

Abbildung 6.8: Interferenz von zwei expandierenden atomaren BEC, die in einer Falle mit zwei Minima erzeugt wurden, nachdem die Falle ausgeschaltet wurde. Das Interferenz-Signal wurde durch Streuung mit einem off-resonanten Laser produziert (die Periode beträgt 20 bzw. 15 μm), die Bilder links und rechts unterscheiden sich in der Laserleistung. Messung der Ketterle-Gruppe von 1997, Abb. aus Ref. [Andrews et al., 1997]

nen, die in Doppelschicht-Strukturen (e-h-bilayer) entstehen können. Alternativ können Elektronen und Löcher auch in einer einzelnen Schicht durch ein elektrisches Feld räumlich getrennt werden und BEC aufweisen, s.z.B. [Böning et al., 2011]. Diese indirekten Exzitonen weisen deutlich höhere Lebensdauern auf. Alternative Beispiele für bosonische Quasiteilchen, in denen BEC beobachtet wurde, sind Magnonen (Spinwellen), Polaritonen (Bindungszustand aus Exziton und Photon) oder Plasmonen (Plasmaschwingungen).

g.) Aufgrund ihrer verschwindenden Masse sollte BEC bei Photonen leicht zu realisieren sein, insbesondere für Strahlung im thermischen Gleichgewicht (z.B. Hohlraumstrahlung). Allerdings ist in diesen Systemen wegen des verschwindenden chemischen Potentials die Zahl der Photonen nicht erhalten (es kostet keine Energie, Photonen zu erzeugen). Bei niedrigen Temperaturen werden Photonen von den Wänden stark absorbiert. Die Situation ist eine andere in einer Mikrokavität (micro cavity): Die Spiegel dieses Systems fungieren wie ein Fallenpotential und "erzeugen" gleichzeitig eine effektive endliche Masse der Photonen, so dass sie sich wir massebehaftete Bosonen verhalten [Klaers et al., 2010].

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, Glgn. (6.49) und (6.50) folgt für die zwei Fälle
 - a) $T \leq T_c$:

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

b) $T > T_c$:

$$\langle \epsilon^m \rangle_{n_p} = \frac{V}{\Lambda_{\rm th}^3} \frac{2}{\pi^{1/2}} (k_B T)^m g_{\frac{3}{2}+m}(\beta \mu) \sim T^{\frac{3}{2}+m}$$

Die Fälle Teilchenzahl und innere Energie folgen daraus mit m = 0 bzw. m = 1. Daraus folgt die

- 3. Innere Energie pro Teilchen:
 - a) $T \leq T_c$:

$$\frac{U}{N} = \frac{\langle \epsilon \rangle}{N} = \frac{\langle \epsilon \rangle}{N_x} [1 - \alpha_c(T)] = \frac{3}{2} k_B T \frac{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} [1 - \alpha_c(T)] \sim T^{5/2}, \qquad (6.54)$$

wobei wir für die letzte Abschätzung Glg. (6.51) verwendet haben.

b) $T > T_c$:

$$\frac{U}{N} = \frac{\langle \epsilon \rangle}{N} = k_B T \frac{g_{\frac{5}{2}}(\beta \mu)}{g_{\frac{3}{2}}(\beta \mu)}.$$
(6.55)

- 4. **Spezifische Wärme:** diese berechnen wir durch Ableitung der inneren Energie pro Teilchen nach der Temperatur, bei konstantem Volumen:
 - a) $T \leq T_c$: Unter Verwendung von Glg. (6.54) folgt die spezifische Wärme (Wärmekapazität geteilt durch N)

$$c_V(T) = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} \Big|_{VN} = \frac{5}{2} \frac{1}{T} \frac{\langle \epsilon \rangle}{N} \sim T^{3/2} ,$$
$$\frac{c_V(T_c)}{k_B} = \frac{15}{4} \frac{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \approx 1.925 , \quad \text{am kritischen Punkt}$$



Abbildung 6.9: Spezifische Wärme bei fixiertem Volumen des idealen Bosegases. Am kritischen Punkt der Bosekondensation ist c_V stetig, aber die Temperatur-Ableitung von c_V (dritte Ableitung des chemischen Potentials) weist eine Diskontinuität auf. Nach der Ehrenfest-Klassifikation liegt ein Phasenübergang 3. Ordnung vor. In der Literatur wird dagegen mitunter von einem λ -Typ gesprochen, wegen der Form der c_V -Kurve.

b) $T > T_c$: Das Resultat folgt durch Ableiten von Formel (6.55). Die Rechnung ist hier etwas aufwändiger und führt auf das Ergebnis³⁷

$$\frac{c_V(T_c)}{k_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(\beta\mu)}{g_{3/2}(\beta\mu)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(\beta\mu)}{g_{1/2}(\beta\mu)}, \qquad (6.56)$$

damit ist die spezifische Wärme deutlich größer als bei einem klassischen einatomigen Gas $(3k_B/2, \text{Dulong-Petit-Gesetz})$. Bei $T \to 0$ geht auch c_v gegen 0, im Einklang mit dem 3. Hauptsatz. Für $T \geq T_c$ ergibt sich ein monotoner Abfall. Der klassische Limes ergibt sich aus Formel (6.56) mit $\beta \mu \to 0$ zu 15/4 - 9/4 und geht damit monoton (von oben) in das Dulong-Petit-Gesetz über. Das Verhalten im gesamten Temperaturbereich ist in Abb. 6.9 skizziert.

5. **Zustandsgleichung**: Wir gehen aus vom großkanonischen Potential $\Omega = -k_B T \ln Z_G$, das für das ideale Bosegas folgende Form hat, vgl. (6.37),

$$\Omega(T, V, z) = k_B T \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{0}} \ln \left[1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_p)} \right] + \Omega_0(T, z) ,$$
$$\Omega_0 = k_B T \ln \left(1 - z \right) ,$$

wobei wir die Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ eingeführt und Ω_0 , den Beitrag des Grundzustandes mit $\mathbf{p} = 0$, separiert haben. Durch Übergang zum Integral, wie vorher, erhalten wir mit $x = \beta \epsilon$ und partieller Integration,

$$\Omega(T, V, z) - \Omega_0 = k_B T \frac{V}{\Lambda_{\rm th}^3} \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty dx \, x^{1/2} \ln\left[1 - z \cdot e^{-x}\right] =$$
$$= k_B T \frac{V}{\Lambda_{\rm th}^3} \frac{4}{3\pi^{1/2}} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x - 1} =$$
$$= k_B T \frac{V}{\Lambda_{\rm th}^3} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) g_{5/2}(z) \; .$$

³⁷Details findet man z.B. in Ref. [Greiner et al., 1993].

Daraus folgt für den Druck,

$$p = \frac{\partial \Omega}{\partial V} \bigg|_{T} = \begin{cases} \frac{k_{B}T}{\Lambda_{\rm th}^{3}} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) g_{5/2}(z) , & T > T_{c} \\ \frac{k_{B}T}{\Lambda_{\rm th}^{3}} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) , & T < T_{c} . \end{cases}$$

Der Druck des idealen Bosegases skaliert mit der Temperatur wie $T^{5/2}$. Unterhalb der kritischen Temperatur ist der Druck offensichtlich unabhängig von der Dichte, da Teilchen im Kondensat nicht beitragen. Andererseits ist die Kondensation natürlich abhängig von der Gesamtteilchendichte, die ja in den kritischen Wert des Entartungsparameters χ eingeht, vgl. (6.52).

6.4.5 Das (ultra)relativistische ideale Bosegas

Wir betrachten jetzt relativistische nicht-wechselwirkende Bosonen mit der Energie-Dispersion

$$\begin{split} \epsilon^2(p) &= m^2 c^4 + c^2 p^2 \,, \\ \epsilon(p) &= c |p| \,, \qquad \text{ultrarelativistische Grenze} \,. \end{split}$$

Nachdem wir bereits klassische relativistische Systeme, vgl. Abschn. 5.7, sowie relativistische Fermisysteme untersucht haben, vgl. Abschn. 6.3.6, wenden wir uns jetzt dem Fall der Bose-Statistik zu und beschränken uns auf den ultrarelativistischen Grenzfall³⁸. Mit der modifzierten Dispersion, $\epsilon_p \approx cp$, lassen sich alle thermodynamischen Größen, beginnend mit dem großkanonischen Potential, wie bisher berechnen.

Großkanonisches Potential. Für Ω folgt aus der großkanonischen Zustandssumme in Besetzungszahl-Darstellung³⁹ mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$

$$\begin{split} \Omega(T,V,z) &= -k_B T \ln Z^G(T,V,z) = k_B T \sum_p \ln \left[1 - z e^{-\beta \epsilon_p}\right] = \\ &\to -k_B T \frac{V 4\pi}{h^3 c^3} \int_0^\infty d\epsilon \, \epsilon^2 \ln \left[1 - z e^{-\beta \epsilon}\right] \,. \end{split}$$

Mit der Abkürzung $x = \beta \epsilon$ und der relativistischen thermischen DeBroglie-Wellenlänge

$$\Lambda_R = \frac{h}{\sqrt{2\pi} \, k_B T/c} \,,$$

$$\sum_{p} \to \frac{V4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_{0}^{\infty} dp \, p^2 = \frac{V4\pi}{h^3 c^3} \int_{0}^{\infty} d\epsilon \, \epsilon^2 \equiv \int_{0}^{\infty} d\epsilon \, \mathcal{D}_{\mathrm{UR}}(\epsilon) \,, \quad \mathcal{D}_{\mathrm{UR}}(\epsilon) = \frac{4\pi V}{c^3 h^3} \, \epsilon^2 \,, \tag{6.57}$$

wobei wir die ultrarelativistische bosonische Zustandsdichte identifiziert haben, die der Grenzfall des vollen relativistischen Ausdruckes (6.35) ist.

 $^{^{38}}$ Dieser Fall tritt zum einen bei sehr hohen kinetischen Energien, zum anderen bei Teilchen der Ruhemasse 0 auf.

 $^{^{39}\}mathrm{Wie}$ üblich gehen wir von der Summe zum Integral über:

folgt nach partieller Integration

$$\Omega(T, V, z) = \frac{V}{\Lambda_R^3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} k_B T \int_0^\infty dx \, x^2 \ln\left[1 - ze^{-x}\right] =$$

$$= \frac{V}{\Lambda_R^3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} k_B T \left(-\frac{1}{3}\right) \int_0^\infty dx \, \frac{x^3 e^{-x}}{1 - ze^{-x}} =$$

$$= -\frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{V}{\Lambda_R^3} k_B T g_4 \,, \qquad (6.58)$$

wobei wir die Definition des Bose-Integrals (6.50) verwendet haben. Darüber hinaus haben wir berücksichtigt, dass $\mu \to 0$, da es im ultrarelativistischen Grenzfall (entspricht Masse gleich 0) keine Energie kostet, Teilchen-Antiteilchen Paare zu erzeugen (die Ruheenergie ist gleich 0). Aus diesem Resultat folgt sofort die

Zustandsgleichung:

$$p(T,V,z=1) = -\frac{\partial\Omega(T,V,z=1)}{\partial V}\Big|_{T,z} = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}\frac{k_BT}{\Lambda_R^3}} g_4 \propto T^4.$$
(6.59)

Der Druck eines ultrarelativistischen idealen Bosegases ist also unabhängig vom Volumen (von der Dichte⁴⁰) und wächst mit der Temperatur in der vierten Potenz.

Energie-Erwartungswerte, $\langle \epsilon^m \rangle$. Dieselben Umformungen wie für Ω führen auf das Ergebnis

$$\begin{split} \langle \epsilon^m \rangle(T,V,z=0) &= \sum_p \epsilon_p^m \frac{1}{e^{\beta \epsilon_p} - 1} = \\ &\to \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{V}{\Lambda_R^3} \, (k_B T)^m \int_0^\infty dx \frac{x^{m+2}}{e^x - 1} = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{V}{\Lambda_R^3} \, (k_B T)^m \, g_{m+3} \, . \end{split}$$

Daraus folgt insbesondere

• die Teilchenzahl (Potenz m = 0):

$$N(V,T) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{V}{\Lambda_R^3} g_3$$

die allerdings nur die angeregten Teilchen und nicht die im Kondensat (ihre Zahl divergiert wegen $\epsilon_0 = 0$) enthält.

• die innere Energie (m = 1):

$$U(V,T) = \langle \epsilon \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{V}{\Lambda_R^3} k_B T g_4 \propto T^4 , \qquad (6.60)$$

 $^{^{40}\}mathrm{ganz}$ and ers als bei Fermionen, wo $p \propto n^{5/3}$

• das Verhältnis Druck zu Energiedichte: mit Hilfe der Ergebnisse (6.59) und (6.60) folgt sofort

$$p = \frac{1}{3} \frac{U}{V}$$

so, wie für ein relativistisches ideales Fermigas. Im Gegensatz dazu hatten wir im nichtrelativistischen Fall (klassisches, Fermi- oder Bosegas) einen Faktor 2/3 erhalten.

- die Freie Energie: aus F = U TS = -pV folgt $F = -\frac{U}{3}$
- die Entropie: aus der Freien Energie erhalten wir

$$S = \frac{1}{T}(U - F) = \frac{4}{3}\frac{U}{T} \propto T^3,$$

• die Wärmekapazität:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}\Big|_V = 4\frac{U}{T} = 3S \propto T^3$$

Der Fall dimensionsreduzierter Bosegase ist Gegenstand einer Aufgabe, s. Abschn. 6.6.

Wechselwirkende Bosesysteme. Suprafluidität* 6.4.6

Mit diesem Thema hat sich meine Gruppe intensiv beschäftigt, s. z.B. die Referenzen [Böning et al., 2011, Filinov et al., 2009, Dornheim et al., 2015]. Zwei Beispiele von Quanten-Monte Carlo-Simulationen sind in den Abb. 6.10 und 6.11 gezeigt. Untersucht wurde ein repräsentatives Modellsystem, das für viele aktuelle Experimente mit bosonischen Molekülen oder indirekten Exzitonen von Bedeutung ist:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{p^2}{\epsilon_b |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}, \qquad (6.61)$$

d.h. N Bosonen befinden sich in einer Ebene (2D Dichte $n = a^2$) wechselwirken miteinander über Dipolwechselwirkung mit dem Dipolmoment p, wobei ϵ_b die Dielektrizitätskonstante des umgebenden Mediums ist (im Vakuum $\epsilon_b \rightarrow 1$), die die Wechselwirkung abschirmt. Die relevanten dimensionslosen Parameter sind [Filinov et al., 2010]

$$\begin{split} a &= \frac{1}{\sqrt{n}} \,, \\ E_0 &= \frac{\hbar^2}{ma^2} \propto n \,, \\ D &= \frac{p^2}{\epsilon_b a^3} \frac{1}{E_0} \propto \frac{1}{a} = n^{1/2} \,, \\ T &= \frac{k_B T}{E_0} \,. \end{split}$$

Hier ist E_0 ein Maß für die kinetische Energie eines Teilchens, während D der Dipol-Kopplungsparameter ist, der die Stärke der Wechselwirkung misst. D tritt an die Stelle der Parameter Γ bzw. $r_s = a/a_B$ für geladene Teilchen (Coulomb-Wechselwirkung) tritt. Interessant ist die Dichte-Skalierung: während r_s mit wachsender Dichte abnimmt (die Coulombwechselwirkung skaliert mit $\propto 1/a$, nimmt D mit der Dichte zu, wegen der kubischen Abstandsabhängigkeit.



Abbildung 6.10: Phasendiagramm eines makroskopischen zweidimensionalen Bosesystems mit repulsiver Dipolwechselwirkung der dimensionslosen Stärke D, s. Glg. (6.61). (b) Anteil der normalen Dichte, $n_n(D)$, als Funktion der Kopplung für eine konstante Temperatur $T_c/E_0 = 1$. Der Anteil der suprafluiden Dichte beträgt $n_s(D) = 1 - n_n(D)$. Die anderen Kurven entsprechen verschiedenen Typen von Quasiteilchen-Anregungen: Phononen (ph) und Rotonen (r). Resultat von Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulationen. Abbildung aus Ref. [Filinov et al., 2010].

Aus diesem Grund wird der am stärksten korrelierte Zustand – der Kristall – bei großen Kopplungsparametern erreicht, hier bei $D \approx 18$, vgl. Abb. 6.10.

Für D < 18 schmilzt der Dipol-Kristall und geht in eine Flüssigkeit mit kurzreichweitiger Ordnung über, deren Eigenschaften von der Temperatur abhängen: für $k_BT > 1.4E_0$ liegt eine normale Flüssigkeit vor. Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c , die von D abhängt, erfolgt ein Phasenübergang zu einer suprafluiden Phase (Gemisch aus normaler Flüssikeit dem Anteil n_n und Supraflüssigkeit mit $n_s = 1 - n_n$). Die Abhängigket $n_n(D)$ ist Abb. 6.10.b gezeigt. Man erkennt, dass der größte suprafluide Anteil bei $D \approx 1...2$ erreicht wird (dort ist auch T_c am höchsten). n_s nimmt sowohl mit fallendem D ab (schwächere Wechselwirkung) als auch wachsendem D, da dies gleichzeitig einen Trend zur Teilchenlokalisierung bewirkt. Im Kristall verschwindet der Teilchen-Überlapp und damit auch die Surprafluidität.

Man beachte, dass es bei dem vorliegenden 2D-System Besonderheiten beim Phasendiagramm gibt. So existiert in 2D keine strenge langreichweitige Ordnung im Kristall. Der Schmelzprozess und auch die Mechanismen beim Normal-Suprafluid-Phasenübergang weisen daher Besonderheiten auf, s.z.B. [Filinov et al., 2010]. Dies wurde insbesondere von Berezinski, Kosterlitz und Thouless untersucht⁴¹.

Der Mechanismus der Suprafluidität lässt sich am Einteilchen-Spektrum verstehen, das in Abb. 6.11 gezeigt ist. Die gepunktete Linie zeigt die gewöhnliche quadratische Dispersion freier Teilchen. Mit wachsendem D weicht die Dispersion des nichtidealen Bosegases (violette Punkte) immer stärker von der idealen Dispersion ab⁴². Während das Verhalten bei großen Impulsen sich dem des idealen Gases wieder annähert, gibt es drastische Unterschiede bei kleinen und

⁴¹Kosterlitz, Thouless und Haldane erhielten 2016 den Nobelpreis für die Untersuchung von topologischen Phasenübergängen.

⁴²Dieses Spektrum ergibt sich aus der näherungsweisen Diagonalisierung des Hamiltonians mit Wechselwirkung, Glg. (6.61). Die Ergebnisse hier wurden mit exakten Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulationen gewonnen.



Abbildung 6.11: Einteilchen-Dispersion des 2D-Dipolsystems (6.61) aus Abb. 6.10 für T = 0.5und vier Wechselwirkungs-Stärken. Anstelle der gewöhnlichen parabolischen Energie-Dispersion $\hbar\omega(q) = q^2/2$ stellt sich hier die gepunktete Kurve (pink) ein. Für kleine Impulse q dominieren Phononen (lineare Dispersion), bis sich ein Minimum einstellt, dass sog. Rotonen entspricht. Resultat von Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulationen aus Ref. [Filinov et al., 2010]. Die anderen Kurven stellen andere Modelle dar, die Näherungscharakter besitzen.

mittleren Impulsen. Für den Reibungsverlust ist vor allem der lineare Anstieg bei kleinen Impulsen verantwortlich, $\epsilon(p) \approx c_s p$, wobei c_s eine effektive Geschwindigkeit ist. Er bedeutet, dass Anregungen, z.B. durch thermische Fluktuationen, stark unterdrückt sind. Eine Flüssikeit, die mit einer Geschwindigkeit $u < c_s$ strömt, kann daher keine Energie an die Bosonen abgeben (das wäre gleichbedeutend mit Reibung, Viskosität) und fließt daher verlustfrei. Der Wert von c_s wächst mit D, somit wird der Effekt durch die Wechselwirkung verstärkt. Bemerkenswert ist auch das Minimum der Dispersion in der Gegend von $qa \sim 6$, das sich bei großen D einstellt. Es ist verknüpft mit sog. Rotonen. Das sind kollektive Anregungen von Teilchengruppen, die häufig Rotations-Charakter (Wirbel) besitzen.

Abschließend sei bemerkt, dass eine solche nicht-monotone Dispersion nicht nur in Bosegasen auftritt. Sie wurde auch in stark wechselwirkenden klassischen Systemen geladener Teilchen gefunden, s. z.B. Ref. [Golden and Kalman, 2000], sowie im Fermigas (Elektronengas bzw. -Flüssigkeit) bei starker Kopplung [Dornheim et al., 2022].