

6.5 Ideale Bose-Gase

Für die Diskussion ideale Bose-Gase kehren wir nochmals zur diskreten Darstellung z.B. für die Teilchenzahl in (6.46) zurück:

$$\langle \hat{N} \rangle = \sum_{\vec{m}} \frac{1}{e^{\beta(E_{\vec{m}} - \mu)} - 1} \quad (6.81)$$

Die zulässigen Energien $E_{\vec{m}}$ hängen im allgemeinen von den Randbedingungen ab. Für das bisher als Beispiel verwendete Kastenpotential ist $E_{\vec{m}} > 0$ für endliche L , nähert sich aber für den Grundzustand der Null an im Limes $L \rightarrow \infty$. Für $\mu \rightarrow 0$ kann daher

$\frac{1}{e^{\beta E_{\vec{m}}} - 1}$ divergieren, so dass das Limes $L \rightarrow \infty$ sorgfältiger

behandelt werden muss. Im Allgemeinen können wir auch bei endlichen L das Auftreten von "Nullmoden" nicht ausschließen. Ein Beispiel dafür ist ein Kasten mit periodischen

Randbedingungen für die Wellenfunktion, für die das Energiespektrum nun

$$E_{\vec{m}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}, \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{m}, \quad \vec{m} \in \mathbb{Z}^3 \quad (6.82)$$

lautet und explizit eine Nullmode für $\vec{m} = \vec{0}$ mit einschließt. Wir lassen also das Auftreten einer

Nullmode in (6.81) zu, behandeln diese explizit und

summieren über das restliche Spektrum im Kontinuumslimes.

Unke Berücksichtigung weiterer Spinfreiheitsgrade $s = 0, 1, 2, \dots$ erhalten wir

$$\langle \hat{N} \rangle = (2s+1) \cdot \left[\frac{1}{z^{-1}-1} + \frac{\sqrt{}}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{z^{-1} e^{\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m}} - 1} \right], z = e^{\beta \mu} \quad (6.83)$$

Das Integral konvergiert am unteren Rand selbst für $z=1$,

$$\text{da} \quad e^{\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m}} - 1 \Big|_{k \rightarrow 0} = \frac{2m}{\beta \hbar^2} \quad (6.84)$$

einen endlichen konstanten Wert annimmt. Dies zeigt, dass der naive Kontinuumsstimes nicht sensitiv auf mögliche Nullmoden ist. Falls Nullmoden vorhanden sind, würden sie im naiven Kontinuumsstimes verloren gehen. Dasselbe gilt für Systeme ohne Nullmoden für die Physik bei den Werten des chemischen Potentials bei dem $E_{\text{Grundzustand}} - \mu \rightarrow 0$ geht. Durch entsprechende Verschiebung der Definition des Energienullpunkts lässt sich dieser Bereich immer auf Nullmoden abbilden.

Gleichung (6.83) beschreibt also den allgemeinen Fall.

Ähnlich wie im fermionischen Fall enthält (6.83) ein spezielles Integral einer allgemeinen Klasse der Bose

Integrale:

$$g_\lambda(z) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1} dx}{z^{-1} e^x - 1} \quad (6.85)$$

Mit der Substitution $x = \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ lässt sich (6.83) auch umschreiben in die mittlere bosonische

Teilchendichte

$$n = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{(2s+1)}{V} \frac{z}{1-z} + (2s+1) \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3}, \quad (6.86)$$

wobei wir wiederum die thermische Wellenlänge λ_T eingeführt haben. Das erste Term beschreibt den Dichtebeitrag der sich im Grundzustand befindlichen Teilchen, der zweite Term alle Teilchen, die sich in angeregten Zuständen befinden. Analog zum fermionischen Fall können wir ebenso die innere Energie und den Druck berechnen:

$$u = \frac{U}{V} = (2s+1) \frac{3}{2} \frac{k_B T}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) \quad (6.87)$$

$$p = (2s+1) \frac{k_B T}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z)$$

Wegen $U = \sum_{\vec{n}} \varepsilon_{\vec{n}} \langle n_{\vec{n}} \rangle$ ist elementar einsehlich, dass der Grundzustand mit $\varepsilon_x = 0$ nicht zur inneren Energie beiträgt. Wegen $p = \frac{2}{3} \frac{U}{V}$ gilt dies auch für den Druck.

Im großkanonischen Ensemble sind V, T und μ die natürlichen Variablen. Im Folgenden wollen wir jedoch (6.86) und (6.87) näher am Experiment auffassen: Leicht messbar sind das Volumen V und die Temperatur ebenso wie die mittlere Teilchendichte n . Somit können

Wir (6.86) als Bestimmungsgleichung für die Fugazität z bzw. das chemische Potential μ auffassen. Mit dem entsprechenden Ergebnis für z können wir dann aus (6.87) die Energiedichte u und den Druck p bestimmen.

Der Einfachheit halber beschränken wir uns im Folgenden auf skalare Bosonen mit $s=0$, $2s+1=1$. Zudem führen wir mit

$$v = \frac{1}{n} \quad (6.88)$$

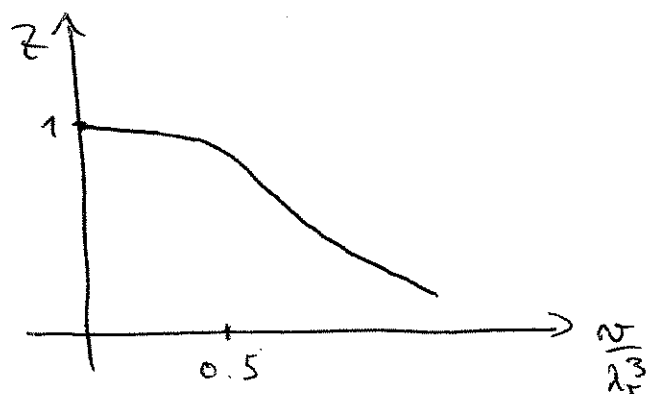
das im Mittel für ein Teilchen zur Verfügung stehende Volumen ein. Damit lässt sich (6.86) auch schreiben als

$$\frac{\lambda_T^3}{v} = \frac{\lambda_T^3}{V} \frac{z}{1-z} + g_{3/2}(z) \quad (6.89)$$

Für große Volumina $V \gg \lambda_T^3$ wird der Grundzustand nur dann wesentlich beitragen, wenn die Fugazität z nahe bei $z \approx 1$ liegt. Bei vorgegebener Temperatur T , d.h. $\beta > 0$ fest, ist dies nahe bei $\mu \approx 0$.

Bei vorgegebenem Volumen V und Temperatur T d.h. dass $V \gg \lambda_T^3$ kann man die Fugazität z aus (6.89) als Funktion vom mittleren Einteilchenvolumen v in Einheiten von λ_T^3 (zumindest numerisch) bestimmen.

Ein typischer Kurvenverlauf ist folgender:



Die Fugazität geht also gegen $z \rightarrow 1$, wenn das mittlere Volumen für ein Teilchen klein gegenüber dem "thermischen Volumen" λ_T^3 wird. Hier werden Effekte der Quantenstatistik wichtig.

Offensichtlich sind die Bose-Integrale bei $z=1$ von

Bedeutung:

$$g_\lambda(1) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1} dx}{e^x - 1} = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty x^{\lambda-1} \underbrace{\frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}}}_{= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}} dx$$

$$= \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\infty dx x^{\lambda-1} e^{-nx}$$

$$= \frac{1}{n^\lambda} \int_0^\infty dy y^{\lambda-1} e^{-y} \equiv \Gamma(\lambda)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\lambda} \equiv \zeta(\lambda). \quad (6.90)$$

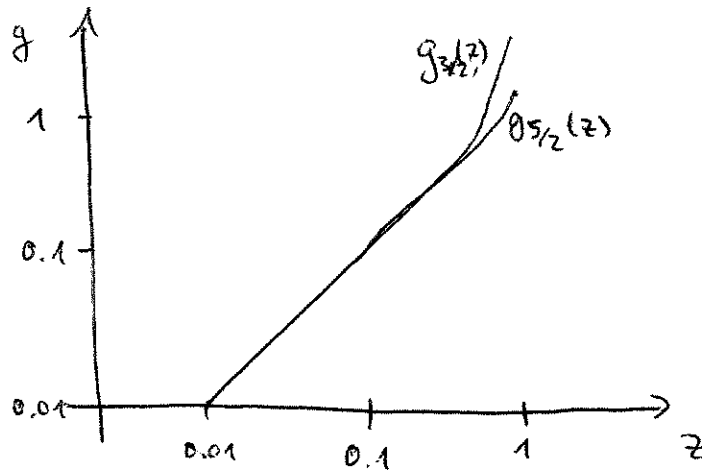
Bei $z=1$ sind die Bose-Integrale also identisch mit der Riemann-Zeta-Funktion, deren Werte bei ganzzahligen Argument gut bekannt und analytisch berechenbar sind,

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \zeta(6) = \frac{\pi^6}{945}, \dots \quad (6.91)$$

Werte für $\lambda > 1$ sind numerisch berechenbar, insbesondere

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2.6124, \quad \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \approx 1.3415, \quad \zeta(3) \approx 1.2021, \quad (6.92)$$

Skizze der Bose-Integrale für $z \leq 1$



Da $g_{3/2}(1) \approx 2.6124$ endlich ist, muss für große $V \rightarrow \lambda_T^3$ die Fugazität nahe bei $z=1$ liegen, sobald

$$n \leq n_c = \frac{\lambda_T^3}{g_{3/2}(1)} = \frac{\lambda_T^3}{\zeta(3/2)} \quad (6.93)$$

Im Limes $\frac{V}{\lambda_T^3} \rightarrow \infty$ ist für $n < n_c$ die Fugazität $z=1$ und somit $\mu=0$.

In diesem (idealisierten) Limes lassen sich innere Energiedichte und Druck folglich ausdrücken als

$$u = \frac{3}{2} \frac{k_B T}{n_c} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}, \quad p = \frac{k_B T}{n_c} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}. \quad (6.94)$$

Mit erneutem Blick auf (6.86)

$$n = \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} + \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3} \quad (6.95)$$

Wird im Regime $\mu=0$, $z \approx 1$ bei vorgegebenem Volumen V

die Aufteilung der Teilchendichte in den Grundzustandsanteil (1. Term) und den Anteil im Angeregte Zustände (2. Term) im Wesentlichen durch die Temperatur $T \sim \lambda_T^{-2}$ gesteuert. Wir definieren daher die Übergangstemperatur T_c bei beliebiger Teilchendichte durch die Bedingung

$$n = \frac{g_{3/2}(1)}{\lambda_T^3(T_c)} \quad (6.96)$$

Mit der Definition der thermischen Wellenlänge folgt daraus

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{n}{g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} \quad (6.97)$$

Damit lässt sich die Dichte schreiben als

$$n = \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3(T_c)} \quad (6.98)$$

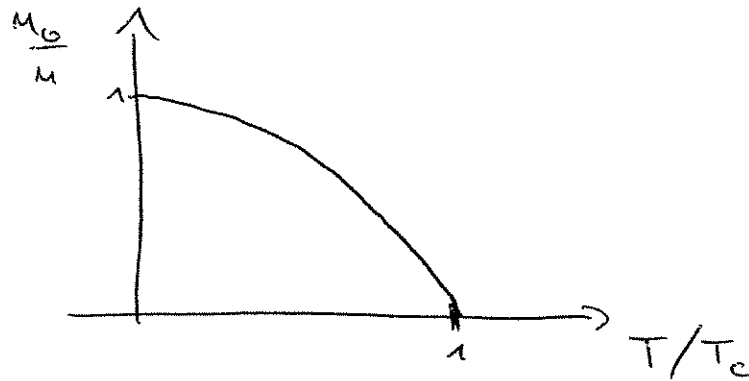
$$\stackrel{(6.96)}{=} \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} + n \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \quad (6.99)$$

Bei gegebener Temperatur T hängt der Anteil der Teilchen im Grundzustand im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$ von den Details ab, wie $z \rightarrow 1$ wenn $V \rightarrow \infty$. Wir bezeichnen den Anteil der Teilchen im Grundzustand in diesem Limes mit

$$n_0 := \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} \quad (6.100)$$

Der relative Anteil im Grundzustand bezogen auf die gesamte Teilchendichte ist fuglich

$$\lim_{z \rightarrow 1} \frac{n_0}{n} = \underline{\underline{1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}}}, \quad T < T_c \quad (6.101)$$



Dies verdeutlicht das Phanomen der Bose-Einstein-Kondensation: bei $T > T_c$ ist der Anteil der Teilchen im Grundzustand gleich null (fur endliche Volumina in realistischen Systemen beliebig klein). Bei $T \leq T_c$ beginnt die Zahl der Teilchen im Grundzustand zu wachsen. Bei $T \rightarrow 0$ halten sich schlielich alle Teilchen im Grundzustand auf.

Somit markiert T_c eine Phasenübergangstemperatur.

Fur $T < T_c$ koexistieren die gasformige und

die kondensierte Phase. Das besondere an der kondensierten Phase ist, dass alle Teilchen den gleichen Quantenzustand besetzen, d.h. die Gesamtheit aller Teilchen im Kondensat verhält sich wie ein Quantenzustand.

Dies wird auch an der Entropie deutlich, die wir Analog zum Fermi-Gas aus der Gibbs-Duhem-Beziehung (6.59) erhalten: ($N = \langle N \rangle$)

$$\begin{aligned}
 -pV &= U - TS - \mu N \\
 \Rightarrow S &= \frac{S}{V} V = \frac{1}{T} \left(\frac{U}{V} + p - \mu \frac{N}{V} \right) \\
 &= \frac{1}{T} (u + p - \mu n) \quad (6.102) \\
 &\quad \text{(Entropiedichte)}
 \end{aligned}$$

Mit $p = \frac{2}{3} u$ folgt

$$S = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{3} u - \mu n \right) \quad (6.103)$$

Beschränken wir uns auf die Entropie der Teilchen im Kondensat, so gilt für diese $u_{\text{cond}} = 0$ und $\mu = 0$ und somit $s_{\text{cond}} = 0$. Das Bose-Einstein Kondensat hat also keine Entropie. Dies ist im

Anbetracht der Boltzmann-Formel $S \sim \ln(\text{Zahl der zugänglichen Mikrozustände})$ nur folgerichtig, da alle Teilchen den Grundzustand besetzen und noch dazu ununterscheidbar sind. Im Limes $T \rightarrow 0$ folgt für die gesamte Entropie

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0. \text{ Dieses auch "3. Hauptsatz" der Thermo-}$$

dynamik genannte Nernst Theorem ist also kein Axiom sondern in der Quantenstatistik ableitbar. Im übrigen gilt das gleiche für Fermionen, da für $T \rightarrow 0$ der Zustand bei dem alle Teilchen die Zustände bis zur Fermi-Kante $\epsilon_F = \mu$ auffüllen, eindeutig ist.

Beim Bose-Einstein-Kondensat befindet sich für $T > 0$ also alle Entropie in der gasförmigen Phase. Die zugehörige Teilchendichte ist

$$n_{\text{gas}} = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3} \quad (6.104)$$

Genau an der Übergangstemperatur T_c ist $n = n_{\text{gas}}$, da $n_0 = 0$. Entsprechend erhalten wir mit n aus (6.87) für die Entropiedichte bei $T = T_c$

$$S \stackrel{(6.103)}{=} \frac{1}{V} \left(\frac{5}{2} \frac{z}{\lambda_T^3} \frac{k_B T}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) \right) \stackrel{(6.104)}{=} k_B \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} n = k_B \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} n \quad (6.105)$$

Beim Übergang von der kondensierten in die gasförmige Phase muss also pro Teilchen die Wärmemenge

$$\begin{aligned} \Delta q &= \frac{\Delta Q}{N} = T \left. \frac{\Delta Q}{T} \right|_{T_c} \frac{1}{N} = T \left. \frac{S}{V} \frac{V}{N} \right|_{T_c} = T_c S \cdot \frac{1}{N} \\ &\stackrel{(6.105)}{=} \frac{5}{2} \frac{5}{2} \frac{S(5/2)}{S(3/2)} k_B T_c. \end{aligned} \quad (6.106)$$

zugeführt werden. Diese mit Phasenübergängen verbundene Wärmemengen nennt man auch latente Wärme.

Bose-Einstein-Kondensate wurden von Einstein 1924 vorhergesagt. In dem folgenden Jahrzehnten wurde in verschiedenen Tieftemperatur-Experimenten versucht, Systeme zu finden, die sich auch bei kleinen Temperaturen wie ein ideales Bose-Gas verhalten. Insbesondere flüssiges Helium mit suprafluiden Eigenschaften war lange ein Kandidat, allerdings ist hier die Wechselwirkung zwischen den Atomen nicht vernachlässigbar.

Die erste beobachtbare Herstellung eines Bose-Einstein-Kondensats mit Hilfe von ultrakalten verdünnten Gasen aus Alkali-Atomen gelang 1995 W. Ketterle am MIT und E. Cornell und C. Wiemann am JILA (Nobelpreis 2001). Seitdem hat sich die Physik ultrakalter Gase zu einem hochaktiven Gebiet entwickelt.