

Abbildung 6.5: Mittlere Besetzungszahlen $\langle n(\epsilon) \rangle$ als Funktion der Energie $\epsilon - \mu$ für ideale Bosonen (Bose-Einstein-Statistik, obere Kurve) bzw. ideale Fermionen (Fermi-Dirac-Statistik, untere Kurve), bei konstanter Temperatur $T > 0$. Das chemische Potential μ hängt von Temperatur und Dichte ab; im Bose-Fall ist es immer kleiner als die Energie und würde im Grenzfall der Bose-Einstein-Kondensation verschwinden; im Fermi-Fall dagegen ist es positiv (bei $T = 0$ K entspricht es der Fermi-Energie). Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung, e^{-x} , liegt zwischen beiden und geht bei $\epsilon = \mu$ durch 1. (Quelle: Wikipedia)

Daraus folgt, dass die relativen Fluktuationen dort am größten sind, wo die Besetzungszahl niedrig ist. Darüber hinaus verdeutlicht der a -Term den Einfluss der Spin-Statistik: Die relativen Fluktuationen sind am geringsten für Fermionen und am größten für Bosonen:

$$u_{n_p}^{\text{FD}} < u_{n_p}^{\text{MB}} < u_{n_p}^{\text{BE}}.$$

Offensichtlich reduziert das Pauliprinzip die Fluktuationen, da es Anregungen aus Zuständen oberhalb der Fermikante nach unterhalb unterdrückt. Dagegen begünstigt die Bosestatistik Fluktuationen. Im Fall der Bosekondensation, vgl. Abschnitt 6.4.3, sind die relativen Fluktuationen allerdings vernachlässigbar im Kondensat (da $n_{p=0} \gg 1$), hingegen signifikant in angeregten Zuständen, außerhalb des Kondensates, s. dazu auch die Aufgaben, Abschn. 6.6.

Entropie von Quantengasen. Wir berechnen jetzt die Entropie des idealen Bose- und Fermigases unter Verwendung des allgemeinen Ausdruckes (6.39). Im Großkanonischen Ensemble folgt die Entropie durch Differentiation des Großkanonischen Potentials Ω . Interessanterweise stimmen die Ausdrücke für Ω für Fermionen, Glg. (6.13) und Bosonen, Glg. (6.38) bis auf zwei Vorzeichen überein, so dass wir sie in einer Formel zusammenfassen können (dabei gilt $a \neq 0$)

$$\Omega^a(T, V, \mu) = -a k_B T \sum_p \ln [1 + a e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}]. \quad (6.43)$$

Die Exponente können wir mit Hilfe von Glg. (6.42) durch die Bose- bzw. Fermiverteilung ausdrücken und erhalten

$$\Omega^a(T, V, \mu) = -a k_B T \sum_p \ln \left[1 + \frac{a n_p^a}{1 - a n_p^a} \right] = a k_B T \sum_p \ln (1 - a n_p^a).$$

Damit haben wir das Großkanonische Potential umgeschrieben und durch die Bose- bzw. Fermiverteilung ausgedrückt. Dies ist vorteilhaft für die Berechnung der Entropie, gemäß der allgemeinen Formel

$$\begin{aligned} \frac{S^a(T, V, \mu)}{k_B} &= - \left. \frac{\partial \Omega^a}{\partial k_B T} \right|_{V, \mu} = \\ &= -a \sum_p \ln(1 - a n_p^a) - a k_B T \sum_p \frac{\partial}{\partial k_B T} \ln(1 - a n_p^a). \end{aligned} \quad (6.44)$$

Wir formen nun die Summe im zweiten Term um, wobei wir ausnutzen $\partial_{k_B T} = -\beta^2 \partial_\beta$, sowie

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} n_p^a &= -n_p^{a2} (\epsilon_p - \mu) e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} = \\ &= -n_p^{a2} k_B T \ln \left[\frac{1 - a n_p^a}{n_p^a} \right] \cdot \frac{1 - a n_p^a}{n_p^a}, \end{aligned}$$

so dass wir schreiben können

$$\begin{aligned} \sum_p \frac{\partial}{\partial k_B T} \ln(1 - a n_p^a) &= -a \sum_p \frac{-\beta^2 \partial_\beta n_p^a}{1 - a n_p^a} = \\ &= -a \beta \sum_p n_p^a \ln \left[\frac{1 - a n_p^a}{n_p^a} \right]. \end{aligned}$$

Dies setzen wir nun in Glg. (6.44) ein und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{S^a(T, V, \mu)}{k_B} &= -a \sum_p \ln(1 - a n_p^a) + \sum_p n_p^a \ln \left[\frac{1 - a n_p^a}{n_p^a} \right] = \\ &= \sum_p \{ (n_p^a - a) \ln(1 - a n_p^a) - n_p^a \ln n_p^a \}. \end{aligned}$$

Nach Einsetzen von a erhalten wir das Endergebnis für die Entropie eines idealen Bose- bzw. Fermigas (oberes bzw. unteres Vorzeichen):

$$\frac{S^{B/F}(T, V, \mu)}{k_B} = \sum_p \{ \pm (1 \pm n_p) \ln(1 \pm n_p) - n_p \ln n_p \}. \quad (6.45)$$

Im Fall der Maxwell-Boltzmann-Statistik ($a \rightarrow 0$) bleibt nur der zweite Term übrig²⁶.

Aufgabe: Man untersuche dieses Ergebnis genauer, s. Aufgaben, Abschn. 6.6.

6.4.3 Das ideale Bosegas. Bose-Einstein-Kondensation

Wir kehren jetzt zu Bose-Partikeln zurück. Wir erwarten zwei Fälle: für $\chi \ll 1$ ist der Teilchenüberlapp vernachlässigbar, und das System verhält sich wie ein klassisches Gas mit Maxwell-Boltzmann-Statistik. Wir betrachten im Folgenden den umgekehrten Fall: $\chi \gtrsim 1$. Hier erwarten wir einen wichtigen Einfluss der Bosestatistik auf die Vielteilcheneigenschaften. Gleichzeitig spielen i.a. Wechselwirkungseffekte eine Rolle. Diese vernachlässigen wir in diesem Abschnitt. Zur weiteren Vereinfachung nehmen wir spinlose Teilchen an, d.h. $s = s_z = 0$. Die Quantenzahlen

²⁶Man prüfe diese Aussage, da wir in Glg. (6.43) $a \neq 0$ angenommen hatten.

der Teilchen im homogenen Fall sind dann nur die Impulse, $j \rightarrow \mathbf{p}$, mit den Einteilchen-Energie-Eigenwerten, $\epsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ mit²⁷ $0 \leq \epsilon_p < \infty$.

Grundzustand des idealen homogenen Bosegases. Bei $T \rightarrow 0$ ist die energetisch niedrigste Konfiguration der Teilchen gegeben durch die Besetzungszahlen

$$n_p \equiv n_{\mathbf{p}} = \begin{cases} N, & \mathbf{p} = 0, \\ 0, & \mathbf{p} \neq 0, \end{cases}$$

das heißt, alle Teilchen bevölkern den Grundzustand, $|\phi_{\mathbf{p}=0}\rangle$, der also makroskopisch besetzt ist. Dieser Zustand heißt *Bose-Einstein-Kondensat*. Entsprechend finden wir die Innere Energie des Bosekondensats:

$$U_0 = \sum_p \epsilon_p n_p = \sum_{\mathbf{p}=0} 0 \cdot N + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \epsilon_p \cdot 0 = 0.$$

Kohärenz-Eigenschaften. Da im BEC (fast) alle Teilchen dasselbe Orbital ϕ_0 besetzen, sind alle durch eine gemeinsame Wellefunktion beschrieben und zeigen Kohärenzeigenschaften. Ein experimenteller Nachweis besteht daher darin, das Kondensat in zwei Teile zu trennen und die anschließend zu überlagern. Im BEC sollte das zu einem periodischen Interferenzmuster führen. Tatsächlich sind diese direkten Nachweise erbracht worden.

Besetzungszahlen bei tiefen (endlichen) Temperaturen. Bei Übergang aus dem Grundzustand zu niedrigen Temperaturen können sich die Eigenschaften des Systems nur stetig ändern. Die meisten Teilchen werden im Grundzustand verbleiben, und die Grundzustandsenergie ist nach wie vor gleich 0. Das bedeutet für die Besetzung

$$n_0 \approx N = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \approx -\frac{1}{\beta\mu}. \quad (6.46)$$

Eine makroskopische Besetzung in Glg. (6.46) kann nur auftreten, wenn das chemische Potential folgende Bedingungen erfüllt:

1. $|\beta\mu| \ll 1$,
2. $\mu < 0$.

Unter diesen Bedingungen kann die Exponente in Glg. (6.46) entwickelt werden, was auf die letzte Gleichung führt. Im thermodynamischen Limes und $T \rightarrow 0$ geht das chemische Potential gegen $\beta\mu \rightarrow -\frac{1}{N} \rightarrow -0$.

Der Kondensatanteil (Condensate fraction). Bei endlichen Temperaturen sind nur $N_0 < N$ Teilchen im Kondensat, während der Rest,

$$N_x \equiv \sum_{\mathbf{p} \neq 0} n_{\mathbf{p}},$$

angeregte Zustände besetzt. Dies führt auf die Definition des Kondensatanteils,

$$\alpha_c(T, v) = \frac{N_0(T, v)}{N} = 1 - \frac{N_x(T, v)}{N}, \quad (6.47)$$

²⁷Die Grundzustandsenergie $\epsilon_0 = 0$ tritt nur für ein infinites System auf.

von dem wir erwarten, dass er mit steigender Temperatur monoton abnimmt. Wir berechnen jetzt, wie diese Temperaturabhängigkeit genau aussieht und wie das Kondensat verschwindet. Dazu berechnen wir die Zahl der angeregten Teilchen, wobei wir von einem isotropen System ausgehen,

$$N_x(T, v) = \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1}.$$

Wir gehen jetzt zum Impulsintegral über, wobei wir annehmen, dass wir den Minimalimpuls auf 0 setzen können, ohne einen großen Fehler zu machen²⁸. Außerdem setzen wir $\mu \approx 0$ und wechseln zu einer dimensionslosen Energievariable, $x \equiv \frac{\beta}{2m} p^2$, mit $p^2 dp = p_{\text{th}}^{3/2} \frac{1}{2\pi^{3/2}} x^{1/2} dx$,

$$\begin{aligned} N_x(T, v) &= \frac{V g_s}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^\infty dp p^2 \frac{1}{e^{\beta \frac{p^2}{2m}} - 1} = \\ &= \frac{V}{\Lambda_{\text{th}}^3} \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} = \frac{V}{\Lambda_{\text{th}}^3} \frac{2}{\pi^{1/2}} g_{3/2}, \end{aligned} \quad (6.48)$$

mit der thermischen DeBroglie-Wellenlänge $\Lambda_{\text{th}} = h/p_{\text{th}}$ und dem Spin-Entartungsfaktor $g_s = 2s + 1 = 1$. Außerdem haben wir eine Abkürzung eingeführt, die verschiedene Typen von Bose-Integralen²⁹ bezeichnet:

$$g_\nu = g_\nu(0) \equiv \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{e^x - 1} = \Gamma(\nu) \zeta(\nu), \quad (6.49)$$

$$g_\nu(\beta\mu) \equiv \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{e^{x-\beta\mu} - 1} = \int_0^\infty dx x^{\nu-1} n_p(T, \mu), \quad (6.50)$$

wobei ζ die Riemannsche Zeta-Funktion ist, die für $\nu > 1$ konvergiert und für die wir einige wichtige Fälle angeben, die z.B. bei der Berechnung der Teilchenzahl N_x bzw. der Energie auftreten, s. z.B. [Greiner et al., 1993],

$$z\Gamma(z) = \Gamma(z+1), \quad \zeta(\nu) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\nu},$$

$$\begin{aligned} \nu = 1: & \quad \Gamma(1) = 1, & \quad \zeta(1) \rightarrow \infty, \\ \nu = \frac{3}{2}: & \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\pi^{1/2}}{2}, & \quad \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2.612, & \quad g\left(\frac{3}{2}\right) = 1.306 \pi^{1/2}, \\ \nu = 2: & \quad \Gamma(2) = 1, & \quad \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \approx 1.645, & \quad g(2) = 1.645, \\ \nu = \frac{5}{2}: & \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\pi^{1/2}}{4}, & \quad \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \approx 1.341, & \quad g\left(\frac{5}{2}\right) = 1.006 \pi^{1/2}, \\ \nu = 3: & \quad \Gamma(3) = 2, & \quad \zeta(3) \approx 1.202, & \quad g(3) = 2.404, \\ \nu = \frac{7}{2}: & \quad \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{15\pi^{1/2}}{8}, & \quad \zeta\left(\frac{7}{2}\right) \approx 1.127, & \quad g\left(\frac{7}{2}\right) = 2.113 \pi^{1/2}, \\ \nu = 4: & \quad \Gamma(4) = 6, & \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90} \approx 1.082, & \quad g(4) = \frac{\pi^4}{15}, \end{aligned}$$

Damit erhalten wir für die Teilchenzahl außerhalb des Kondensates, Glg. (6.48), sowie für den

²⁸Die Zahl der Teilchen in der Nähe des Impulsursprunges ist proportional zu $p^2 dp$ und damit vernachlässigbar.
²⁹in Analogie zu den Fermi-Integralen I_ν

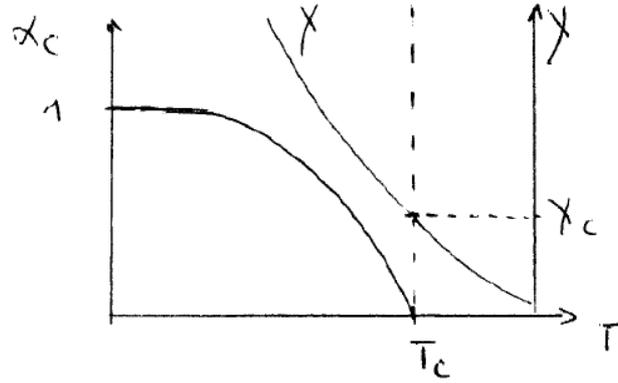


Abbildung 6.6: Kondensat-Anteil α_c des idealen Bosegases, sowie Entartungsparameter χ , als Funktion der Temperatur. Das Kondensat entsteht unterhalb der kritischen Temperatur T_c , wenn der Entartungsparameter den kritischen Wert χ_c erreicht.

Kondensatanteil, Glg. (6.47),

$$N_x(T, v) \approx \frac{V}{\Lambda_{\text{th}}^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right),$$

$$\alpha_c(T, v) \approx 1 - \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\chi} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, \quad \alpha_c \geq 0, \quad (6.51)$$

mit dem Entartungsfaktor $\chi = n\Lambda^3$, in den die Dichte aller Teilchen eingeht. Damit wird deutlich, dass der Kondensatanteil mit der Temperatur in der Potenz $3/2$ abnimmt, wobei wir aus Dimensionsgründen eine charakteristische Temperatur T_c eingeführt haben.

Kritische Temperatur, T_c , der Bose-Einstein-Kondensation. Aus Gleichung (6.51) folgt sofort, dass die Kondensation bei $T = T_c$ verschwindet. Die kritische Temperatur ergibt sich aus

$$0 = 1 - \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\chi(T_c)} \longrightarrow \chi(T_c) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612, \quad (6.52)$$

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{g_s^{3/2} m} \left(\frac{n}{2.612}\right)^{2/3}, \quad (6.53)$$

was einer charakteristischen minimalen Stärke der quantenmechanischen Entartung (Wellenfunktions-Überlapp) entspricht. In Glg. (6.53) haben wir das Ergebnis für die kritische Temperatur angegeben, unterhalb derer Bose-Einstein-Kondensation auftritt. Wegen der Abhängigkeit $\chi \sim nT^{-3/2}$ ergibt sich eine charakteristische Dichteabhängigkeit von T_c . Gleichzeitig erkennt man, dass T_c umgekehrt proportional zur Masse der Teilchen ist. Der Effekt ist also am besten für Atome mit niedriger Kernladungszahl zu beobachten.

Interessanterweise verschwindet der Kondensatanteil bei T_c abrupt, wie bei einem Phasenübergang³⁰. Davon überzeugen wir uns durch Berechnung der Temperatur-Ableitung:

$$\frac{d}{dT}\alpha_c = -\frac{3}{2} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = \begin{cases} 0, & T \rightarrow 0, \\ -\frac{3}{2}, & T = T_c, \end{cases}$$

³⁰Der Kondensatanteil spielt die Rolle des Ordnungsparameters. Die Ordnung des Phasenübergangs ist an der spezifischen Wärme ablesbar, s.u.

die bei $T = 0$ verschwindet und bei der kritischen Temperatur einen endlichen Wert aufweist, vgl. Abb. 6.6.

Bemerkungen: Die durchgeführte Rechnung und damit die gefundenen Ergebnisse gelten nur unter einer Reihe von Annahmen:

- Es wurde ein makroskopisches Bosegas ($N \rightarrow \infty$) angenommen.
- Die Rechnung wurde für ein dreidimensionales Gas durchgeführt. In 2D und 1D ist, streng genommen, keine BEC möglich (homogener makroskopischer Fall), s. Aufgaben, Abschn. 6.6.
- Es wurde ein homogenes System vorausgesetzt. In einem externen Potential ergeben sich modifizierte Bedingungen für BEC. In einer Falle ist BEC auch in 1D und 2D möglich.
- Wir haben Wechselwirkungen zwischen den Teilchen vernachlässigt. Wechselwirkungen führen dazu, dass Teilchen aus dem Kondensat “herausgedrängt” werden und angeregte Zustände besetzen, also wächst N_x und α_c nimmt ab.

Historische Bemerkungen: Die Untersuchung makroskopischer Bose-Systeme begann bereits in den Anfangsjahren der Quantenmechanik und hat in den 1990er Jahren einen ersten Höhepunkt erreicht.

- a.) Die Vorhersage der “Kondensation” von Bosonen geht auf N. Bose (1924) zurück, der Photonen (Spin $s = 0$) betrachtete. A. Einstein verallgemeinerte die Vorhersage 1924 auf Bosonen mit beliebigem Spin.
- b.) Erste erfolgreiche Experimente mit Bosonen wurden mit ^4He durchgeführt. Wegen der starken Wechselwirkung ist dieses System bei tiefen Temperaturen allerdings flüssig und BEC nicht zu beobachten. Stattdessen entdeckte P.L. Kapitza 1937 den Effekt der *Suprafluidität*³¹ (reibunglose Strömung).
- c.) Theoretische Erklärungen der Suprafluidität wurden von F. London (1937) und L.D. Landau (1941) gegeben, der ein Zwei-Flüssigkeits-Modell entwickelte³². Weitere Beiträge zur Theorie wechselwirkender Bosonen und Suprafluidität gehen insbesondere auf N.N. Bogolyubov, A. Abrikosov, V. Ginzburg und A. Leggett zurück³³.
- d.) Die experimentelle Entdeckung der BEC in einem Quantengas gelang 1995 für Alkaliatome (Rubidium, einige 10 000 Atome in einer Falle), nachdem Kühlmethoden der Atome zu niedrigen Temperaturen im Bereich von 100nK verfügbar geworden waren. Die ersten Experimente gelangen den Gruppen von³⁴ E. Cornell und C. Wiemann (JILA, Colorado), sowie W. Ketterle (MIT). Ein Ergebnis der Experimente ist in Abb. 6.7 gezeigt.
- e.) Heute werden in vielen Gruppen weltweit Experimente mit Bosegasen in Fallen durchgeführt, wobei eine Vielzahl von Atomen, aber auch Molekülen verwendet wird. Außerdem werden mit Hilfe optischer Laser Atome in einem Gitter angeordnet (optische Gitter), was Präzisionsmessungen der Eigenschaften von Kristallen mit variabler Wechselwirkung ermöglicht.

³¹Nobelpreis 1978

³²Nobelpreis 1962

³³Nobelpreis 2003 für die drei Letztgenannten

³⁴Nobelpreis 2001

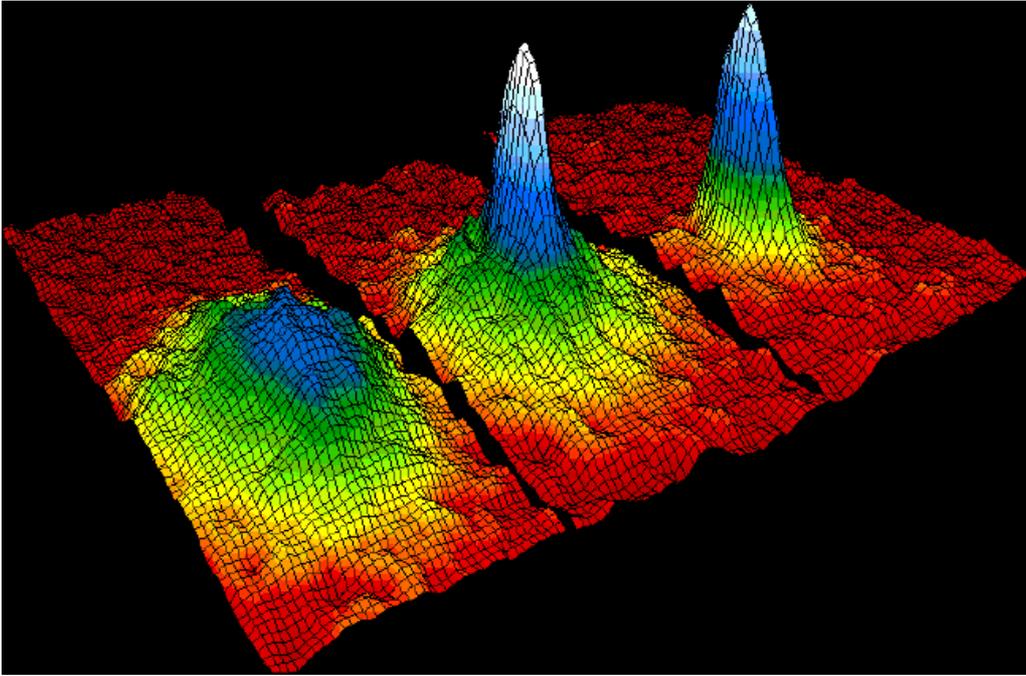


Abbildung 6.7: Entstehung eines Bose-Einstein-Kondensates aus Rubidium-Atomen bei Absenkung der Temperatur (bzw. Erhöhung der Dichte) von links nach rechts, das rechte Bild entspricht $\chi > \chi_c$, vgl. Abb. 6.6. Gezeigt ist die Impulsverteilung der Atome (nach Ausschalten der Falle). Resultat von Cornell und Wiemann (JILA) 1995. Das Kondensat wurde in einer anisotropen harmonischen Falle produziert, so dass wegen der Orts-Impuls-Unschärfe eine (anisotrope) ausgedehnte Verteilung entsteht.

6.4.4 Thermodynamische Eigenschaften des idealen Bosegases

Wir berechnen jetzt einige wichtige thermodynamische Größen (Besetzungszahlen, innere Energie, spezifische Wärme), wobei wir die Fälle unterhalb und oberhalb der kritischen Temperatur unterscheiden müssen.

1. **mittlere Besetzungszahlen**, $n_p(T, N)$: Dafür kennen wir das Ergebnis bereits:

a) $T \leq T_c$:

$$n_{\mathbf{p}=0}(T, N) = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \equiv n_0,$$

$$n_{\mathbf{p} \neq 0}(T, N) = \frac{1}{e^{\beta \frac{p^2}{2m}} - 1}.$$

- b) $T > T_c$: hier ist der Kondensatanteil $\alpha_c = 0$ und die Besetzung folgt für alle Impulse aus der Bose-Verteilung mit endlichem chemischem Potential:

$$n_{\mathbf{p}}(T, \mu) = \frac{1}{e^{\beta \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right)} - 1}.$$

2. **Erwartungswert der Energie (von Potenzen ϵ^m)**: mit den Resultaten für die Boseintegrale, Gln. (6.49) und (6.50) folgt für die zwei Fälle

a) $T \leq T_c$:

$$\langle \epsilon^m \rangle_{n_p} = \frac{V}{\Lambda_{\text{th}}^3} \frac{2}{\pi^{1/2}} (k_B T)^m \Gamma \left(\frac{3}{2} + m \right) \zeta \left(\frac{3}{2} + m \right) \sim T^{\frac{3}{2} + m},$$