere Partialwellen (gestrichelt). Für letztere gibt es Streuresonanzen, falls das Potential gebundene Zustände zulässt.

Orthogonalitätsrelation der Legendre-Polynome, erhält man schließlich für den totalen Wirkungsquerschnitt identischer Bosonen die Form

$$\sigma(k) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l \text{ gerade}} (2l+1) |S_l(k) - 1|^2 = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l \text{ gerade}} (2l+1) \sin^2 \eta_l(k). \quad (3.12)$$

3.1.2 Grenzfall niedriger Energien: Die Streulänge

Die langreichweitige Wechselwirkung zwischen neutralen Atomen verschwindet schneller als $1/r^3$ (siehe Kapitel 3.2). Aufgrund dieser Tatsache führt der l -abhängige Term in Gleichung (3.6) für $l \geq 2$ bei $r_B(l)$ zu einer Zentrifugalbarriere im Wechselwirkungspotential, die das Streupotential $V(r)$ bei niedrigen Energien abschirmt (vgl. Abbildung 3.1 (b)). Für geringere Energien als

$$E_B = V(r_B) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_r r_B^2} \quad (3.13)$$

verschwindet somit nach und nach der Beitrag der l -ten Partialwelle zur Streuung. Formt man die Integralgleichung (3.4) für die Streuphasen um, läßt sich zeigen [43], daß der Wirkungsquerschnitt für die l -te Partialwelle im Falle kleiner k wie $\sigma_l(k) \propto k^{4l}$ verschwindet, falls die Streuphase $\eta_l(k)$ im Bereich $0 \leq E \leq E_B$ stets kleiner als $\pi/2$ bleibt. Ist letztere Bedingung nicht erfüllt, tritt bei $\eta_l(k) = \pi/2$ (modulo π) eine Streuresonanz auf. Dies ist an Gleichung (3.12) zu erkennen: Der Wirkungsquerschnitt der l -ten Partialwelle erreicht dann seinen maximalen Wert $8\pi(2l+1)/k^2$. Eine Streuresonanz tritt auf, wenn das Gesamtpotential einen quasi-gebundenen Zustand mit $E > 0$ zuläßt² (siehe Abbildung 3.1).

² Quasi-gebunden heißt der Zustand, weil er aufgrund von $E > 0$ und der endlichen Höhe der Potentialbarriere durch Tunneln zerfallen kann.

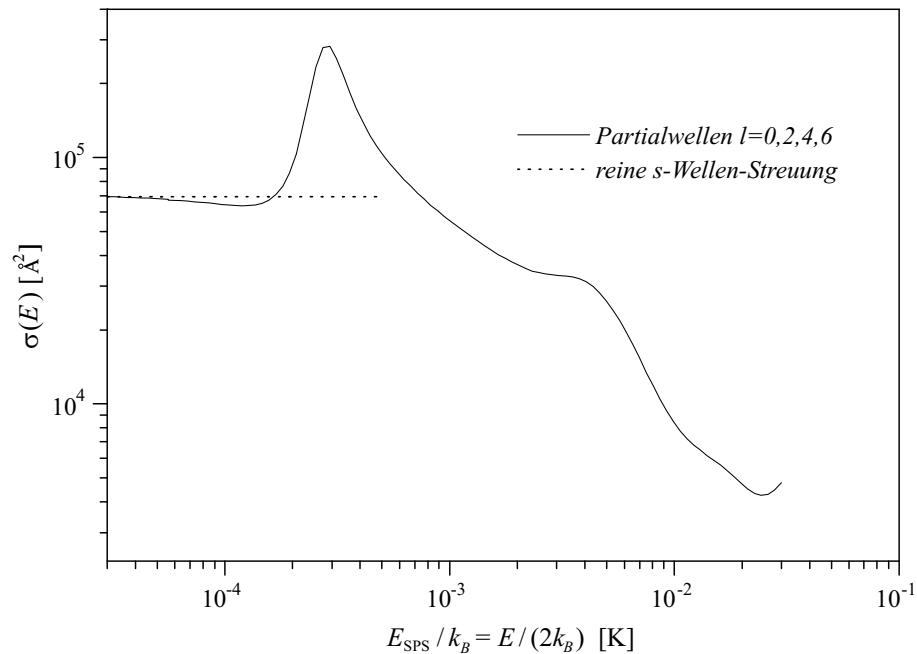


Abbildung 3.2: *Totaler Wirkungsquerschnitt für Stöße zwischen maximal spinpolarisierten ^{87}Rb -Atomen, aufgetragen über der Energie im Schwerpunktsystem. Im Bereich der d-Wellen-Resonanz ist der Stoßquerschnitt etwa viermal größer als für reine s-Wellen-Streuung.*

Ob es einen solchen Zustand gibt, hängt vom kurzreichweitigen Teil des Potentials $V(r)$ ab.

In Abbildung 3.2 ist der totale Wirkungsquerschnitt für homonukleare ^{87}Rb -Stöße im Grundzustand $|F = 2, m_F = 2\rangle$ über der Energie im Schwerpunktsystem aufgetragen. Es handelt sich dabei um ein numerisches Ergebnis [46], das auf spektroskopisch ermittelten Parametern [47] des exakten Potentials³ fußt und die Beiträge der Partialwellen $l = 0, 2, 4$ und 6 berücksichtigt. In der Tat fällt eine ausgeprägte d-Wellen-Resonanz auf, die in dieser Arbeit noch eine wichtige Rolle spielen wird. Hier wird der Stoßquerschnitt maximal und etwa viermal größer als im Grenzwert verschwindender Energie, wo allein die s-Welle ($l = 0$) zur Streuung beiträgt. Da es sich hierbei um eine Kugelwelle handelt ($P_l(\cos\theta) = 1$), wird die Streuung bei extrem niedrigen Energien zunehmend isotrop. Dies wird in Abbildung 3.3 deutlich, wo der relative, differentielle Wirkungsquerschnitt für verschiedene (extrem niedrige) Energien über dem Streuwinkel aufgetragen ist. Die Integration solcher Kurven über den Raumwinkel führt zu dem in Abbildung 3.2 dargestellten Stoßquerschnitt.

Dieser nimmt im Limes $E \rightarrow 0$ schließlich die Form

$$\sigma_s = 8\pi a^2 \quad \text{mit} \quad a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \eta_0(k)}{k} = -\lim_{k \rightarrow 0} f(k) \quad (3.14)$$

an (in Abbildung 3.2 gestrichelt dargestellt). Die Größe a wird als Streulänge bezeichnet

³ Es handelt sich hierbei um das Triplett-Potential $a^3\Sigma_u^+$ für spinpolarisierte Atome.

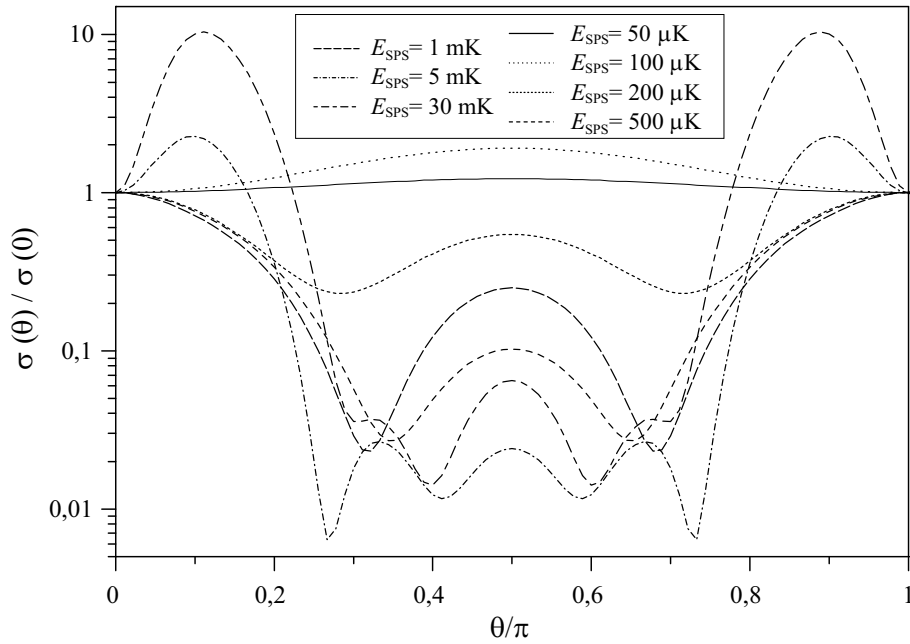


Abbildung 3.3: *Differentialer Wirkungsquerschnitt für Stöße zwischen maximal spinpolarisierten ^{87}Rb -Atomen für verschiedene Energien. Im Limes $E \rightarrow 0$ wird die Streuung zunehmend isotrop.*

und spielt bei der BEK gering wechselwirkender Gase eine zentrale Rolle. Eine wichtige Konsequenz dieser Asymptotik ist die Tatsache, daß extrem kalte Fermionen nicht stoßen, da für sie s-Wellen-Streuung aus Symmetriegründen verboten ist. Dieser Umstand verhindert den Einsatz der Verdampfungskühlung als letzten Schritt bei der Erzeugung eines entarteten Fermigases [48]. Da für die Verdampfungskühlung ein hoher Stoßquerschnitt vorteilhaft ist, ist man im Experiment mit Bosonen an einer großen Streulänge interessiert. Sie bestimmt die Rate

$$\gamma_{\text{el}} = n\sigma_s\bar{v}, \quad (3.15)$$

mit der ultrakalte Atome bei einer mittleren thermischen Relativgeschwindigkeit \bar{v} in einem Gas der Dichte n elastisch stoßen, und somit seine Thermalisierungsrate.

Zunächst gilt jedoch festzuhalten, daß die Streuung bei niedrigen Energien offensichtlich unabhängig von den Details von $V(r)$ ist. Das bedeutet insbesondere, daß in diesem Fall das exakte Wechselwirkungspotential, in den meisten Fällen nur unzureichend bekannt, durch ein beliebiges Potential ersetzt werden kann, vorausgesetzt, daß letzteres zur gleichen Streulänge führt. Da sich die Streulänge experimentell bestimmen läßt, ist dies von großem praktischen Nutzen, wie sich in Kapitel 4 zeigen wird.

Die physikalische Bedeutung der Streulänge läßt sich anhand der asymptotischen Darstellung (3.2) der Wellenfunktion erkennen: Wegen (3.14) gilt $\psi_k(r) \rightarrow 1 - a/r$, und der Radialteil der Wellenfunktion nimmt asymptotisch die Form $u_{0,0}(r) = r - a$ einer Geraden an, entsprechend einer Sinus-Welle mit unendlicher Wellenlänge. Die Streulänge gibt daher die Nullstelle der asymptotischen Wellenfunktion im Limes $k \rightarrow 0$ an. Das Potential

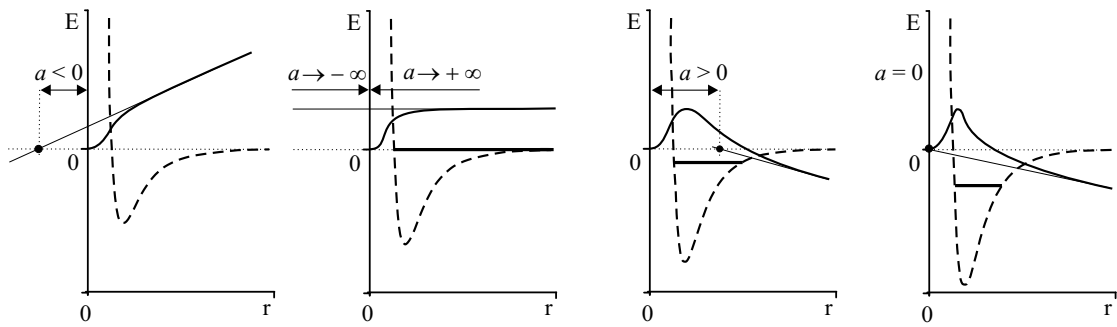


Abbildung 3.4: Zustandekommen einer positiven Streulänge für ein attraktives Potential. Fällt ein gebundener Zustand mit der Kontinuumsgrenze zusammen, liegt für $E \rightarrow 0$ eine Streuresonanz vor.

verursacht also eine Verschiebung der Wellenfunktion um a in radialer Richtung. Da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Wirkungsbereich eines repulsiven Potentials reduziert ist, entspricht einem solchen Potential stets eine positive Streulänge. Der Umkehrschluß, daß nämlich die Streulänge eines attraktiven Potentials negativ ist, stimmt lediglich, falls seine Tiefe so gering ist, daß es keine gebundenen Zustände im Potential gibt. Dies ist in Abbildung 3.4 veranschaulicht. Nimmt die Stärke der Wechselwirkung zu, nähert sich die Streuphase dem Wert $\pi/2$ und die Streulänge divergiert gegen $-\infty$ (vgl. (3.14)). Eine solche Streuresonanz liegt vor, wenn im Potential gerade ein neuer gebundener Zustand mit $E = 0$ auftaucht⁴. In der Umgebung der Resonanz springt die Streulänge von $-\infty$ nach $+\infty$. Mit zunehmender Tiefe des Potentials ändert sich der Wert von a dann stetig zwischen $+\infty$ und $-\infty$, bis sich der nächste gebundene Zustand ausprägt. In der Regel weisen interatomare Wechselwirkungspotentiale eine ganze Fülle solcher Zustände auf, und mit jedem kommt eine weitere Nullstelle der Wellenfunktion im Wirkungsbereich des Potentials hinzu. Als Faustregel läßt sich jedoch aus den obigen Ausführungen ableiten: Findet der höchste gebundene Zustand gerade noch im Potential Platz, ist die Streulänge positiv. Ein negatives Vorzeichen liegt hingegen vor, wenn ein nur geringfügig tieferes Potential einen weiteren gebundenen Zustand zuließe⁵.

Die bemerkenswerte Folge davon, daß die Streulänge des *attraktiven* Wechselwirkungspotentials $V(r)$ zwischen den Atomen eines Kondensats auch positiv sein kann, ist die Tatsache, daß sich die Atome in diesem Fall trotzdem effektiv *abstoßen*. Diesem Umstand ist die Stabilität von Kondensaten hoher Teilchenzahl zu verdanken, wie in Kapitel 4 deutlich wird. Zusammenfassend läßt sich an dieser Stelle sagen, daß sich für die BEK offensichtlich Atome mit großer, positiver Streulänge am besten eignen.

Für die Einbeziehung der Wechselwirkung in die Theorie der BEK wird von entscheidender Bedeutung sein, ob sich Stöße in dem Gas, wie hier geschehen, als Zwei-Körper-Prozesse beschreiben lassen oder ob mehrere Teilchen an einem Stoß beteiligt sind. Der Gasparameter na^3 ist in diesem Zusammenhang die relevante Größe. Er gibt an, wie viele

⁴ Eine quantitative Argumentation hierzu findet sich z.B. in [43].

⁵ In der Tat gibt es einen quantitativen Zusammenhang zwischen der Lage des höchsten gebundenen Zustands eines Potentials und dessen Streulänge [49].

Teilchen sich im Mittel im effektiven Streuvolumen a^3 befinden. Die Beschränkung auf Zwei-Teilchen-Stöße ist sinnvoll, solange

$$na^3 \ll 1 \quad (3.16)$$

gewährleistet ist. Es zeigt sich, daß diese Voraussetzung in typischen BEK-Experimenten mit $na^3 \simeq 10^{-4}$ sehr gut erfüllt ist. In diesem Falle spricht man von einem verdünnten Gas.

3.2 Inelastische Zwei-Körper-Stöße: Spinrelaxation

Die in dieser Arbeit beschriebenen Experimente wurden mit dem (nahezu) stabilen Rubidiumisotop ^{87}Rb durchgeführt⁶, auf das sich die folgende Diskussion daher beschränkt. Es handelt sich um ein Alkaliatom mit dem Grundzustand $5s^2S_{1/2}$ und einem Kernspin von $i = 3/2$. Dies führt zu den beiden Hyperfeingrundzuständen $f = 1$ und $f = 2$. Daher ist ^{87}Rb ein Boson. In der folgenden Diskussion werden aus Gründen der Übersichtlichkeit atomare Quantenzahlen mit kleinen, molekulare mit großen Buchstaben bezeichnet. Im späteren Verlauf dieser Arbeit wird jedoch zur üblichen Großbuchstabennotation atomarer Quantenzahlen zurückgekehrt.

3.2.1 Das Streupotential

Um Stöße zwischen zwei Rubidiumatomen vollständig zu beschreiben, müßte man prinzipiell die Wechselwirkung von insgesamt 74 Elektronen und zwei Kernen berücksichtigen, ein hoffnungsloses Unterfangen. Es zeigt sich jedoch, daß insbesondere im vorliegenden Falle niedriger Stoßenergien der wichtigste Teil des Streuprozesses auf eine Region konzentriert ist, in der die beteiligten Atome bei einem Abstand von etwa $20a_0$ noch verhältnismäßig gut separiert sind⁷. Daher kann die Wechselwirkung in der Born-Oppenheimer-Näherung [50] behandelt werden, in der vorausgesetzt wird, daß die viel leichteren Elektronen der Kernbewegung unmittelbar folgen können. Zusätzlich kann man in guter Näherung davon ausgehen, daß alle Spins an den Orten der Kerne lokalisiert sind (Shizgal-Näherung, [51]). Das Ergebnis ist ein Wechselwirkungspotential, das allein vom Abstand der Atome und ihren Spin-Quantenzahlen abhängt. Unter Vernachlässigung kleiner Korrekturen zerfällt es in eine Summe von fünf Termen [52, 53, 49]:

$$V = V_C + V_{\text{HF}} + V_Z + V_{\text{SS}} + V_{\text{SB}}. \quad (3.17)$$

V_C beschreibt die Coulomb-Wechselwirkungen der Elektronen und Kerne und hat die Form eines Zentralpotentials. Bei kleinen interatomaren Abständen, wo die beiden Elektronenwolken stark überlappen, kommt es durch die sehr starke, repulsive Austauschwechselwirkung aller Elektronen zustande. Mit wachsendem Abstand bleibt hiervon lediglich der

⁶ Tatsächlich zerfällt ^{87}Rb als β^- -Strahler mit einer Halbwertszeit von 48,8 Milliarden Jahren in ^{87}Sr .

⁷ Der Bohrsche Radius a_0 beträgt $0,529 \cdot 10^{-10}$ m.

Beitrag der beiden Leuchtelektronen übrig, der von ihrer relativen Spinstellung abhängt. Er führt zu der Aufspaltung in die Singulett- und Triplett-Molekülpotentiale $X^1\Sigma_g^+$ und $a^3\Sigma_u^+$, die in Abbildung 3.5 dargestellt sind und dem molekularen Elektronenspin $S = 0$ und $S = 1$ entsprechen. Das Triplettpotential ist stets weniger tief als das Singulettpotential. Im Falle von Rb betragen die Potentialtiefen ca. $k_B \times 320$ K und $k_B \times 5800$ K und weisen 41 bzw. 125 Vibrationszustände auf [54]. Für große Abstände nimmt die Austauschwechselwirkung exponentiell ab und läßt sich auf die asymptotische Form

$$V_A(r, S) = (-1)^{S+1} A r^{7/2\alpha-1} e^{-2\alpha r/a_0} \quad (3.18)$$

bringen, in der die Parameter A und α allein von der Atomsorte abhängen [55]. Ihr überlagert ist in diesem Bereich die attraktive Dispersionswechselwirkung (oder van der Waals-Wechselwirkung). Sie kommt durch Fluktuationen der atomaren Ladungsverteilungen zustande. Die dabei entstehenden elektrischen Multipolmomente induzieren die Polarisierung des Nachbaratoms, wodurch es zu einer Multipol-Wechselwirkung zwischen den Atomen kommt. Für zwei Atome im Grundzustand führt dies unter Berücksichtigung der ersten drei Terme der Multipolentwicklung (entsprechend der Dipol-Dipol-, Dipol-Quadrupol- und Quadrupol-Quadrupol-Wechselwirkungen) auf den Beitrag

$$V_D(r) = -\frac{C_6}{r^6} - \frac{C_8}{r^8} - \frac{C_{10}}{r^{10}} \quad (3.19)$$

zum Zentralpotential⁸. Die Dispersionskoeffizienten C_6 , C_8 und C_{10} der meisten Alkaliatome sind aus Theorie und Experiment mit hoher Genauigkeit bekannt [56, 30].

Triplett- und Singulettpotential erhalten somit für große r die Form $V_C(r, S) = V_D(r) + V_A(r, S)$. Da inelastische Stöße entlang beider Potentiale stattfinden können, wird das Zentralpotential in der Regel mit Hilfe der Singulett- und Triplettprojektionsoperatoren \hat{P}_0 und \hat{P}_1 als Superposition dargestellt:

$$V_C(r, S) = \hat{P}_0 V_C(r, 0) + \hat{P}_1 V_C(r, 1). \quad (3.20)$$

Nun muß einer möglichen Änderung der inneren Energie der Atome Rechnung getragen werden. Dies geschieht zunächst durch die Berücksichtigung der Hyperfeinenergie

$$V_{\text{HF}} = \sum_{j=1}^2 \frac{a_{\text{HF}}}{\hbar^2} \vec{l}_j \cdot \vec{s}_j \quad (3.21)$$

der einzelnen Atome in (3.17). Sie kommt durch die sog. Fermi-Kontaktwechselwirkung zwischen dem Leuchtelektron mit dem Spin \vec{s} und dem Kern zustande, die auf dem nicht-verschwindenden Überlapp von deren Wellenfunktionen beruht. Sie ist die Ursache für die Hyperfeinaufspaltung von $\Delta E_{\text{HF}}/h = 6,8$ GHz zwischen den Hyperfeinzuständen $f = i + s = 2$ und $f = i - s = 1$ (siehe Abbildung 3.6). Auf diese Energie läßt sich die Kopplungskonstante $a_{\text{HF}} = \Delta E_{\text{HF}}/2$ zurückführen [57, 49]. Die Hyperfeinwechselwirkung *zwischen* den Atomen kann hingegen vernachlässigt werden. Dadurch hängt V_{HF} nicht explizit vom Ort ab.

⁸ Die Retardierung führt bei sehr großen Abständen zu einem schnelleren Abklingen von $V_D(r)$. Auf hier relevanten Längenskalen kann dieser Effekt jedoch vernachlässigt werden.

Experimente zur BEK finden meist an magnetisch gespeicherten Atomen statt. In diesem Fall führt der Zeeman-Effekt zur Aufhebung der Projektionsentartung der Drehimpulse. Daher muß die Lageenergie im Magnetfeld \vec{B} in die Analyse eingeschlossen werden. Mit dem Kernmoment $\vec{\mu}_N$ und dem magnetischen Moment $\vec{\mu}_e$ des Elektrons erhält sie die Form

$$V_Z = \sum_{j=1}^2 (\vec{\mu}_{e,j} + \vec{\mu}_{N,j}) \cdot \vec{B}. \quad (3.22)$$

Der vorletzte Term in Gleichung (3.17) beschreibt die Spin-Spin-Dipolwechselwirkung der beiden Leuchtelektronen:

$$V_{SS}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{\vec{\mu}_{e,1} \cdot \vec{\mu}_{e,2} - 3(\vec{r} \cdot \vec{\mu}_{e,1})(\vec{r} \cdot \vec{\mu}_{e,2})/r^2}{r^3} \right). \quad (3.23)$$

Für eine parallele Spinstellung der beiden Elektronen, die im Molekül zu $S = 1$ führt, hängt demnach die Wechselwirkungsenergie von der Projektion von \vec{S} auf die Verbindungsachse der Atome ab. Der Effekt von V_{SS} besteht somit in der Aufhebung der Projektionsentartung des Triplettpotentials. Die Dipolwechselwirkung stellt gegenüber den bisher diskutierten Termen eine geringe Korrektur dar, kann aber, wie sich im folgenden zeigen wird, entscheidende Bedeutung erlangen. Dies liegt daran, daß es sich bei V_{SS} offensichtlich nicht um ein Zentralpotential handelt und somit bei einem Stoß der relative Bahndrehimpuls der Atome keine Erhaltungsgröße mehr ist.

Die gleiche Auswirkung hat auch der letzte Term im Streupotential (3.17). Er kommt durch die Beimischung angeregter Molekülzustände zu den Triplettzuständen zustande, sobald die Elektronenwolken der beiden Atome einen signifikanten Überlapp haben [52]. Diese Beimischung führt zu einer Spin-Bahn-Kopplung in zweiter Ordnung und beeinflusst daher die Dipolwechselwirkung der beiden Leuchtelektronen (Für Alkaliatome verschwindet wegen $l = 0$ die Spin-Bahn-Kopplung in erster Ordnung.). Das resultierende Potential $V_{SB}(\vec{r})$ hat die gleiche Spinstruktur wie $V_{SS}(\vec{r})$, fällt jedoch exponentiell mit r ab, da es wie die Austauschwechselwirkung vom Überlapp der Elektronenwolken abhängt. Es spielt nur bei schweren Atomen eine Rolle. Der wichtigste Unterschied zwischen den beiden Termen besteht jedoch in ihrem unterschiedlichen Vorzeichen. Dadurch können sich ihre Auswirkungen zumindest teilweise aufheben.

Aufgrund der komplexen Struktur des Streuproblems, hängen die Ergebnisse der Streutheorie äußerst empfindlich von dem Potential (3.17) ab. In der Praxis wird die erforderliche Genauigkeit bei der Bestimmung der Streupotentiale durch eine Kombination spektroskopischer und numerischer Methoden erreicht. In der Regel wird zunächst mit Hilfe der Molekülspektroskopie [58, 59], der einfachen [60] und der Zwei-Farben-Photoassoziationsspektroskopie [61] die Lage der Vibrations- und Rotationszustände des Moleküls bestimmt. Anschließend werden die Parameter der Potentiale numerisch an die Daten angepaßt.

3.2.2 Spinaustausch

Wie schon der Name suggeriert, ist für Spinaustausch-Stöße die Austauschwechselwirkung verantwortlich. Im folgenden werden daher vorerst die beiden Dipolterme V_{SS} und V_{SB} vernachlässigt. Außerdem soll zunächst kein Magnetfeld vorliegen und somit V_Z ebenfalls keine Rolle spielen.

Kommen sich zwei Atome während eines Stoßes näher, erreichen die langreichweitige Austauschwechselwirkung (3.18) und die Hyperfeinwechselwirkung (3.21) vergleichbare Stärke. Bei homonuklearen ^{87}Rb -Stößen ist diese Situation für Abstände $18a_0 \leq r \leq 26a_0$ gegeben [52, 53]. In diesem Bereich ändert sich die Spinkopplung der beiden Atome von einer atomaren zu einer molekularen Charakteristik. Dies wird in Abbildung 3.5 deutlich: Bei größeren Abständen koppeln der Elektronenspin $s = 1/2$ und der Kernspin $i = 3/2$ eines Atoms zu $f = 1, 2$. Für den Gesamtspin des Systems ergeben sich dann die Möglichkeiten $F = |f_1 - f_2|, \dots, (f_1 + f_2)$, je nachdem, in welchen f -Zuständen die Atome vorliegen. Demgegenüber ist f bei kleinen Abständen keine gute Quantenzahl mehr. Hier koppeln jeweils die Elektronen und die Kerne zu $S = s_1 \pm s_2 = 0, 1$ (entsprechend dem Singulett- und dem Triplettpotential) und $I = 0, \dots, 3$. Für eine Kombination (S, I) setzt sich der Gesamtspin schließlich zu $F = |I - S|, \dots, (S + I)$ zusammen. Dies geschieht jedoch mit einer Einschränkung: In einem BEK-Experiment hat man es mit Bosonen zu tun. Da die Gesamtwellenfunktion bezüglich der Vertauschung der Atome symmetrisch sein muß und ihre Parität durch $(-1)^{S+1}(-1)^{I+1}$ gegeben ist, muß die Summe $I + S$ eine gerade Zahl ergeben⁹.

Das Zentralpotential erhält die relativen Drehimpulsquantenzahlen L und M_L des Stoßpaares. Unabhängig von der Art der interatomaren Wechselwirkung ist auch die Projektion M_J des Gesamtdrehimpulses $\vec{J} = \vec{L} + \vec{F}$ auf die Magnetfeldachse erhalten, da jede Drehung um diese Achse eine Symmetrieoperation darstellt. In Abwesenheit von Magnetfeldern sind schließlich sogar \vec{J} und \vec{F} Erhaltungsgrößen. Bei einem Stoß koppeln dann alle Potentiale mit gleicher Quantenzahl F (man spricht hier von Kanälen). Wie in Abbildung 3.5 deutlich wird, betrifft dies die Werte $F = 0$ (zwei Kanäle) und $F = 2$ (drei Kanäle). In beiden Fällen liegt eine Kopplung zwischen Triplett- und Singulettpotential vor.

Einen Spinaustauschprozeß kann man sich nun anschaulich vorstellen, wenn man vereinfachend annimmt, daß die Kopplung an einem scharf definierten Ort stattfindet [49]: Hier wird die Amplitude der einlaufenden Wellenfunktion durch Projektion auf die Singulett- und Triplettkanäle aufgeteilt. Die Teilamplituden propagieren anschließend unabhängig voneinander, werden an der steilen Austauschbarriere reflektiert und rekombinieren schließlich wieder durch Projektion am Ort der Kopplung. Dabei sammeln sie jeweils eine Phase auf, die im wesentlichen durch die Streulängen a_T und a_S der implizierten Potentiale gegeben ist (vgl. Kapitel 3.1). Da die beiden Streulängen in der Regel verschieden sind, wird die ursprüngliche Wellenfunktion nicht reproduziert, was bedeutet, daß die Atome nach dem Stoß mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit in anderen als den ursprünglichen

⁹ Analoges gilt nicht für die Summe $f_1 + f_2$, da sich die Zwei-Teilchen-Wellenfunktion in jedem Falle symmetrisieren läßt. Für $f_1 = f_2$ muß F jedoch aus Symmetriegründen gerade sein.

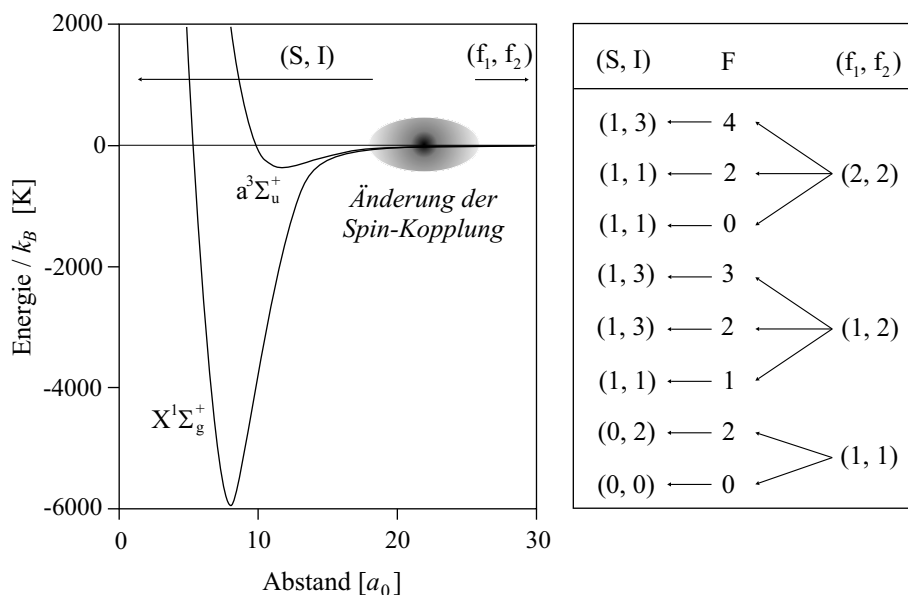


Abbildung 3.5: Links: Singulett- und Triplettpotentiale für ^{87}Rb -Stöße. Die Änderung der Spinkopplung führt in der markierten Region zu Spinaustausch. Rechts: Für $B = 0$ ist F auf allen Skalen eine gute Quantenzahl, die sich jedoch aus molekularen Spins (S, I) oder atomaren Spins (f_1, f_2) zusammensetzt. Spinaustausch ist möglich, da mehrere Potentiale zu gleichen Werten von F führen.

Hyperfeinzuständen vorliegen. Die Situation ist also völlig analog zu einem optischen Mach-Zehnder-Interferometer, in dem die Intensität in den beiden Ausgängen von dem Unterschied der optischen Weglängen in den beiden Interferometerarmen abhängt.

Bei einem exothermen Stoß wird Hyperfeinenergie in kinetische Energie umgewandelt. Der umgekehrte Prozeß ist prinzipiell auch möglich, allerdings muß dann die kinetische Energie der Relativbewegung vor dem Stoß größer als die Hyperfeinaufspaltung sein, was in einem BEK-Experiment meistens nicht der Fall ist. Kanäle, die wie $F = 1, 3, 4$ in Abbildung 3.5 nicht gekoppelt sind, oder solche, deren Kopplung aus den obigen (energetischen) Gründen keine Rolle spielt, werden als geschlossen bezeichnet. Letzteres trifft für $F = 0, 2$ zu, allerdings nur in Verbindung mit dem Eingangskanal $(f_1, f_2) = (1, 1)$. Daher ist ein Gas, dessen Atome sich alle im Zustand $f = 1$ befinden, bei niedrigen Temperaturen und $B = 0$ gegen Spinaustausch stabil. Gleiches gilt nicht für den Eingangskanal $(2, 2)$, da nicht alle F -Kanäle, die asymptotisch mit ihm verbunden sind, geschlossen sind.

Der prominenten Rolle von ^{87}Rb in der BEK verdünnter Gase ist es zu verdanken, daß seine Streulängen mit einer Genauigkeit von wenigen Bohrschen Radien bekannt sind [54]:

$$a_T = 99 a_0 \quad \text{und} \quad a_S = 90 a_0. \quad (3.24)$$

Die Ähnlichkeit dieser Werte führt dazu, daß Spinaustausch zwischen Rb-Atomen mit einer verhältnismäßig geringen Wahrscheinlichkeit stattfindet, da die Wellenfunktionen in den beiden Potentialen vergleichbare Phasen aufsammeln und somit im wesentlichen zum Eingangszustand rekombinieren [62, 63].

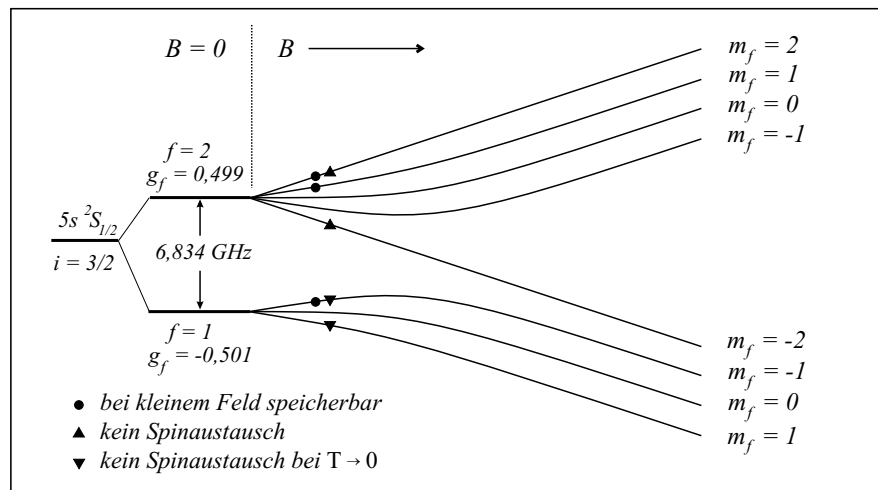


Abbildung 3.6: Hyperfeindiagramm von ^{87}Rb und Aufhebung der Entartung im Magnetfeld. Markiert sind Zustände, die sich mit kleinen Magnetfeldern speichern lassen, und solche, die gegen Spinaustausch stabil sind.

In der Anwesenheit eines Magnetfeldes muß V_Z berücksichtigt werden, und die Projektionsentartung der Spins wird aufgehoben. Als Quantisierungsachse eignet sich nicht mehr die Verbindungsachse der Atome sondern die Magnetfeldrichtung. Abbildung 3.6 zeigt den Effekt eines Magnetfeldes auf die Hyperfeinstruktur des ^{87}Rb -Atoms. Bei kleinen Feldern ($B \ll (2a_{\text{HF}}m_e)/(\hbar) \sim 0,24 \text{ T}$) bleibt die Hyperfeinkopplung zwischen s und i erhalten und damit auch f eine gute Quantenzahl. Bei hohen Feldern koppeln s und i für sich an das äußere Feld und f verliert seine Bedeutung. Demgegenüber ist F bereits für kleine Felder – und damit auch unter typischen experimentellen Bedingungen – nicht mehr bei allen Abständen eine gute Quantenzahl. Allein der relative Bahndrehimpuls L , dessen Projektion M_L und die Projektion M_F des Gesamtspins bleiben jetzt auf allen Skalen erhalten. Dadurch koppeln bei einem Stoß nun wesentlich mehr Kanäle, nämlich alle, die zu gleichen Werten von M_F führen.

Die Anwesenheit eines Magnetfeldes bietet andererseits den Vorteil, daß alle Atome des Gases in ein und denselben Quantenzustand $|f, m_f\rangle$ präpariert werden können und somit jedes Atom zur Phasenraumdicke beiträgt. Insbesondere betrifft dies den Zustand $|2, 2\rangle$, der sich in einem Magnetfeldminimum speichern läßt und zudem das höchste magnetische Moment aufweist (vgl. Kapitel 5.5). Für zwei Atome, die in diesem doppelt oder maximal polarisierten Zustand stoßen, ist $M_F = 4$ eine Erhaltungsgröße. Da sie sich nur mit $f_1 = f_2 = 2$ realisieren läßt, kann der Stoß nur entlang eines einzigen, geschlossenen (Triplet-)Kanals erfolgen, und Spinaustausch findet nicht statt. Gleiches gilt für zwei Atome, die den Stoß jeweils im Zustand $|2, -2\rangle$ angehen. Wenn bei tiefen Temperaturen die kinetische Energie der Relativbewegung unter jene der Hyperfeinaufspaltung sinkt, sind auch die sogenannten gestreckten Zustände $|1, -1\rangle$ und $|1, 1\rangle$ gegen Spinaustausch zwischen identischen Atomen stabil, da alle weiteren Kanäle mit $M_F = -2$ oder $M_F = 2$ bei mindestens einem der Atome den Spin $f = 2$ ins Spiel bringen, der jedoch energetisch nicht zugänglich ist. Magnetisch speicherbare und stabile Zustände sind in Abbildung 3.6 gekennzeichnet.

3.2.3 Dipolare Relaxation

Mit Ausnahme der Stöße zwischen Atomen in jeweils maximal polarisierten oder gestreckten Zuständen führen alle anderen Stöße zu Spinaustausch, der dann den Löwenanteil an der inelastischen Zwei-Körper-Stoßrate stellt. Sind Übergänge mit $\Delta M_F = 0$ prinzipiell oder energetisch nicht möglich, können inelastische Stöße nur durch die beiden Dipolterme V_{SS} und V_{SB} induziert werden. Solche Prozesse, die zur Umwandlung von Spindrehimpuls in Bahndrehimpuls führen, werden als dipolare Relaxation bezeichnet.

Wie bereits erwähnt, heben die Dipolterme die Erhaltung des relativen Bahndrehimpulses L der Atome auf, da es sich nicht um Zentralpotentiale handelt. Die Projektion $M_J = M_L + M_F$ des Gesamtdrehimpulses J des Systems auf die Magnetfeldrichtung bleibt jedoch erhalten (s.o.), und bei einem Stoß gilt somit $\Delta(M_L + M_F) = 0$. Dadurch koppeln nun noch mehr Kanäle als im Falle des oben diskutierten Spinaustauschs. Aufgrund des bosonischen Charakters von Rb sind jedoch nur Übergänge zwischen geraden Werten von L möglich. An den sphärischen Tensordarstellungen von V_{SS} und V_{SB} (als Tensoren zweiten Ranges) läßt sich zudem erkennen, daß nur die Fälle $\Delta L = 0, \pm 2$ erlaubt sind [64].

In einem extrem kalten Gas gilt für den Eingangskanal $L = 0$ (s-Wellen-Streuung). In diesem Fall führt dipolare Relaxation stets zu einer d-Welle im Ausgangskanal, und für die Spinprojektion gilt $\Delta M_F = 0, \pm 1, \pm 2 = -\Delta M_L$. Deswegen ist zu beachten, daß die Atome nun die $L = 2$ Potentialbarriere (3.13) in dem Ausgangskanal überwinden müssen. Da die kinetische Energie bereits vor dem Stoß dazu nicht ausgereicht hat, sind endotherme Stöße stark unterdrückt: Die Atome sind innerhalb des Zentrifugalpotentials gefangen und oszillieren dort so lange, bis sich durch die Kopplung an den Eingangskanal (elastische Streuung) oder an exotherme Kanäle eine Möglichkeit ergibt, das Potential zu verlassen. Befinden sich beide Atome vor dem Stoß im Zustand $f = 1$, steht bei exothermen Stößen höchstens die Energie der Zeeman-Aufspaltung zur Verfügung. Zusammen mit der kinetischen Energie vor dem Stoß muß sie zur Überwindung der Barriere ausreichen. Daher wird die Wahrscheinlichkeit für dipolare Relaxation in einem Rb-Gas, dessen Atome sich im Zustand $f = 1$ befinden, von der Temperatur und vom Magnetfeld abhängen und für $T \rightarrow 0$ und $B \rightarrow 0$ verschwinden. Anders, wenn mindestens eines der Atome den Stoß im höheren der beiden Hyperfeinzustände angeht. Dann wird es nämlich stets einen dipolaren Relaxationsprozeß geben, bei dem die Hyperfeinenergie freigesetzt wird. Diese wird dann mit Sicherheit zur Überwindung der Barriere ausreichen. Deswegen wird dipolare Relaxation in diesem Fall nur gering von T und B abhängen.

3.2.4 Feshbach-Resonanzen

Die Kopplung zwischen Streukanälen kann unter Umständen auch von großem Nutzen sein, da sie die Möglichkeit birgt, den elastischen Stoßquerschnitt für Atome bestimmter Spinzustände bei vorgegebener Stoßenergie einer kontrollierten Manipulation zu unterziehen. Auf diesen Zusammenhang haben 1992 Tiesinga et al. zum erstenmal hingewiesen [65, 64]. Voraussetzung für den Mechanismus ist die Kopplung des Eingangskanals an

einen energetisch geschlossenen Kanal. Eine solche Situation ergibt sich beispielsweise für Stöße zwischen ^{87}Rb -Atomen im (in Dipolfallen speicherbaren) Zustand $|1, 1\rangle$ (Eingangskanal I). Unter Erhaltung von $M_F = 2$ liegt offensichtlich eine Kopplung mit den Kanälen vor, die asymptotisch zu den Konfigurationen $O_1 := |2, 1\rangle + |2, 1\rangle$, $O_2 := |2, 0\rangle + |2, 2\rangle$, $O_3 := |1, 1\rangle + |2, 1\rangle$ und $O_4 := |1, 0\rangle + |2, 2\rangle$ führen. Alle vier Kanäle sind endotherm und daher für $T \ll 2a_{\text{HF}}/k_B$ geschlossen. Bei $B = 0$ betragen die Differenzen zwischen den Dissoziationsenergien der Ein- und Ausgangskanäle $\delta_{I,O_1} = \delta_{I,O_2} = 4a_{\text{HF}}$ und $\delta_{I,O_3} = \delta_{I,O_4} = 2a_{\text{HF}}$. Im Magnetfeld ist zusätzlich die differentielle Zeeman-Verschiebung der Spinzustände zu berücksichtigen. Wie in Abbildung 3.6 zu erkennen ist, besitzen alle O_i ein gegenüber I positives magnetisches Moment¹⁰. Mit Hilfe eines äußeren Magnetfeldes lassen sich somit die Born-Oppenheimer-Potentiale, die asymptotisch mit den Kanälen O_i verbunden sind, einschließlich ihrer gebundenen Zustände bezüglich des zu I gehörigen Potentials verschieben. Dadurch kann man die Energie der höchsten gebundenen Zustände von O_i und die kinetische Energie des Stoßpaares, die im wesentlichen der Dissoziationsgrenze des Eingangskanals entspricht, zur Übereinstimmung bringen. In diesem Fall kommt es bei dem Streuprozess zu einer temporären Ausprägung des gebundenen Zustands. Da dieser nur durch die Kopplung an den Eingangskanal zerfallen kann, entspricht dies einer elastischen Streuresonanz. In ihrer Umgebung variiert die Streulänge dispersiv und erreicht theoretisch jeden beliebigen Wert zwischen $-\infty$ und $+\infty$ [66]. Auf diese Weise läßt sich somit die effektive Wechselwirkung zwischen Atomen nach Belieben einstellen. Im Kontext der BEK bieten Feshbach-Resonanzen ein beachtliches Anwendungspotential, wie sich bereits in den ersten experimentellen Arbeiten auf diesem Gebiet abzeichnet [28, 29, 31, 20]. Es gibt Vorhersagen, daß sich der gleiche Effekt auch mit Hilfe von elektrischen, Radiofrequenz- oder Lichtfeldern erreichen läßt [67, 68, 69].

3.2.5 Ratenbestimmung

Die physikalisch relevanten Größen des Streuprozesses sind die Ratenkonstanten für elastische und inelastische Stöße zwischen Atomen mit bestimmten Spin- und Bahndrehimpulsquantenzahlen. Der formale und numerische Apparat zu deren Bestimmung ist der akribischen Arbeit der Theoriegruppen am NIST (Gaithersburg, Md), an der Universität Eindhoven und am JILA (Boulder, Co) zu verdanken. Eine Beschreibung der Methoden findet sich in den Referenzen [70, 53, 71], an denen sich die folgende Zusammenfassung orientiert.

Jede Konfiguration des Zwei-Atom-Zustandes ist asymptotisch durch Angabe der Spin- und Drehimpulsquantenzahlen $|\alpha\rangle_1 = |f_1, m_{f,1}\rangle$, $|\beta\rangle_2 = |f_2, m_{f,2}\rangle$ und (L, M_L) bestimmt. Die Gesamtwellenfunktion des homonuklearen Stoßpaares muß jedoch symmetrisch bezüglich der Vertauschung sein. Dieser Forderung begegnet man durch die Einführung der zusammengesetzten Hyperfeinzustände

$$|(\alpha\beta)^\pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2 \pm |\alpha\rangle_2|\beta\rangle_1}{\sqrt{2(1 + \delta_{\alpha\beta})}} \quad (3.25)$$

¹⁰ Dies gilt für den Zeeman-Bereich des Hyperfeindiagramms.

mit den beiden möglichen Symmetrien. Erlaubt sind die Konfigurationen $|L, M_L, (\alpha\beta)^+\rangle$ für gerade L und $|L, M_L, (\alpha\beta)^-\rangle$ für ungerade. Diese Zustände bilden eine Basis für die Wellenfunktion, die sich somit durch die Superposition

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{(\alpha\beta)} \sum_{L, M_L} \frac{u_{LM_L(\alpha\beta)}(r)}{r} i^L Y_{LM_L}(\theta, \phi) |(\alpha\beta)^\pm\rangle \quad (3.26)$$

darstellen läßt. Summiert wird dabei über alle erlaubten und unterschiedlichen Konfigurationen mit insgesamt gerader Parität. Im Unterschied zum Ansatz (3.5) werden hierbei auch innere Freiheitsgrade berücksichtigt und es gilt nicht mehr $M_L = 0$. Dieser Ansatz wird nun in die stationäre Schrödingergleichung (3.1) eingesetzt, wobei beachtet werden muß, daß es in diesem Fall zu einem Austausch zwischen den inneren Energien ϵ_α und ϵ_β der Atome und den Bewegungsenergien kommen kann. Dadurch ist bei dem Stoß k allein keine Erhaltungsgröße mehr. Durch Projektion der Schrödingergleichung auf die einzelnen Basiszustände erhält man wieder das System

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2}{dr^2} u_{LM_L(\alpha\beta)}(r) + \left(E - \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2m_r r^2} \right) u_{LM_L(\alpha\beta)}(r) = \sum_{(\alpha'\beta')} \sum_{L', M'_L} C_{LM_L(\alpha\beta), L'M'_L(\alpha'\beta')}(r) u_{L'M'_L(\alpha'\beta')}(r) \quad (3.27)$$

von Radialgleichungen, die nun allerdings durch die Matrix

$$C_{LM_L(\alpha\beta), L'M'_L(\alpha'\beta')}(r) = i^{L'-L} \langle L, M_L, (\alpha\beta) | V(\vec{r}) | L', M'_L, (\alpha'\beta') \rangle \quad (3.28)$$

gekoppelt sind. Je nach dem, welche der oben diskutierten Auswahlregeln der Situation angemessen sind, zerfällt das System in mehrere Blöcke gekoppelter Gleichungen. Wie schon in Abschnitt 3.1 sind die Randbedingungen auch hier durch $u_{LM_L(\alpha\beta)}(0) = 0$ und die entsprechenden asymptotischen Formen für $r \rightarrow \infty$ gegeben. Mit der Notation $LM_L(\alpha\beta) = F$ für die Endzustände und $L'M'_L(\alpha'\beta') = I$ für den Anfangszustand lauten letztere

$$u_F(r) \sim (-i)^{L+1} \sqrt{\frac{m_r}{2\pi\hbar^2 k_{\alpha\beta}}} \left[\delta_{F,I} (-1)^{L+1} e^{-ik_{\alpha\beta}r} + S_{F,I}(k_{\alpha'\beta'}) e^{ik_{\alpha\beta}r} \right]. \quad (3.29)$$

Dabei ist $\hbar k_{\alpha\beta} = \sqrt{2m_r(E - \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)}$ der relative Impuls in den Endzuständen. In analoger Weise ist der Impuls $\hbar k_{\alpha'\beta'}$ vor dem Stoß definiert. Mit dem Kronecker-Symbol wird dafür gesorgt, daß nur der Anfangszustand einen einlaufenden Wellenanteil besitzt. Die Streumatrix $S_{F,I}(k_{\alpha'\beta'})$ hat nun eine wesentlich kompliziertere Struktur. Das Betragsquadrat ihres Diagonalelementes $S_{I,I}(k_{\alpha'\beta'}) = e^{2i\eta_I(k_{\alpha'\beta'})}$ gibt das Verhältnis zwischen dem einlaufenden und dem auslaufenden Fluß im Eingangskanal an. Weil diese bei inelastischen Prozessen nicht mehr gleich sind, ist die Streuphase $\eta_I(k_{\alpha'\beta'})$ eine komplexe Zahl.

Den Wirkungsquerschnitt für den Prozeß $(\alpha, \beta') \rightarrow (\alpha, \beta)$ erhält man wie im Falle der in Abschnitt 3.1 diskutierten elastischen Streuung spinloser Teilchen aus den Elementen der S-Matrix:

$$\sigma_{\alpha'\beta'\alpha\beta}(k_{\alpha'\beta'}) = \frac{\pi}{k_{\alpha'\beta'}^2} (1 + \delta_{\alpha'\beta'}) \left| \sum_{L, M_L, L', M'_L} \sqrt{2L'+1} (S_{F,I}(k_{\alpha'\beta'}) - \delta_{F,I}) \right|^2. \quad (3.30)$$

Für elastische Stöße zwischen identischen Teilchen hat der Ausdruck in Übereinstimmung mit Gleichung (3.12) den Vorfaktor $2\pi/k^2$. Anders als dort werden jedoch hier die Beiträge der Partialwellen vor der Betragsbildung kohärent summiert, da sie durch das anisotrope Potential gekoppelt werden. Für inelastische Kanäle liefert $\delta_{F,I}$ keinen Beitrag in Einklang mit der Tatsache, daß es in diesen Kanälen keine einlaufenden Wellenanteile gibt. Bei der Summation müssen außerdem natürlich die der Situation entsprechenden Auswahlregeln und die Energieerhaltung berücksichtigt werden, wodurch die Anzahl der Beiträge, insbesondere bei geringer Energie der Stoßpartner, überschaubar wird.

Für das Experiment ist das niederenergetische Verhalten der Stoßquerschnitte relevant. Im Limes verschwindender Energie ($L' = M'_L = 0$) läßt sich der Streuphase nach wie vor die Streulänge $a_{\alpha'\beta'}$ zuordnen (vgl. Relation (3.14) in Kapitel 3.1), die den elastischen Stoßquerschnitt bestimmt:

$$\lim_{k_{\alpha'\beta'} \rightarrow 0} \eta_I(k_{\alpha'\beta'}) = -k_{\alpha'\beta'} a_{\alpha'\beta'} \quad \Rightarrow \quad \sigma_{\alpha'\beta'}^{\text{el}} = 4(1 + \delta_{\alpha'\beta'}) \pi |a_{\alpha'\beta'}|^2. \quad (3.31)$$

Dabei sorgt $\delta_{\alpha'\beta'}$ für den zweifach größeren Wirkungsquerschnitt bei Stößen identischer Teilchen. Die Streulänge ist nun, wie die Streuphase, eine komplexe Größe. In der Regel ist ihr Imaginärteil sehr klein und kann daher im Ausdruck für den elastischen Stoßquerschnitt vernachlässigt werden. Erwartungsgemäß wird letzterer im Grenzfall niedriger Energien konstant.

Anders der gesamte inelastische Stoßquerschnitt. Dessen Energieabhängigkeit ergibt sich am schnellsten aus der Unitarität der S-Matrix, die die Teilchenzahlerhaltung beim Stoß sichert und der Forderung entspricht, daß die Summe aller Übergangswahrscheinlichkeiten Eins betragen muß. Mit Gleichung (3.30) führt dies zu

$$\sigma_{\alpha'\beta'}^{\text{inel}}(k_{\alpha'\beta'}) = \sum_{\alpha\beta \neq \alpha'\beta'} \sigma_{\alpha'\beta'\alpha\beta}(k_{\alpha'\beta'}) = \frac{\pi(1 + \delta_{\alpha'\beta'})}{k_{\alpha'\beta'}^2} (1 - |S_{I,I}(k_{\alpha'\beta'})|^2). \quad (3.32)$$

Drückt man das elastische Element der Streumatrix durch die komplexe Streuphase $\eta = \Re[\eta] - i \Im[\eta]$ aus, gilt für den niederenergetischen Grenzfall mit der Definition (3.31) der Streulänge

$$1 - \left| e^{2i\eta_I(k_{\alpha'\beta'})} \right|^2 = 1 - e^{-4\Im[\eta_I(k_{\alpha'\beta'})]} \longrightarrow 4 k_{\alpha'\beta'} \Im[a_{\alpha'\beta'}]. \quad (3.33)$$

Damit bleibt der totale inelastische Wirkungsquerschnitt mit

$$\sigma_{\alpha'\beta'}^{\text{inel}}(k_{\alpha'\beta'}) = \frac{4\pi(1 + \delta_{\alpha'\beta'})}{k_{\alpha'\beta'}} \Im[a_{\alpha'\beta'}] \quad (3.34)$$

im Gegensatz zum elastischen energieabhängig. Wie sich gleich zeigen wird, hat dies ungünstige Auswirkungen auf das Verhältnis zwischen den Raten, mit denen elastische und inelastische Stöße in einem Gas stattfinden.

An diesen Raten ist man in der Praxis interessiert, wo man es mit einem Gas zu tun hat, in dem alle Atome in die Zustände α' und β' präpariert wurden. Aufgrund inelastischer Prozesse zerfällt die Partialdichte $n_{\alpha'}$ (und auf analoge Weise $n_{\beta'}$) über die Zeit gemäß

$$\frac{dn_{\alpha'}}{dt} = - \sum_{(\alpha\beta)} (1 + \delta_{\alpha'\beta'}) (G_{\alpha'\beta' \rightarrow \alpha\beta} n_{\alpha'} n_{\beta'} - G_{\alpha\beta \rightarrow \alpha'\beta'} n_{\alpha} n_{\beta}) . \quad (3.35)$$

Dabei ist berücksichtigt, daß sich durch inelastische Stöße auch Dichten in anderen als den ursprünglichen Zuständen etablieren können, wodurch es anschließend auch zu Rückstreuraten in die Zustände α' und β' kommen kann. Voraussetzung dafür ist, daß die Stoßprodukte gespeichert bleiben. Die Ratenkonstanten $G_{\alpha'\beta' \rightarrow \alpha\beta}$ ergeben sich aus den obigen inelastischen Stoßquerschnitten und der Relativgeschwindigkeit v der Atome vor dem Stoß gemäß

$$G_{\alpha'\beta' \rightarrow \alpha\beta} = \left\langle \frac{1}{1 + \delta_{\alpha'\beta'}} v \sigma_{\alpha'\beta' \alpha\beta}(v) \right\rangle_{\text{th}} , \quad (3.36)$$

wobei $\langle \rangle_{\text{th}}$ für die Mittelung über die Geschwindigkeitsverteilung des Gases steht. Es wird vorausgesetzt, daß inelastische Stöße in der Regel sehr viel seltener stattfinden als elastische. Dann ist davon auszugehen, daß das System thermalisiert ist und daher, unabhängig von den Energiebilanzen der einzelnen Prozesse, alle gespeicherten Zustände die gleiche Geschwindigkeitsverteilung besitzen. Der Faktor $(1 + \delta_{\alpha'\beta'})^{-1}$ ist statistischen Ursprungs [53]: Um die Ratenkonstanten von Zwei-Körper-Stößen zwischen ununterscheidbaren Spinzuständen einerseits und unterscheidbaren andererseits zu vergleichen, müssen die Produkte $n_{\alpha'}^2$ und $n_{\alpha'} n_{\beta'}$ gleich sein. Das bedeutet, daß ein spinpolarisiertes Gas mit N Atomen z.B. mit einem Gas verglichen werden muß, in dem $N_{\alpha'} = N$ und $N_{\beta'} = N$ Atome in zwei verschiedenen Spinzuständen vorliegen. Im ersten Fall gibt es $N(N-1)/2$ Stoßpaare, im zweiten jedoch $N_{\alpha'} N_{\beta'} = N^2$.

In einem Gas der Temperatur T ist der zu einem exothermen Prozeß $\alpha'\beta' \rightarrow \alpha\beta$ inverse, endotherme Prozeß gegenüber ersterem um den Faktor $e^{[-(\epsilon_{\alpha'} + \epsilon_{\beta'} - \epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta})/k_B T]}$ unterdrückt. Bei extrem tiefen Temperaturen sind endotherme Prozesse daher vernachlässigbar. Zu dieser Schlußfolgerung hatten bereits die Überlegungen im Zusammenhang mit der Energieerhaltung beim Spinaustausch und der dipolaren Relaxation geführt. In einem BEK-Experiment führen zudem alle exothermen Stöße zum Verlust beider Atome, da die freigesetzte Energie sehr viel höher als die Grundzustandsenergie des Kondensats und meistens auch höher als die Tiefe des Speicherpotentials ist. Oft kommt ein spinpolarisiertes Gas zum Einsatz, in dem sich alle Atome im gleichen Zustand befinden. Die Beobachtungsgröße ist in diesem Fall die Gesamtratenkonstante $K_2^{\alpha'\alpha'}$, die die zeitliche Entwicklung der Dichte $n_{\alpha'}$ gemäß

$$\frac{dn_{\alpha'}}{dt} = -K_2^{\alpha'\alpha'} n_{\alpha'}^2 \quad \text{mit} \quad K_2^{\alpha'\alpha'} = \sum_{(\alpha\beta)} 2G_{\alpha'\alpha' \rightarrow \alpha\beta} \quad (3.37)$$

bestimmt, wobei sich die Summe über alle erlaubten exothermen Prozesse erstreckt.

f_1	$m_{f,1}$	f_2	$m_{f,2}$	L	M_L	E/k_B	G [cm ³ /s]
2	2	2	2	2	0	0	extrem klein
1	1	2	2	2	1	328 mK	$0,89 \times 10^{-16}$
2	1	2	2	2	1	67 μ K	$0,14 \times 10^{-17}$
1	0	2	2	2	2	328 mK	$0,65 \times 10^{-17}$
1	1	1	1	2	2	656 mK	$0,13 \times 10^{-15}$
1	1	2	1	2	2	328 mK	$0,12 \times 10^{-15}$
2	0	2	2	2	2	134 μ K	$0,89 \times 10^{-17}$
2	1	2	1	2	2	134 μ K	$0,28 \times 10^{-16}$

Tabelle 3.1: Ratenkonstanten G und freigesetzte Energie für die Zerfallskanäle der dipolaren Relaxation eines maximal spinpolarisierten ⁸⁷Rb-Gases für $T \rightarrow 0$ und ein Magnetfeld von 2 G.

Mit dem totalen inelastischen Wirkungsquerschnitt (3.34) gilt für die Gesamtratenkonstante für $T \rightarrow 0$:

$$K_2^{\alpha'\alpha'} = \left\langle v \sigma_{\alpha'\alpha'}^{\text{inel}}(k_{\alpha'\alpha'}) \right\rangle_{\text{th}} \longrightarrow \frac{8\pi\hbar}{m_r} \text{Im}[a_{\alpha'\alpha'}]. \quad (3.38)$$

Damit verliert die Ratenkonstante ihre Energieabhängigkeit. Dies bedeutet, daß das Verhältnis $\langle v \rangle_{\text{th}} \sigma_{\alpha'\alpha'}^{\text{el}} / K_2^{\alpha'\alpha'}$ von „guten“ zu „schlechten“ Stößen mit sinkender Temperatur immer ungünstiger wird.

Die in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Experimente wurden mit ⁸⁷Rb im maximal spinpolarisierten Zustand $\alpha' = |f = 2, m_f = 2\rangle$ bei einem Magnetfeld von 2 G und Temperaturen unterhalb 1 μ K durchgeführt. Für diesen Zustand gibt es unabhängig von der Temperatur ausschließlich exotherme Zerfallskanäle. Jedoch ist andererseits Spinaustausch nicht erlaubt (s. dort), und das Gas kann allein durch dipolare Relaxation zerfallen. Da die Atome den Stoß mit $M'_F = 4$, $L' = 0$ und $M'_L = 0$ angehen, führt Relaxation stets zu $L = 2$, und für die Spinprojektion gilt daher $\Delta M_F = 0, -1, -2$ unter der Bedingung $\Delta M_F + \Delta M_L = 0$. In Tabelle 3.1 sind die möglichen Zerfallskanäle, die entsprechenden Ratenkonstanten $G_{\alpha'\alpha' \rightarrow \alpha\beta}$ und die bei dem Prozeß freigesetzte Energie für die experimentelle Situation zusammengefaßt. Die Konstanten wurden numerisch in der Arbeitsgruppe von B. J. Verhaar in Eindhoven berechnet und uns freundlicherweise mitgeteilt.

Gemäß Gleichung (3.37) ergibt sich der theoretische Wert für die Gesamtratenkonstante aus den in Tabelle 3.1 aufgeführten Beiträgen zu

$$K_2 = 7,7 \times 10^{-16} \text{ cm}^3/\text{s} \quad (3.39)$$

bei einem Feld von 2 G. Dieser Wert ist mit der experimentell ermittelten oberen Schwelle von $2 \times 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{s}$ bei 1,26 G konsistent [72] und außergewöhnlich klein¹¹. Er entspricht einem Imaginärteil der Streulänge von $\text{Im}[a_{2,2,2,2}] = 4 \times 10^{-4} a_0$, der im elastischen Stoßquerschnitt (3.31) völlig vernachlässigbar ist. Da elastische Stöße im Zustand

¹¹ Rechnungen von Julienne et al. liefern für $B \rightarrow 0$ die Ratenkonstante $1,4 \times 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{s}$ und für 1 G die Abschätzung $2 - 4 \times 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{s}$ [62].

$|2, 2\rangle$ nur entlang des Triplettpotentials stattfinden, ist für letzteren die Triplettstreuränge $a_T = 99 a_0$ einzusetzen. Für eine typische Temperatur von $1\mu\text{K}$ bedeutet das, daß nur etwa jeder 17.000-ste Stoß inelastisch ist. Daher bietet der Zustand $|2, 2\rangle$ sehr gute Voraussetzungen für die BEK. Diese glückliche Konstellation beruht zum einen auf der ähnlichen Stärke der beiden Dipolbeiträge V_{SS} und V_{SB} , die mit entgegengesetzten Vorzeichen zum Streupotential beitragen [52], und zum anderen auf der ähnlichen Größe der Singulett- und Triplettstreurängen [62, 63].

3.2.6 Auswirkungen der Kohärenz

An dieser Stelle muß noch kurz auf die Rolle von Dichtefluktuationen in dem Gas eingegangen werden. Für Stöße ist offensichtlich relevant, wie oft sich im Mittel zwei Teilchen zum gleichen Zeitpunkt am gleichen Ort befinden. Daher sind Korrelationen zwischen den Teilchen wichtig. Mit der räumlichen Korrelationsfunktion zweiter Ordnung läßt sich schreiben:

$$\langle n^2 \rangle = g^{(2)}(r=0) \langle n \rangle^2. \quad (3.40)$$

In einem thermischen Gas sind die Atome unkorreliert, und daher treten Dichtefluktuationen auf. Dies führt zu $g^{(2)}(0) = 2$, wie unlängst experimentell nachgewiesen werden konnte [73]. In einem Kondensat befinden sich hingegen alle Atome im gleichen Quantenzustand und sind somit kohärent, in vollständiger Analogie zu den Photonen im Laserlicht. Daher gibt es keine Dichtefluktuationen und es gilt $\langle n^2 \rangle = \langle n \rangle^2$, also $g^{(2)}(0) = 1$. Bei der gleichen mittleren Dichte $\langle n \rangle$ finden deswegen in einem Kondensat um einen Faktor Zwei weniger Stöße statt als in einem thermischen Gas¹². Mit der Beobachtung dieser Eigenschaft gelang tatsächlich einer der ersten Nachweise für die Kohärenz zweiter Ordnung von Kondensaten [75]. Da Gleichung (3.37) für ein thermisches Gas gilt, muß für ein Kondensat $K_2^{\alpha'\alpha'}/2$ angesetzt werden.

3.3 Inelastische Drei-Körper-Stöße: Rekombination

Heutige BEK-Experimente befinden sich in aller Regel im Regime verdünnter Gase mit $na^3 \ll 1$. In solchen Systemen führt die Berücksichtigung der Wechselwirkung auf der Grundlage von elastischen Zwei-Körper-Stößen (siehe Kapitel 4) zu einer ausgesprochen guten Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Die Notwendigkeit, elastische Drei-Körper-Stöße in die Theorie einzubeziehen, ergibt sich neuerdings aus den ersten erfolgreichen Versuchen, die Wechselwirkung und damit die Verdünnung in Kondensaten durch die Manipulation der Streuränge zu variieren (vgl. Kapitel 3.2).

Dagegen beeinflussen *inelastische* Drei-Körper-Stöße in Alkali-Kondensaten bereits bei moderaten Dichten die Lebensdauer und sind in diesem Zusammenhang daher nicht zu

¹² Eine ausführliche Diskussion dieses Effektes ist in Referenz [74] nachzulesen.

vernachlässigen. Für das stark unterkühlte Gas sind solche Stöße die einzige Möglichkeit, sich durch Molekülbildung dem thermodynamischen Grundzustand zu nähern. Der Prozeß, bei dem zwei Atome in der Anwesenheit eines dritten ein Molekül bilden, wird als Rekombination bezeichnet. Aufgrund des verhältnismäßig großen mittleren Abstandes zwischen den Atomen eines verdünnten Gases ist ein signifikanter Überlapp der Ortswellenfunktionen vor und nach dem Stoß nur für stark ausgedehnte Molekülzustände gegeben. Daher bildet sich das Molekül in der Regel im höchsten gebundenen Zustand des Potentials, dessen Bindungsenergie höchstens einige mK beträgt. Diese Energie wird im Verhältnis 1:2 auf das Molekül und das Atom verteilt und ist zwar etwa sechs Größenordnungen geringer als die Potentialtiefe (vgl. Abbildung 3.5), andererseits aber auch mehr als drei Größenordnungen höher als die Energie der kondensierten Atome. Dadurch gehen bei dem Prozeß drei Atome verloren. Im Experiment ist man an der Rate K_3 interessiert, mit der dies geschieht. Analog zu Gleichung (3.37) gilt nun für die zeitliche Entwicklung der Dichte

$$\frac{dn}{dt} = -K_2 n^2 - K_3 n^3. \quad (3.41)$$

Offensichtlich wird Rekombination bei ausreichend hoher Dichte zum dominanten Verlust.

Dem frühen Interesse an Wasserstoff als Kandidat für die BEK ist es zu verdanken, daß der Formalismus und die numerischen Methoden zur Bestimmung der Stoßquerschnitte und Übergangsraten für inelastische Zwei-Teilchen-Stöße eine bereits 15 Jahre währende Entwicklungszeit hinter sich hatten, als die BEK 1995 zum ersten Mal beobachtet werden konnte. Gemessen daran befindet sich die Theorie der Rekombination noch in den Kinderschuhen. Dies liegt nicht allein an der wesentlich komplizierteren Struktur des Problems, sondern auch an der Tatsache, daß der Prozeß bei spinpolarisiertem Wasserstoff eine viel geringere Rolle spielt und daher wenig untersucht wurde: Da das Triplettpotential des H-Dimers keine gebundenen Zustände aufweist, ist Molekülbildung nur im Singulettpotential möglich und erfordert somit den Spinflip mindestens eines der Atome. Dies führt zu Rekombinationsraten, die um etwa zehn Größenordnungen kleiner sind als jene von Alkaliatomen [65].

Bei einem Drei-Körper-Stoß im Regime $na^3 \ll 1$ wechselwirken die Atome in guter Näherung paarweise miteinander. Qualitativ ist daher zu erwarten, daß die Wahrscheinlichkeit für einen Drei-Körper-Stoß mit der Streulänge zunimmt, da sie die effektive Reichweite der Paarwechselwirkung bestimmt. Erste Prognosen für die Rekombinationsraten von Alkaliatomen beruhten auf einem störungstheoretischen Ansatz, der für Wasserstoff entwickelt worden war, dessen Gültigkeit allerdings für die wesentlich stärker wechselwirkenden Alkaliatome fraglich ist [76, 77]. Das Ergebnis dieser Analysen ist eine Proportionalität der Rekombinationsraten zu a^2 . Für den Fall sehr großer positiver Streulängen haben Fedichev et al. und Nielsen et al. nachgewiesen, daß diese Prognose nicht zutreffen kann und tatsächlich eine Proportionalität zu a^4 zu erwarten ist [78, 79]. Im wesentlichen haben Esry et al. diese Abhängigkeit im Rahmen der zur Zeit einzigen Methode, die beliebige Werte der Streulänge zuläßt, reproduziert [80]. Die von ihnen ermittelten Ratenkonstanten sind außerdem in guter quantitativer Übereinstimmung mit (den wenigen) experimentell bestimmten. Von einem völlig anderen Ansatz ausgehend, kamen schließlich Bedaque et al. zu ähnlichen Prognosen für positive Streulängen [81]. In keiner der

genannten Arbeiten ist jedoch das volle Wechselwirkungspotential (3.17) berücksichtigt, insbesondere werden die Hyperfein- und die Zeeman-Wechselwirkungen vernachlässigt. Dieser Umstand ist auf die Komplexität des Problems zurückzuführen. Es ist daher zu erwarten, daß sich in bestimmten Situationen Abweichungen vom Experiment ergeben. Im folgenden sind die Wesenszüge der sog. adiabatisch-hypersphärischen Methode nach den Referenzen [82, 83, 80, 53] grob zusammengefaßt.

Der entscheidende Ansatz dabei ist, das Drei-Körper-Problem durch eine Koordinatentransformation auf die Streuung eines Teilchens an einem effektiven Potential zurückzuführen. Dies geschieht durch die Transformation in hypersphärische Koordinaten. Die neun kartesischen Koordinaten $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$ der drei Atome werden dabei stufenweise reduziert. Zunächst erfolgt die Transformation in sechs Jacobi-Koordinaten, was einer Abseparation der unwichtigen Schwerpunktsbewegung entspricht:

$$\begin{aligned}\vec{\rho}_1 &= (\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \\ \vec{\rho}_2 &= \left[\vec{r}_3 - \frac{(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)}{2} \right].\end{aligned}\quad (3.42)$$

Die beiden neuen Radien entsprechen somit dem relativen Ortsvektor zweier Teilchen und der Position des dritten Teilchens bezüglich deren Schwerpunkt. Aufgrund der Permutationssymmetrie gibt es drei gleichberechtigte Koordinatensysteme. Eine Beschreibung der Streuung identischer Teilchen in diesen Koordinaten hätte also eine lästige Symmetrisierung zur Folge. Analog zum Zwei-Teilchen-Stoß kann nun aber auch in diesem Fall davon ausgegangen werden, daß bei niedrigen Energien der gesamte Bahndrehimpuls des Systems vor dem Stoß $L = 0$ ist. Vernachlässigt man Korrekturen zum Wechselwirkungspotential, die den Drehimpuls nicht erhalten, gilt Gleiches auch nach dem Stoß. Dann können die drei Euler-Winkel, die Drehungen des von den Atomen aufgespannten Dreiecks bestimmen, ebenfalls absepariert werden. Die verbleibenden drei hypersphärischen Koordinaten sind dann wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}\mu R^2 &= \mu_1 \rho_1^2 + \mu_2 \rho_2^2 \quad \text{mit} \quad \mu_1 = \frac{m}{2} \quad \text{und} \quad \mu_2 = \frac{2m}{3}, \\ \tan \phi &= \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_1}} \frac{\rho_2}{\rho_1}, \\ \cos \theta &= \frac{\vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2}{\rho_1 \rho_2}.\end{aligned}\quad (3.43)$$

Während μ_1 und μ_2 die reduzierten Massen darstellen, die den beiden Jacobi-Radien zugeordnet sind, ist μ ein frei wählbarer Skalierungsparameter. In der Regel wird hierfür $m/\sqrt{3}$ gewählt. Dann ergibt sich der Hyperradius aus den Abständen r_{ij} der Atome gemäß

$$R^2 = \frac{r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{13}^2}{\sqrt{3}}\quad (3.44)$$

und stellt also ein Maß für die Größe des Drei-Körper-Systems dar. Wie zu erwarten war, ist er unabhängig von der Wahl eines der drei möglichen Jacobi-Koordinatensysteme. Somit ist die Permutationssymmetrie in die Formulierung eingebaut worden.

Die stationäre Schrödingergleichung läßt sich nun in den neuen Koordinaten darstellen, wobei für das Wechselwirkungspotential in guter Näherung die Summe der Zwei-Teilchen-Potentiale $V = V_{12} + V_{13} + V_{23}$ angesetzt werden kann. Durch eine Skalierung der Wellenfunktion gemäß $\Psi(R, \theta, \phi) = R^{-5/2}\psi(R, \theta, \phi)$, lassen sich die ersten Ableitungen aus der Differentialgleichung eliminieren, und zu lösen gilt schließlich

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\Lambda^2(\theta, \phi) + 15/4}{R^2} \right) + V(R, \theta, \phi) \right] \psi(R, \theta, \phi) = E \psi(R, \theta, \phi), \quad (3.45)$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \psi(0, \theta, \phi) &= 0, \\ \psi(R, \theta, 0) &= \psi(R, \theta, \frac{\pi}{2}) = 0, \\ \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \Big|_{\theta=0} &= \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\pi} = 0. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Der Term $\Lambda^2(\theta, \phi)$ ist der Drehimpulsoperator des Systems in hypersphärischen Koordinaten. Er hat die Form:

$$\Lambda^2(\theta, \phi) = -\frac{1}{\sin 4\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin 4\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\cos^2 2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (3.47)$$

Um einen intuitiven Zugang zu dem Streuprozess zu erhalten, ist man wie im Falle einfacher Potentialstreuung daran interessiert, die dreidimensionale Schrödingergleichung (3.45) auf ein System eindimensionaler Differentialgleichungen zurückzuführen. Die Lösung beginnt daher mit der Expansion

$$\psi(R, \theta, \phi) = \sum_{\nu=0}^{\infty} F_{\nu}(R) \Phi_{\nu}(R; \theta, \phi, \chi) \quad (3.48)$$

nach sog. adiabatischen Streukanälen $\Phi_{\nu}(R; \theta, \phi, \chi)$ wobei χ die Spinfreiheitsgrade bezeichnet. Die Streukanäle sind Eigenfunktionen der Schrödingergleichung (3.45) zu festem Hyperradius R :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Lambda^2(\theta, \phi) + 15/4}{R^2} + V(R; \theta, \phi) \right) \Phi_{\nu}(R; \theta, \phi, \chi) = U_{\nu}(R) \Phi_{\nu}(R; \theta, \phi, \chi). \quad (3.49)$$

Diese Gleichung wird nun numerisch gelöst, wodurch ein Satz adiabatischer Potentiale $U_{\nu}(R)$ und ein Satz von Eigenfunktionen bestimmt werden. Letztere hängen parametrisch von R ab. In der Folge zerfällt die Schrödingergleichung (3.45) mit dem Ansatz (3.48) in ein System gekoppelter, eindimensionaler Hyperradialgleichungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dR^2} F_{\mu}(R) + 2 \sum_{\nu} P_{\mu\nu} \frac{d}{dR} F_{\nu}(R) + \sum_{\nu} Q_{\mu\nu} F_{\nu}(R) \right) + U_{\mu}(R) F_{\mu}(R) = E_{\mu} F_{\mu}(R). \quad (3.50)$$

Die Kopplungsmatrizen $P_{\mu\nu} = \langle \Phi_{\mu} | \frac{d}{dR} \Phi_{\nu} \rangle$ und $Q_{\mu\nu} = \langle \Phi_{\mu} | \frac{d^2}{dR^2} \Phi_{\nu} \rangle$ kommen durch die nicht verschwindenden Ableitungen der Streukanäle Φ_{ν} nach dem Hyperradius zustande.

Die Terme $U_\mu(R)$ spielen die Rolle effektiver Potentiale. Aufgrund der parametrischen Abhängigkeit der Streukanäle von R werden durch die Lösung des Gleichungssystems (3.50) die Energieeigenzustände des Drei-Körper-Systems vollständig bestimmt.

Jeder gebundene Zustand des Moleküls (einschließlich des dritten, freien Atoms) stellt einen sog. Rekombinationskanal dar und entspricht asymptotisch genau einem der Drei-Körper-Energieeigenzustände. Die verbleibenden Drei-Teilchen-Zustände entsprechen elastischen Streuresonanzen, die asymptotisch zu drei freien Atomen führen. Es zeigt sich, daß die Gesamtzahl der Eigenzustände von der Größe der Streulänge abhängt und für endliche Werte von a ebenfalls endlich ist [84]. Daher eignet sich der S-Matrix-Formalismus für die weitere Behandlung der Hyperradialgleichungen. Dies kommt der Beschreibung gleich, die bereits in Abschnitt 3.2 am Beispiel der Spinrelaxation vorgestellt wurde. Anders als dort hat man es aber in diesem Fall mit einer unbeherrschbaren Anzahl von Zuständen zu tun¹³. Aus den oben erwähnten Gründen des Überlapps ist jedoch anzunehmen, daß Moleküle hauptsächlich in ihrem höchsten gebundenen Zustand entstehen. Es liegt daher nahe, in den Rechnungen statt des exakten Triplettpotentials ein Modellpotential zu verwenden, das nur wenige gebundene Zustände (und damit auch Rekombinationskanäle) zuläßt. Durch Skalierung dieses Potentials läßt sich, wie in Kapitel 3.1 veranschaulicht wurde, auch die Streulänge variieren und deren Auswirkung auf die Rekombinationsrate untersuchen.

Die Analyse von Esry et al. zeigt, daß es im wesentlichen ausreicht, Molekülpotentiale mit nur einem gebundenen Zustand zu betrachten [80]. Daher ist die Rekombinationsrate fast ausschließlich durch die Streulänge bestimmt und nur gering von der exakten Form des Zwei-Teilchen-Potentials abhängig. Für $T \rightarrow 0$ kommt zudem als Eingangskanal nur der tiefste Energieeigenzustand des Drei-Körper-Systems in Frage, der asymptotisch drei freien Atomen entspricht. Die Verlustratenkonstante ergibt sich dann im wesentlichen aus nur einem S-Matrixelement¹⁴:

$$K_3 = 3456\pi^2 \frac{\hbar}{\mu k^4} |S_{A_2+A \leftarrow A+A+A}|^2. \quad (3.51)$$

Anschaulich erhält man in der hypersphärischen Darstellung ein zum Spinaustausch beim Zwei-Teilchen-Stoß analoges Bild (vgl. Kapitel 3.2). Am Ort der Kopplung wird die Amplitude der einlaufenden Welle durch Projektion auf die beiden Kanäle aufgeteilt. An der gleichen (Hyperradial-)Position erfolgt nach der Reflexion an den effektiven Potentiale $U_\nu(R)$ die Projektion auf die Endzustände. Das Ergebnis hängt von der relativen Phase der Teilamplituden ab. Anders als beim Spinaustausch bestimmt jetzt die Triplettstrelänge beide Potentiale und so auch den Phasenunterschied. Bei bestimmten Werten der Streulänge wird daher eine unterdrückte Rekombinationsrate erwartet. Tatsächlich ergibt sich für $|S_{A_2+A \leftarrow A+A+A}|^2$ im Falle großer, positiver Streulängen und geringer Energien eine Proportionalität zu $(ka)^4 \sin^2 \phi$, wo ϕ den erwähnten Phasenunterschied darstellt. Er hängt vom Verhältnis der Streulänge zur Reichweite des Zwei-

¹³ Die Anzahl der Rekombinationskanäle für maximal spinpolarisierte ⁸⁷Rb-Atome beträgt 1466 und nimmt allgemein mit der atomaren Masse zu [53].

¹⁴ Aus Gründen der Konsistenz bezeichnet hier K_3 die Verlustrate und nicht wie in Referenz [80] die Rekombinationsrate.

Teilchen-Wechselwirkungspotentials ab. Mit Gleichung (3.51) führt dies schließlich zu einer energieunabhängigen Ratenkonstante mit einer modulierten a^4 -Abhängigkeit. Auf dieses Ergebnis kommen im wesentlichen auch Bedaque et al. in Referenz [81].

Für ^{87}Rb im Zustand $|2, 2\rangle$ geben Esry et al. die Ratenkonstante

$$K_3 = 1,15 \times 10^{-28} \text{ cm}^6/\text{s} \quad (3.52)$$

an. Dieses Ergebnis ist in ausgezeichneter Übereinstimmung mit dem experimentell ermittelten Wert von $1,08 (\pm 0,3) \times 10^{-28} \text{ cm}^6/\text{s}$ [72]. Beide Werte gelten für ein inkohärentes Ensemble. Analog zur Situation bei Zwei-Körper-Stößen, bestimmt in diesem Fall die Dichtekorrelationsfunktion dritter Ordnung die Wahrscheinlichkeit, drei Atome zeitgleich am selben Ort anzutreffen. In einem kohärenten Ensemble sind Dichtefluktuationen unterdrückt, und $g^{(3)}(0)$ ist um den Faktor $3!$ kleiner als in einem thermischen Gas. In einem Kondensat finden Rekombinationsverluste daher mit der Rate $K_3/6$ statt. Durch die Beobachtung dieses Effektes konnte experimentell nachgewiesen werden, daß Kondensate in dritter Ordnung kohärent sind [85].

Ein Vergleich der Verlustraten (3.39) und (3.52) durch inelastische Zwei- und Drei-Körper-Stöße zeigt, daß Rekombination in einem maximal polarisierten Rb-Gas bei Teilchendichten in der Größenordnung von $n = K_2/K_3 \approx 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ bereits den dominanten Verlustprozeß darstellt¹⁵. Da alle elastischen Stoßraten energieabhängig bleiben, gilt auch hier wieder, daß das Verhältnis von „guten“ zu „schlechten“ Stößen mit sinkender Temperatur ungünstiger wird.

Für das Experiment ist schließlich noch die Energie von Bedeutung, die bei dem Rekombinationsprozeß freigesetzt und in kinetische Energie der Stoßprodukte umgewandelt wird. Neuesten spektroskopischen Ergebnissen zufolge beträgt die Bindungsenergie des höchsten gebundenen Vibrationszustands im Triplettpotential von ^{87}Rb in Temperatureinheiten $E/k_B = 1,2 \text{ mK}$ [47].

¹⁵ In einem kohärenten Ensemble tritt diese Situation bei einer dreifach höheren Dichte ein.

Kapitel 4

Der Grundzustand in der Molekularfeldnäherung

Im Lichte der Ausführungen des letzten Kapitels wird klar, daß sich im Experiment Abweichungen von der idealen Gastheorie offenbaren müssen. Im folgenden sollen diese quantifiziert werden. Als Ausgangspunkt ergibt sich aus der Analyse der elastischen und inelastischen Streuvorgänge in einem atomaren Gas folgendes Bild:

- Um die BEK in ihrer „Reinkultur“ studieren zu können, muß die Wechselwirkung in dem System gering gehalten werden. Dies wird durch eine ausreichende Verdünnung des Gases gewährleistet. Das bedeutet zunächst, daß die kritische Phasenraumdicke $n\lambda_T^3 \sim 1$ nur mit ultrakalten Atomen erreicht werden kann. In diesem Fall wird die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung durch elastische s-Wellen-Streuung beschrieben, und das Kriterium für Verdünnung lautet $na^3 \ll 1$. Unter dieser Voraussetzung läßt sich die N-Teilchen-Wechselwirkung als Summe aller Paarwechselwirkungen darstellen, was die theoretische Untersuchung des Systems, wie sich gleich zeigen wird, ungemein erleichtert. Zusätzlich ist durch die Verdünnung auch für eine ausreichende Lebensdauer des Kondensats gesorgt, da die inelastischen Stoßraten schnell mit der Dichte abnehmen und endotherme Prozesse bei den zwangsweise tiefen Temperaturen unterdrückt sind.
- Die s-Wellen-Streuung ist nicht von den Details des Streupotentials abhängig. Daher läßt dieses sich im Zuge einer theoretischen Beschreibung des Systems durch ein beliebiges Potential ersetzen, das zur gleichen Streulänge führt. Da letztere experimentell bestimmt werden kann, ist man, sofern man an elastischen Stößen interessiert ist, nicht auf die Kenntnis des Wechselwirkungspotentials angewiesen.
- In einem verdünnten Gas ist neben der Streulänge auch die charakteristische Reichweite R_0 des Potentials sehr viel kleiner als der mittlere Teilchenabstand. Es liegt daher nahe, sich für das Kontaktpotential $V(\vec{r}) = g\delta(\vec{r})$ zu entscheiden, wo g ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung darstellt. Die exakte Streutheorie liefert jedoch für ein solches Potential (mit $g \rightarrow \infty$ für $R_0 \rightarrow 0$) eine verschwindende

Streulänge¹. Allerdings impliziert das Erreichen der kritischen Phasenraumdichte in einem verdünnten Gas, daß $a/\lambda_T \ll 1$ gilt. Damit wird auch die Ausdehnung der Grundzustandswellenfunktion wesentlich größer sein als der Wirkungsbereich des Potentials, das somit – trotz der niedrigen Stoßenergie – als kleine Störung betrachtet werden kann. Dies rechtfertigt die Bornsche Näherung, in der das Kontaktpotential mit

$$g = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} \quad (4.1)$$

wie gewünscht zur Streulänge a führt. Davon kann man sich mit Hilfe von Gleichung (3.4) leicht überzeugen.

Die obigen Schlußfolgerungen müssen natürlich in der Umgebung von Streuresonanzen einer sorgfältigen Prüfung unterzogen werden.

4.1 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung

Nun kann man sich auf die Suche nach dem Grundzustand des wechselwirkenden N-Teilchensystems in dem äußeren Potential $U(\vec{r})$ begeben. In der Ortsdarstellung der zweiten Quantisierung ist der Hamilton-Operator unter Beschränkung auf die Paarwechselwirkungen durch

$$\mathcal{H} = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \Psi(\vec{r}') \Psi(\vec{r}) \quad (4.2)$$

gegeben. Dabei sind $\Psi^\dagger(\vec{r})$ und $\Psi(\vec{r})$ die Feldoperatoren, die ein Teilchen am Ort \vec{r} erzeugen oder vernichten. Der bosonischen Statistik des Systems wird durch die Kommutatorrelationen

$$[\Psi(\vec{r}), \Psi^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad [\Psi(\vec{r}), \Psi(\vec{r}')] = 0, \quad [\Psi^\dagger(\vec{r}), \Psi^\dagger(\vec{r}')] = 0 \quad (4.3)$$

Rechnung getragen. Im Heisenberg-Bild ergibt sich gemäß $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = [\Psi(\vec{r}, t), \mathcal{H}]$ die Bewegungsgleichung für den Feldoperator Ψ zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + g \Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \right) \Psi(\vec{r}, t). \quad (4.4)$$

Dabei ist die Bornsche Näherung als gerechtfertigt vorausgesetzt und das Kontaktpotential eingesetzt worden. Da $\Psi^\dagger(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$ den Dichteoperator darstellt, verursacht die Kontaktwechselwirkung für das Atom am Ort \vec{r} ein effektives Potential, das proportional

¹ Üblicherweise wird das Problem durch eine Regularisierung des Kontaktpotentials gelöst. Der Einsatz dieser sog. Methode der Pseudopotentiale [35] ist jedoch nicht erforderlich, falls die Grundzustandswellenfunktion die Voraussetzungen für die Bornsche Näherung erfüllt.

zur lokalen Dichte ist. Ob es attraktiv oder repulsiv ist, hängt wegen (4.1) allein vom Vorzeichen der Streulänge ab, in Einklang mit den Überlegungen in Kapitel 3.1.

In der Regel läßt sich Gleichung (4.4) nicht exakt lösen, und numerische Methoden stoßen bereits bei geringen Teilchenzahlen an ihre Grenzen. Beherrschbar wird das Problem jedoch in der Molekularfeld-Näherung (engl. mean field). Sie besteht darin, den Feldoperator Ψ durch seinen Erwartungswert $\langle \Psi(\vec{r}, t) \rangle \equiv \Phi(\vec{r}, t)$ zu ersetzen. Ein solcher Ansatz ist unter zwei Voraussetzungen sinnvoll. Zum ersten muß der Grundzustand des Systems nahezu alle Teilchen enthalten, was der Annahme entspricht, daß sich das Gas weit unterhalb der Übergangstemperatur befindet und die Wechselwirkung gering ist. Dann erzeugen und vernichten die Feldoperatoren hauptsächlich kondensierte Teilchen, und Konfigurationen mit N bzw. $N+1$ Atomen im Grundzustand sind physikalisch äquivalent. In diesem Fall kann man den ersten Kommutator in (4.3) vernachlässigen, wodurch die Feldoperatoren effektiv durch ein klassisches Feld mit einer definierten Phase ersetzt werden. Wie grob die Fehler sind, die dabei unterlaufen können, wird zum zweiten empfindlich von der Reichweite der Wechselwirkung abhängen. Durch die Beschränkung auf den Erwartungswert $\Phi(\vec{r}, t)$ vernachlässigt man nämlich sämtliche Korrelationen zwischen den Teilchen. Diese können aber den Beitrag der Wechselwirkung zum Hamilton-Operator (4.2) auf Skalen, auf denen V eine Rolle spielt, stark beeinflussen. Die Molekularfeldnäherung wird daher gut sein, wenn die Wellenfunktion über die Reichweite des Wechselwirkungspotentials nur wenig variiert. Genau dies wurde aber im Zusammenhang mit der Bornschen Näherung vorausgesetzt.

Ersetzt man in Gleichung (4.4) die Feldoperatoren durch ihren Erwartungswert $\Phi(\vec{r}, t)$, erhält man die Gross-Pitaevskii-Gleichung [86, 87]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + g|\Phi(\vec{r}, t)|^2 \right) \Phi(\vec{r}, t) \quad (4.5)$$

für den Erwartungswert². Sie beschreibt gleichzeitig die Bewegung eines Teilchens im äußeren Potential und dem durch alle kondensierten Teilchen zustande kommenden Molekularfeld. Im Kontext von Phasenübergängen zweiter Ordnung stellt $\Phi(\vec{r}, t)$ den Ordnungsparameter des Systems dar.

Im stationären Fall kann die triviale Zeitabhängigkeit gemäß $\Phi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})e^{-i\mu t/\hbar}$ absepariert werden, und man erhält schließlich die stationäre, nichtlineare Schrödingergleichung

$$\mu\phi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) + g|\phi(\vec{r})|^2 \right) \phi(\vec{r}) \quad (4.6)$$

für den Ordnungsparameter bzw. die *Kondensat-Wellenfunktion*. Über die Normierung $\int |\phi(\vec{r})|^2 d^3r = N_0$ hängt die Anzahl der kondensierten Atome mit dem chemischen Potential μ zusammen. Erwartungsgemäß erhält man im wechselwirkungsfreien Fall mit $g = 0$

² Analog zu den Hartree- bzw. Hartree-Fock-Gleichungen kann sie auch ausgehend vom Ritzschen Variationsprinzip gewonnen werden, wobei die Variation im Raum der Testwellenfunktionen durchgeführt wird, die sich als Produkt von N identischen Ein-Teilchen-Zuständen schreiben lassen (siehe z.B. [88]).

für die Dichteverteilung $n_0(\vec{r}) = |\phi(\vec{r})|^2$ in einem harmonischen Potential die Lösung (2.27) mit $\mu = \frac{3}{2}\hbar\bar{\omega}$.

Von dem Wechselwirkungsterm $gn(\vec{r})$ ausgehend, lassen sich bereits einige Prognosen mit Bezug auf den Grundzustand ableiten. Zunächst ist zu erkennen, daß es im Falle negativer Streulängen an Orten hoher Dichte zu einer Absenkung der Grundzustandsenergie kommt. Ein homogenes Gas mit negativer Streulänge wird daher unter dem Einfluß der attraktiven Wechselwirkung instabil sein (und Moleküle bilden), sobald der Grundzustand besetzt wird. Dieser Effekt kann in einem äußeren Potential verhindert werden. Hier kann die endliche kinetische Energie der Teilchen im Grundzustand (der sog. Quantendruck) die Wechselwirkungsenergie kompensieren. Erst wenn letztere mit zunehmender Anzahl kondensierter Teilchen überwiegt, wird das Gas instabil. Tatsächlich läßt sich die dann eintretende „Implosion“ der Wellenfunktion im Experiment beobachten [89, 90]. Eine anschauliche Erklärung dieses Schwellverhaltens findet sich für den Fall eines harmonischen äußeren Potentials in Referenz [91]: Aufgrund der minimalen Unschärfe des Grundzustandes kann die Ausdehnung der Wellenfunktion zunächst nicht, wie für den Kollaps des Gases erforderlich, abnehmen. Erst wenn die Wechselwirkungsenergie von der Größenordnung $\hbar\omega$ wird, ist die Besetzung angeregter Zustände möglich und die Wellenfunktion kann im Ortsraum schmaler werden. In der Tat bestimmt dieses Kriterium die maximale Anzahl kondensierter Atome in einem System mit negativer Streulänge. Mit ${}^7\text{Li}$ etwa lassen sich unter typischen experimentellen Bedingungen Kondensate mit gut 1000 Atomen erzeugen.

Der Vergleich mit der Energie $\hbar\omega$ hat auch für positive Werte von a eine hohe Aussagekraft. In diesem Fall wird die repulsive Mean-Field-Energie, sobald sie überwiegt, zu einer vergrößerten Ausdehnung des Grundzustands führen. Im Experiment kann sie leicht einige zehnmals größer als die Oszillatorlänge $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ werden, die man für ein ideales Gas erwarten würde. Unter diesen Umständen läßt sich die kinetische Energie der kondensierten Atome gegen die Wechselwirkungsenergie völlig vernachlässigen. Der Grundzustand ist dann vollständig durch die Form des äußeren Potentials, die Streulänge, die Masse und die Anzahl kondensierter Atome bestimmt. In dieser sog. Thomas-Fermi-Näherung, die Gegenstand des folgenden Abschnitts ist, vereinfacht sich die Gross-Pitaevskii-Gleichung erheblich.

In der Regel lassen sich (4.5) und (4.6) nicht analytisch lösen, mit numerischen Methoden kommt man jedoch häufig ans Ziel. Dies gilt auch für die Linearisierung und die zahlreichen Verallgemeinerungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung, die ihren Einsatz auch ermöglichen, wenn bei höheren Temperaturen eine signifikante Anzahl von Atomen nicht kondensiert ist. Dann muß in einem Mean-Field-Ansatz auch die Wechselwirkung mit dem nichtkondensierten Gas berücksichtigt werden. Eine gute Übersicht liefern in diesem Zusammenhang die Beiträge von K. Burnett und A. Griffin in Referenz [24]. Allgemein ist die Übereinstimmung der Mean-Field-Theorie mit den Experimenten beeindruckend (eine Übersicht liefern etwa die Referenzen [26, 24]). Daher stellt der Einsatz der Gross-Pitaevskii-Gleichung im Zusammenhang mit der BEK gering wechselwirkender atomarer Gase eine Erfolgsgeschichte dar.

4.2 Hohe Teilchenzahlen: Die Thomas-Fermi-Näherung

Wie bereits erwähnt, kann die Wechselwirkungsenergie der Atome im Grundzustand beträchtlich höher werden als ihre kinetische Energie. Ausgehend von der Grundzustandsdichte (2.27) des harmonischen Potentials mit typischen Oszillationsfrequenzen von $\bar{\omega} = \omega \simeq 2\pi \times 150$ Hz, erhält man aus der Forderung $g\langle n_0 \rangle \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}\hbar\bar{\omega}$ die kritische Teilchenzahl

$$N_{\text{crit}} = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\bar{\omega}}{\omega} \frac{a_{\text{ho}}}{|a|} \simeq 100, \quad \text{mit} \quad a_{\text{ho}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (4.7)$$

bei der die Wechselwirkung zwischen ^{87}Rb -Atomen einen zur kinetischen Energie vergleichbaren Beitrag liefert^{3,4}. Im Falle von ^7Li führt diese einfache Abschätzung zu $N_{\text{crit}} \simeq 1400$, in sehr guter Übereinstimmung mit der tatsächlich beobachteten maximalen Zahl von ca. 1200 kondensierten Atomen [89]. In ^{87}Rb -Experimenten können jedoch mehrere Millionen Atome kondensiert werden, und es ist daher klar, daß dann die Wechselwirkung den Grundzustand bestimmen wird.

In dieser Situation kann man den Operator der kinetischen Energie in Gleichung (4.6) vernachlässigen. Ausgehend von dem Ansatz eines effektiven, ortsabhängigen chemischen Potentials läßt sich zeigen, daß dies eine Analogie zur Thomas-Fermi-Näherung darstellt, die im Zusammenhang mit der Berechnung der Elektronendichte schwerer Atome auftaucht (auch lokaler Dichte-Ansatz genannt) [92]. Aus Gleichung (4.7) ist ersichtlich, daß $N_0 \gg N_{\text{crit}}$ der Forderung $N_0 a \gg a_{\text{ho}}$ entspricht. In der Thomas-Fermi-Näherung (im folgenden TF-Näherung genannt) wird die nichtlineare Schrödingergleichung (4.6) zu einer algebraischen Gleichung, die sich sofort nach der Dichteverteilung

$$n_0(\vec{r}) = |\phi(\vec{r})|^2 = \max \left\{ \frac{\mu - U(\vec{r})}{g}, 0 \right\} \quad (4.8)$$

des Kondensats auflösen läßt. Der Zusammenhang zwischen dem chemischen Potential und der Anzahl kondensierter Teilchen ergibt sich aus der Normierung der Kondensat-Wellenfunktion. Im harmonischen Potential (2.16) erhält man

$$\mu = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(15 \frac{N_0 a}{a_{\text{ho}}} \right)^{2/5} \quad (4.9)$$

und eine parabelförmige Dichteverteilung (4.8). Sie stellt das Spiegelbild des äußeren Potentials bezüglich der Achse dar, die durch das chemische Potential gegeben ist. Die Wellenfunktion erreicht die maximale Ausdehnung

$$W_i = \sqrt{\frac{8\mu}{m\omega_i^2}}. \quad (4.10)$$

³ Es gilt $n_p = n_0(0) = \sqrt{8}\langle n_0 \rangle$, mit $\langle n_0 \rangle = \frac{1}{N_0} \int n_0^2(\vec{r}) d^3r$.

⁴ Zur Erinnerung: ω bezeichnet das geometrische, $\bar{\omega}$ das arithmetische Mittel der Oszillationsfrequenzen.

Damit gilt jetzt $W_i \propto 1/\omega_i$, anders als in einem idealen Gas, für das nach Gleichung (2.27) der Zusammenhang $a_{\text{ho},i} \propto 1/\sqrt{\omega_i}$ erwartet wird. Im Experiment kann die Ausdehnung W_i zur Bestimmung der Teilchenzahl gemäß

$$N_0 = \frac{1}{480} \frac{m^2 \omega_i^5}{\hbar^2 \omega^3 a} W_i^5 \quad (4.11)$$

herangezogen werden.

Zu beachten ist, daß mit der TF-Näherung nicht nur ein globales, sondern auch ein lokales Gültigkeitskriterium verbunden ist. Es ist intuitiv verständlich, daß die Voraussetzungen für die Vernachlässigung des Quantendrucks am äußersten Rand des Kondensats nicht erfüllt sind. In dem Randbereich mit einer charakteristischen Ausdehnung ΔR ist die Wellenfunktion durch die Beiträge der kinetischen Energie und der Lageenergie im äußeren Potential bestimmt. Dies führt dazu, daß die Wellenfunktion bei $R = W/2$ tatsächlich nicht mit unendlicher Steigung, sondern stetig differenzierbar verschwindet. Dieser Bereich ist durch das Gleichgewicht

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Delta R^2} \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \Big|_R \quad \Delta R = m \omega^2 R \Delta R \quad (4.12)$$

zwischen der Abnahme der kinetischen und der Zunahme der potentiellen Energie definiert [93, 26], wobei hier der Einfachheit halber ein isotropes Potential betrachtet wurde. Daraus ergibt sich das charakteristische Verhältnis

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{\sqrt[3]{2}} \left(\frac{a_{\text{ho}}}{R} \right)^{4/3}. \quad (4.13)$$

Je kleiner es ist, desto sinnvoller ist die TF-Näherung.

In Abbildung 4.1 ist die Auswirkung der Wechselwirkung auf den Grundzustand veranschaulicht. Dabei wurden die für das Experiment typischen Parameter $\omega_x = \omega_y = 2\pi \times 240$ Hz, $\omega_z = 2\pi \times 24,5$ Hz und $N_0 = 10^6$ gewählt. Mit $W_z/(\sqrt{2} a_{\text{ho},z}) \simeq 25$ ist die Ausdehnung des wechselwirkenden Kondensats (*c*) etwa 25 Mal größer als die doppelte Standardabweichung des idealen Kondensats (*b*) im gleichen Potential. Entsprechend ist die zentrale Dichte infolge der repulsiven Wechselwirkung um ca. den Faktor 250 erniedrigt. Dafür, daß die TF-Näherung in dieser Situation gerechtfertigt ist, spricht auch das chemische Potential von $\mu/k_B \simeq 250$ nK, das die Energie $\hbar\omega$ fünfzigmal übertrifft. Wählt man für R und a_{ho} jeweils die geometrischen Mittel bezüglich der drei Raumrichtungen, erhält man nach (4.13) das charakteristische Verhältnis $\Delta R/R \simeq 0,03$. Damit reicht der „physikalische“ Bereich der TF-Parabel in Abbildung 4.1 bis auf etwa $1,5 \mu\text{m}$ an $R = W/2 = 45 \mu\text{m}$ heran. In diesem Zusammenhang erweist sich die Methode, auf die man in den meisten Fällen bei der Detektion des Kondensats zurückgreift, als vorteilhaft (siehe Kapitel 5). Dabei wird der Schatten, den die Atomwolke in einem nah-resonanten Laserstrahl durch Absorption erzeugt, auf eine Kamera abgebildet und die optische Dichte somit orts aufgelöst gemessen. Bei dem Verfahren „integriert“ der Laserstrahl die Teilchendichte entlang seiner Propagationsrichtung auf, und der Beitrag der Randbereiche zum Signal wird weiter reduziert⁵.

⁵ Der gleiche Effekt liegt auch bei der Phasenkontrastmikroskopie des Kondensats vor.

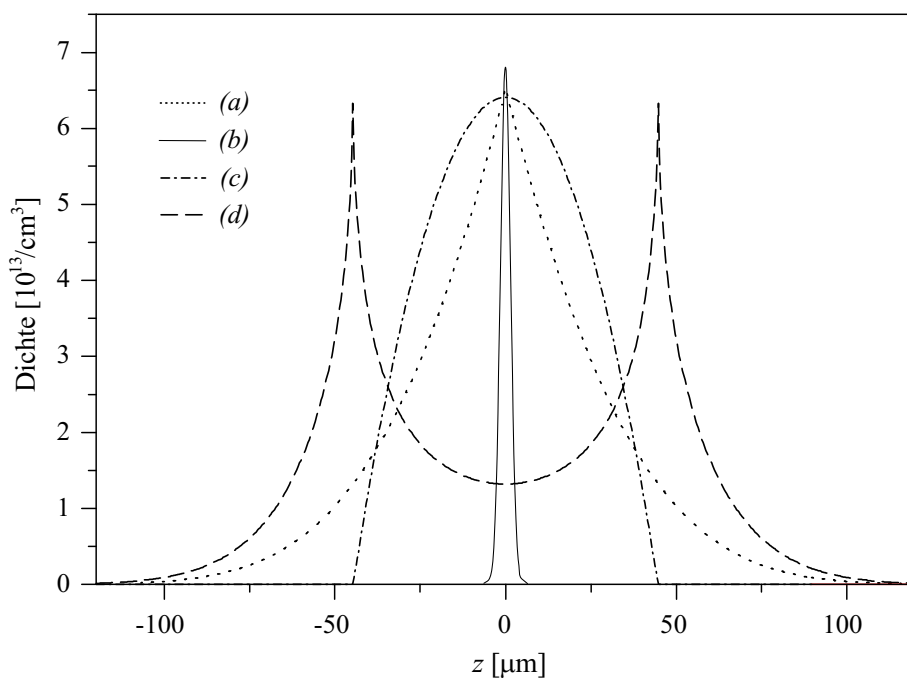


Abbildung 4.1: Auswirkungen der Wechselwirkung auf die Dichteverteilungen eines ^{87}Rb -Gases im harmonischen Potential mit $\nu_z = 24,5$ Hz und $\nu_x = \nu_y = 240$ Hz. (a): Verteilung von etwa 2×10^5 nichtkondensierten Teilchen bei $T = 300$ nK $\ll T_C$, ohne Berücksichtigung der Wechselwirkungen. (b): Wechselwirkungsfreies Kondensat mit 10^6 Atomen, um einen Faktor 2500 gestaucht. (c): Wechselwirkendes TF-Kondensat gleicher Teilchenzahl, um einen Faktor 10 gestaucht. (d): Wie (a), jedoch unter Berücksichtigung des durch (c) zustandekommenden, repulsiven Potentials. Im Vergleich zu (a) befinden sich bei $T = 300$ nK mehr als doppelt so viele Atome in angeregten Zuständen.

Auch wenn die Gross-Pitaevskii-Gleichung streng genommen nur im Limes $T \rightarrow 0$ gilt, kann ihr Einsatz sinnvoll sein, solange die Mean-Field-Wechselwirkung zwischen dem Kondensat und dem nichtkondensierten Teilensemble klein gegenüber der Wechselwirkung *im* Kondensat selbst bleibt. Dies ist der Fall, wenn die Dichte der sich in angeregten Zuständen befindlichen Atome viel geringer ist als jene des Kondensats. Eine solche Situation ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Unter Vernachlässigung aller Wechselwirkungen ist die Dichte $n_T(\vec{r})$ der nichtkondensierten Atome durch die Bose-Verteilung (2.25) gegeben (Kurve (a)). Bei $T = 300$ nK erreicht sie im Zentrum einen zehnmal geringeren Wert als die Dichte des wechselwirkenden Kondensats und entspricht nach Gleichung (2.19) insgesamt etwa 2×10^5 Atomen. Wegen $n_T(0)^2 < n_T(0)n_0(0) < n_0^2(0)$ muß im nächsten Schritt die Auswirkung des Kondensats auf die thermische Verteilung berücksichtigt werden, während das Kondensat zunächst als von der thermischen Wolke ungestört betrachtet werden kann. In dieser Näherung besteht die Rolle des Kondensats allein darin, das äußere Potential für die „idealen“ thermischen Atome um den Beitrag $2gn_0(\vec{r})$ abzuändern (für die daher immer noch $\mu_T = 0$ bzw. $\tilde{z} = 1$ gilt). Der Faktor 2 ist darauf zurückzuführen, daß der Beitrag in diesem Fall durch Stöße zwischen inkohärenten Atomen zustandekommt und

daher $g^{(2)}(0) = 2$ anzusetzen ist (vgl. auch Kapitel 3.2). Die Dichte in den angeregten Zuständen nimmt somit die Form

$$n_T(\vec{r}) = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2} \left(e^{-\beta|\mu - U(\vec{r})|} \right) \quad (4.14)$$

an. Dabei ist μ das chemische Potential des Kondensats in der TF-Näherung. Für die thermischen Atome wird offensichtlich durch die Wechselwirkung das harmonische Potential über die Ausdehnung des Kondensats effektiv umgeklappt und somit repulsiv. Kurve (d) in Abbildung 4.1 entspricht der Verteilung (4.14) und verdeutlicht diesen Effekt, der in gewisser Weise zu einer Phasentrennung zwischen den Teilensembles führt⁶. Er beruht allein auf dem oben erwähnten Faktor 2 und damit auf der Kohärenz des Kondensats.

4.3 Auswirkungen auf den Phasenübergang

Eine der wichtigsten Fragen, die es im Zusammenhang mit der Wechselwirkung zu beantworten gilt, ist, inwieweit der Verlauf der Grundzustandsbesetzung über die Temperatur von ihr beeinflusst wird. Leider kann weder die Wechselwirkung der thermischen Atome untereinander noch jene zwischen diesen und dem Kondensat auf einfache Weise einbezogen werden. Ihre Berücksichtigung ist in der Nähe der Übergangstemperatur jedoch zwingend notwendig. Hier ist natürlich auch die Verwendung der Gross-Pitaevskii-Gleichung in der Form (4.6) nicht erlaubt. Nichtsdestotrotz lassen sich aus den obigen Ausführungen bereits einige qualitative Prognosen ableiten. Zum einen muß erwartet werden, daß die kritische Phasenraumdichte $n_p \lambda_T^3 = 2,612$ im Vergleich zum inhomogenen, idealen Gas bei einer niedrigeren Temperatur erreicht wird, weil die repulsive Wechselwirkung zu einer Reduktion der zentralen Dichte führt⁷. Zum zweiten resultiert der oben erläuterte Phasentrennungseffekt für das thermische Gas in einer Vergrößerung seines effektiven Speichervolumens. Dadurch finden bei der gleichen Temperatur mehr Teilchen in den angeregten Zuständen Platz, als in einem idealen Gas (siehe Abbildung 4.1). Schließlich ist davon auszugehen, daß aufgrund der Wechselwirkung die maximale Besetzung des Grundzustandes nicht mehr hundert Prozent beträgt. Ein extremes Beispiel für diesen Effekt stellt flüssiges ^4He dar. In diesem sehr stark wechselwirkenden System wächst die Besetzung des Grundzustandes nie über etwa 10 % hinaus [94, 95].

Ausgehend von der sog. Popov-Verallgemeinerung der Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.6), die ihren Einsatz in der Nähe der Übergangstemperatur erlaubt [96], haben Giorgini et al. die Temperaturabhängigkeit der Grundzustandsbesetzung untersucht [97]. Auf die Methode kann an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden, von Bedeutung für diese

⁶ Die tatsächliche Dichteverteilung des thermischen Gases ist das Ergebnis *aller* Wechselwirkungen und wird aufgrund der Rückwirkung auf das Kondensat glatter als Kurve (d) in Abbildung 4.1 sein. Die Phasentrennung bleibt jedoch prinzipiell erhalten.

⁷ Das Gegenteil wird für negative Streulängen der Fall sein.

Arbeit ist jedoch das Ergebnis für die Verschiebung der Übergangstemperatur infolge der Wechselwirkung:

$$\frac{\delta T_c}{T_c^{(0)}} \simeq -1,33 \frac{a}{a_{\text{ho}}} N^{1/6}. \quad (4.15)$$

Für positive Streulängen hat die Verschiebung das gleiche Vorzeichen wie jene, die aufgrund der endlichen Teilchenzahl zustande kommt und durch Gleichung (2.22) gegeben ist. Während letztere jedoch mit zunehmender Teilchenzahl vernachlässigbar wird, muß gerade dann der Effekt der Wechselwirkung berücksichtigt werden. In heutigen Rb-Experimenten werden Verschiebungen von 10 % und mehr erwartet.

In der Mean-Field-Theorie befinden sich bei $T \rightarrow 0$ alle Atome im gleichen, niedrigsten Ein-Teilchen-Zustand (der jedoch durch die Wechselwirkung *aller* Atome bestimmt ist). Dieser Umstand ist eine direkte Folge der Vernachlässigung von Teilchenkorrelationen. Dadurch läßt sich die Grundzustandswellenfunktion des Systems als Produkt der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen darstellen. In der exakten Theorie hingegen würde das Wechselwirkungsintegral im Hamilton-Operator (4.2) unter Berücksichtigung der Kommutatorrelationen (4.3) dazu führen, daß sich der Grundzustand des N-Teilchen-Systems nicht mehr als N-faches Produkt von Ein-Teilchen-Zuständen schreiben läßt. Das bedeutet de facto, daß sich selbst bei $T = 0$ aufgrund der Korrelationen, die durch die Wechselwirkung vermittelt werden, einige Teilchen in energetisch höheren Zuständen befinden, auch wenn es in diesem Fall streng genommen keinen Sinn mehr macht, von einzelnen Teilchen zu sprechen. Die Größe dieses neudeutsch als *quantum depletion* bezeichneten Effekts stellt ein Maß für die Güte der Mean-Field-Beschreibung des Systems dar. Ausgehend von einem lokalen Dichte-Ansatz läßt sich zeigen, daß die Anzahl N_{nc} nichtkondensierter Teilchen bei $T = 0$ in erster Ordnung durch

$$\frac{N_{\text{nc}}}{N} = \frac{5\sqrt{\pi}}{8} \sqrt{a^3 n(0)} \quad (4.16)$$

gegeben ist [98, 26]. Es ist also im wesentlichen das Kriterium für Verdünnung, das in diesem Zusammenhang wieder auftaucht. Unter typischen experimentellen Bedingungen beträgt der Effekt lediglich etwa 1 %. Damit ist das Erstaunliche an der BEK verdünnter atomarer Gase, daß sich die Wechselwirkung zwar auf der einen Seite dramatisch auf den Grundzustand auswirkt (s.o.), auf der anderen Seite aber wiederum so gering ist, daß sich das Gas in statistischer Hinsicht nahezu ideal verhält. Aus der Möglichkeit, die Streulänge über weite Bereiche zu variieren (siehe Kapitel 3.2), ergibt sich neuerdings die einmalige Perspektive, den Übergangsbereich zwischen dem idealen und dem stark wechselwirkenden Gas zu erkunden.

4.4 Freie Expansion als Signatur des Kondensats

In Kapitel 2.3 wurde darauf hingewiesen, daß die freie Expansion eines zuvor anisotrop gespeicherten idealen Kondensats auch anisotrop erfolgen muß. Ursächlich dafür ist die minimale Unschärfe des Grundzustands. Im TF-Regime ist diese Voraussetzung nicht

mehr erfüllt, und es stellt sich daher die Frage, inwieweit die Expansion als Signatur der BEK erhalten bleibt. Daß es überhaupt zu einer Expansion kommt, liegt in diesem Fall allein an der Wechselwirkungsenergie

$$E_{\text{ww}} = \frac{1}{2} \int g n_0^2(\vec{r}) d^3r = \frac{2}{7} \mu N_0 \propto N_0^{7/5}, \quad (4.17)$$

die im System gespeichert ist und während der Expansion in kinetische Energie umgewandelt werden kann.

Die freie Expansion des TF-Kondensats läßt sich klassisch verstehen [99]. In dem Gas wirkt auf ein Teilchen am Ort \vec{r} die Kraft

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = -\nabla [U(\vec{r}, t) + g n_0(\vec{r}, t)], \quad (4.18)$$

die dem Gradienten der Gesamtenergie entspricht und im Gleichgewicht, also für $t < 0$, verschwindet. An dieser Gleichung ist bereits zu erkennen, daß die Expansion auch in diesem Fall anisotrop erfolgen wird, wenn das Speicherpotential selbst anisotrop ist: Mit dem Verschwinden des Potentials zum Zeitpunkt $t = 0$ beginnt die Expansion unter der Wirkung der Kraft $\vec{F}(\vec{r}, 0) = -\nabla g n_0(\vec{r}, 0) = \nabla U(\vec{r})$. Die Anfangsbeschleunigung in einer gegebenen Richtung hängt damit von der Steilheit des Speicherpotentials in dieser Richtung ab.

Im einfachsten Ansatz kann man davon ausgehen, daß die Form der Dichteverteilung während der Expansion in jeder Richtung erhalten bleibt. Dann bewegen sich die Atome entlang der Trajektorien

$$r_i(t) = \lambda_i(t) r_i(0), \quad \text{mit} \quad i = x, y, z, \quad (4.19)$$

deren Skalenparameter $\lambda_i(t)$ nicht vom Ort abhängen. Ausgehend von einem harmonischen Potential ist die Dichte zu einem beliebigen Zeitpunkt folglich durch

$$n_0(\vec{r}, t) = \max \left\{ \frac{\mu - \sum_i \frac{m \omega_i^2 r_i^2}{2 \lambda_i^2(t)}}{g \lambda_x(t) \lambda_y(t) \lambda_z(t)}, 0 \right\} \quad (4.20)$$

gegeben. Das Newtonsche Kraftgesetz $F_i(t) = m \ddot{r}_i(t)$ führt mit den Gleichungen (4.18), (4.19) und (4.20) sofort auf das Differentialgleichungssystem

$$\ddot{\lambda}_i(t) = \frac{\omega_i^2}{\lambda_i(t) \lambda_x(t) \lambda_y(t) \lambda_z(t)} \quad (4.21)$$

mit den Anfangsbedingungen $\lambda_i(0) = 1$ und $\dot{\lambda}_i(0) = 0$. Da es nicht vom Ort $r_i(0)$ abhängt, ist der Ansatz (4.19) der Dichteskalierung selbstkonsistent. Damit behält das Kondensat tatsächlich seine Parabelform, expandiert aber anisotrop, wenn zuvor mindestens zwei der Oszillationsfrequenzen verschieden waren. Das gleiche Ergebnis liefern quantenmechanische Rechnungen [99, 100, 101, 102]. Damit unterscheidet sich das Kondensat auch im

TF-Regime von einem thermischen Bose-Gas durch seine anisotrope Expansion, solange die Wechselwirkungsenergie des letzteren gegenüber seiner thermischen Energie vernachlässigbar ist (siehe auch Anhang A). Diese Voraussetzung ist bei $T > T_c$ gut erfüllt.

In den Experimenten, die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführt wurden, kommt ein axialsymmetrisches äußeres Potential mit $\omega_x = \omega_y = \omega_\perp$ und $\epsilon = \omega_z/\omega_\perp \approx 0,1$ zum Einsatz. Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die Skalenparameter nach ϵ entwickeln, und das Differentialgleichungssystem (4.21) läßt sich näherungsweise analytisch lösen [99]. In niedrigster Ordnung erhält man

$$\lambda_\perp(t) = \sqrt{1 + \omega_\perp^2 t^2} \quad (4.22)$$

und $\lambda_z(t) = 1$. Um eine Zeitabhängigkeit von λ_z zu erhalten, muß die zweite Ordnung in ϵ berücksichtigt werden, was auf

$$\lambda_z(t) = 1 + \epsilon^2 \left(\omega_\perp t \arctan(\omega_\perp t) - \ln \sqrt{1 + \omega_\perp^2 t^2} \right) \quad (4.23)$$

führt. Nach einer Zeit $t \approx \epsilon/\omega_\perp$ wird das ursprünglich zigarrenförmige Kondensat vorübergehend eine sphärische Form annehmen und im weiteren Verlauf der Expansion zunehmend zu einer Scheibe werden.

Um die Anisotropie der Expansion mit den Vorhersagen zu vergleichen, bietet es sich an, das Achsenverhältnis

$$\frac{W_z(t)}{W_\perp(t)} = \frac{\lambda_z(t)}{\lambda_\perp(t)} \frac{1}{\epsilon} \quad (4.24)$$

des Kondensats über die Expansionszeit aufzuzeichnen. Anders als bei der Untersuchung der Breiten $W(t)$, die von der Anzahl kondensierter Teilchen abhängen, ist man in diesem Fall allein auf die Kenntnis der Oszillationsfrequenzen angewiesen. Die Vorhersage (4.24) ist in sehr guter quantitativer Übereinstimmung mit unseren experimentellen Ergebnissen [103, 104].