

6.3.3 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 der Teilchen im homogenen Fall sind dann nur die Impulse, $j \rightarrow \mathbf{p}$, mit den Einteilchen-Energieeigenwerten, $\epsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ mit³² $0 \leq \epsilon_p < \infty$.

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*³³. 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 Wellenfunktion beschrieben und zeigen Kohärenzeigenschaften. Ein experimenteller Nachweis besteht daher darin, das Kondensat in zwei Teile zu trennen und diese anschließend zu überlagern. Im BEC sollte das zu einem periodischen Interferenzmuster führen. Tatsächlich sind diese direkten Nachweise erbracht worden. Dafür wurde ein Kondensat z.B. in ein Fallenpotential mit zwei nahe beieinander liegenden Minima eingesperrt. Nachdem das Potential ausgeschaltet wurde, expandieren die beiden Kondensate und überlagern sich, s. z.B. Abb. 6.8.

Besetzungszahlen bei tiefen (endlichen) Temperaturen. Bei Übergang aus dem Grundzustand, $T = 0$, zu niedrigen endlichen Temperaturen können sich die Eigenschaften des Systems nur stetig ändern. Die meisten Teilchen werden im Zustand mit $\epsilon_0 = 0$ 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

³²Die Grundzustandsenergie $\epsilon_0 = 0$ tritt nur für ein infinites System auf.

³³Der Terminus suggeriert Analogien mit der Kondensation von Gasen in die flüssige Phase, was allerdings nicht zutrifft.

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*,

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

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 machen³⁴. 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-Integralen³⁵ 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.

Bose-Integrale, ζ -Funktion und Polylogarithmus. Im Folgenden geben wir einige Relationen und wichtige Fälle für diese Größen an, die z.B. bei der Berechnung der Teilchenzahl N_x

³⁴Die Zahl der Teilchen in der Nähe des Impulsursprunges ist proportional zu $p^2 dp$ und damit vernachlässigbar.

³⁵in Analogie zu den Fermi-Integralen I_ν . Man beachte, dass auch hier unterschiedliche Definitionen verwendet werden: insbesondere wird mitunter ein Faktor $1/\Gamma(\nu)$ vor das Integral geschrieben.

bzw. der Energie relevant sind, s. z.B. [Greiner et al., 1993],

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

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

Polylogarithmus folgt

Damit erhalten wir für die Teilchenzahl außerhalb des Kondensates, Glg. (6.48), sowie für den Kondensatanteil, Glg. (6.47),

$$\begin{aligned} N_x(T, v) &\approx \frac{V}{\Lambda_{\text{th}}^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \\ \alpha_c(T, v) &\approx 1 - \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\chi} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, \quad \alpha_c \geq 0, \end{aligned} \quad (6.51)$$

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 Phasenüber-

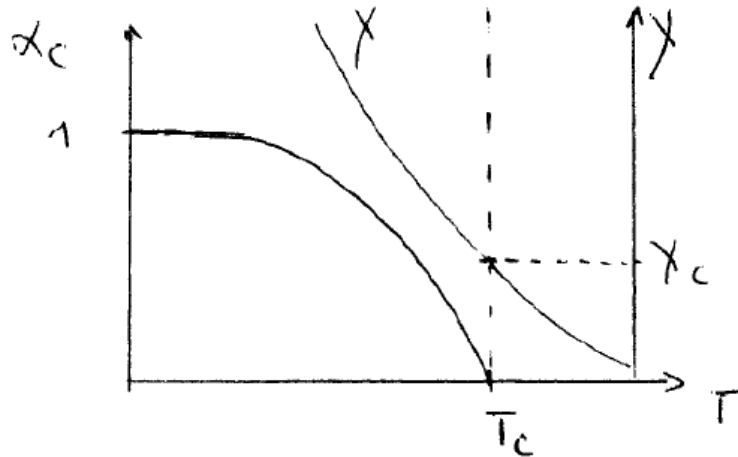


Abbildung 6.6: Kondensat-Anteil α_c des idealen Bosegases, sowie Entartungsparameter χ , als Funktion der Temperatur. Das Kondensat entsteht unterhalb der kritischen Temperatur T_c , wenn der Entartungsparameter den kritischen Wert χ_c erreicht.

gang³⁶. Davon überzeugen wir uns durch Berechnung der Temperatur-Ableitung:

$$\frac{d}{dT}\alpha_c = -\frac{3T^{1/2}}{2T_c^{3/2}} = \begin{cases} 0, & T \rightarrow 0, \\ -\frac{3}{2}\frac{1}{T_c}, & T = T_c, \end{cases}$$

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. 6.5.
- 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.

³⁶Der Kondensatanteil spielt die Rolle des Ordnungsparameters. Die Ordnung des Phasenübergangs ist an der spezifischen Wärme ablesbar, s.u.

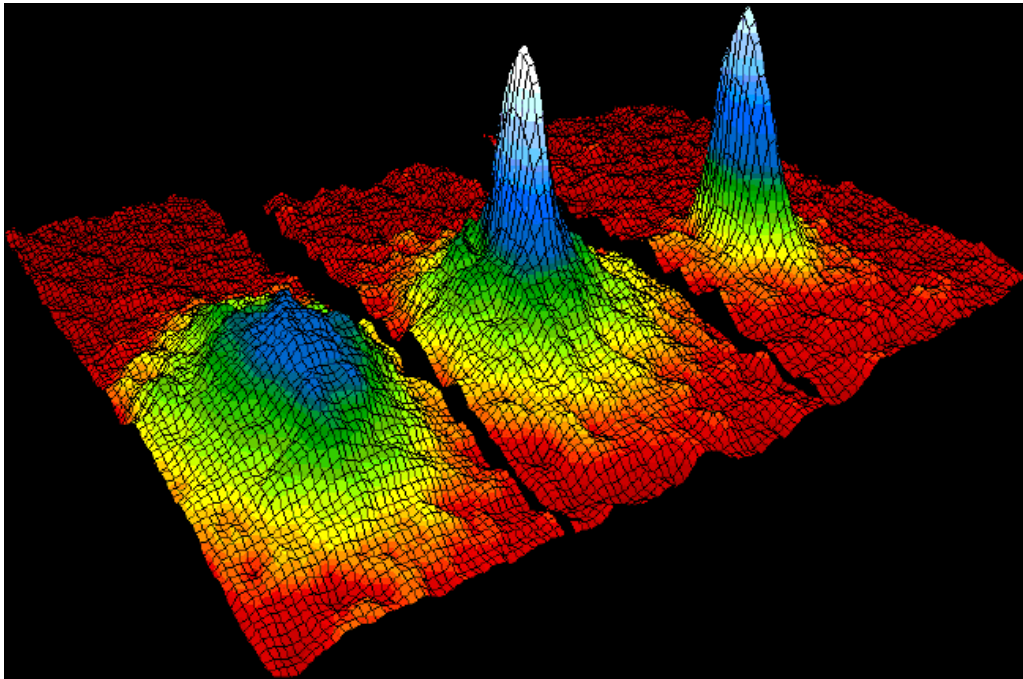


Abbildung 6.7: Entstehung eines Bose-Einstein-Kondensates aus Rubidium-Atomen bei Absenkung der Temperatur (bzw. Erhöhung der Dichte) von links nach rechts, das rechte Bild entspricht $\chi > \chi_c$, vgl. Abb. 6.6. Gezeigt ist die Impulsverteilung der Atome (nach Ausschalten der Falle). Resultat von 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.

- 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*³⁷ (reibunglose Strömung).
- c.) Theoretische Erklärungen der Suprafluidität wurden von F. London (1937) und L.D. Landau (1941) gegeben, der ein Zwei-Flüssigkeits-Modell entwickelte³⁸. Weitere Beiträge zur Theorie wechselwirkender Bosonen und Suprafluidität gehen insbesondere auf N.N. Bogolyubov, A. Abrikosov, V. Ginzburg und A. Leggett zurück³⁹.
- 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 von⁴⁰ 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. Die Theorie von BEC in Fallen wurde von Stringari, Pitaevskii und Mitarbeitern ausgearbeitet [Dalfovo et al., 1999].

³⁷Nobelpreis 1978

³⁸Nobelpreis 1962

³⁹Nobelpreis 2003 für die drei Letztgenannten

⁴⁰Nobelpreis 2001

- f.) Neben atomaren und molekularen Bose-Kondensaten in der Gasphase existiert BEC auch in Festkörpern. Kandidaten hierfür sind bosonische Anregungen von Elektronen. Ein Beispiel sind gebundene Elektronen-Loch-Paare – Exzitonen – die sich in erster Näherung wie Bosonen verhalten, s. z.B. Ref. [Butov et al., 2002]. Das Problem dabei ist, dass Exzitonen in Halbleitern üblicherweise instabil gegen strahlenden Zerfall sind - sie rekombinieren durch Emission eines Photons⁴¹. Eine interessante Alternative sind sog. indirekte Exzitonen, 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 wie massebehaftete Bosonen verhalten [Klaers et al., 2010].

6.3.4 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) $T \leq T_c$:

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

⁴¹Dies trifft zu für direkte Halbleiter. Bei indirekten Halbleitern ist die Lebensdauer durch andere Rekombinationsprozesse limitiert.

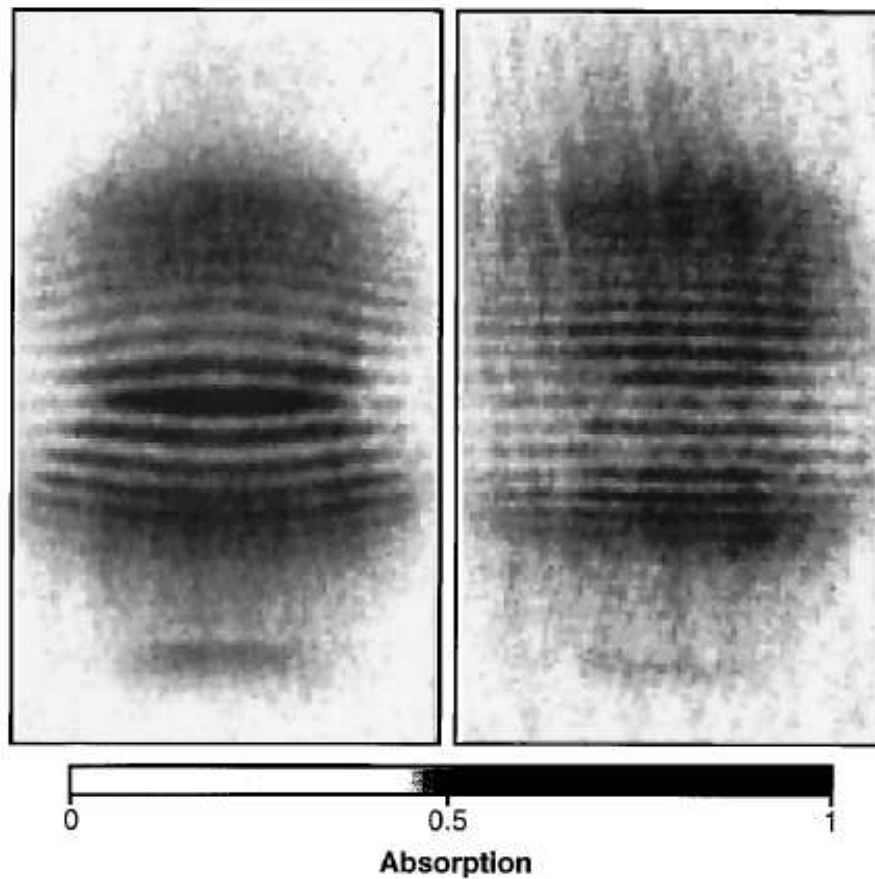


Abbildung 6.8: Interferenz von zwei expandierenden atomaren BEC, die in einer Falle mit zwei Minima erzeugt wurden, nachdem die Falle ausgeschaltet wurde. Das Interferenz-Signal wurde durch Streuung mit einem off-resonanten Laser produziert (die Periode beträgt 20 bzw. 15 μm), die Bilder links und rechts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

b) $T > T_c$:

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

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

3. Innere Energie pro Teilchen:

a) $T \leq T_c$:

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

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

b) $T > T_c$:

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

4. Spezifische Wärme:

diese berechnen wir durch Ableitung der inneren Energie pro Teilchen nach der Temperatur, bei konstantem Volumen:

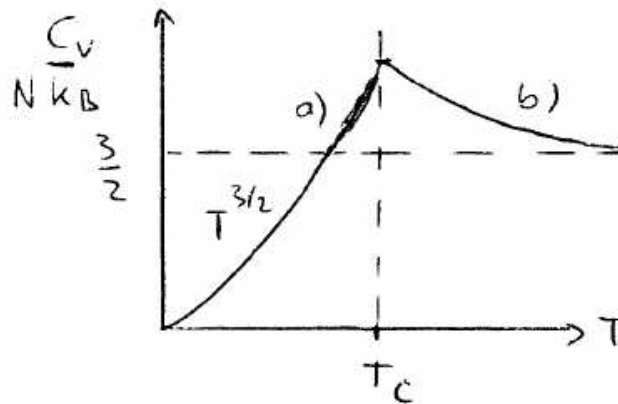


Abbildung 6.9: Spezifische Wärme bei fixiertem Volumen des idealen Bosegases. Am kritischen Punkt der Bosekondensation ist c_V stetig, aber die Temperatur-Ableitung von c_V (dritte Ableitung des chemischen Potentials) weist eine Diskontinuität auf. Nach der Ehrenfest-Klassifikation liegt ein Phasenübergang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

a) $T \leq T_c$: Unter Verwendung von Glg. (6.54) folgt die spezifische Wärme (Wärmekapazität geteilt durch N)

$$c_V(T) = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T} \Big|_{VN} = \frac{5}{2} \frac{1}{T} \frac{\langle \epsilon \rangle}{N} \sim T^{3/2},$$

$$\frac{c_V(T_c)}{k_B} = \frac{15}{4} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} \approx 1.925, \quad \text{am kritischen Punkt}$$

b) $T > T_c$: Das Resultat folgt durch Ableiten von Formel (6.55). Die Rechnung ist hier etwas aufwändiger und führt auf das Ergebnis⁴²

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

damit ist die spezifische Wärme deutlich größer als bei einem klassischen einatomigen Gas ($3k_B/2$, Dulong-Petit-Gesetz). Bei $T \rightarrow 0$ 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 $\beta\mu \rightarrow 0$ 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),

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

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,

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

Daraus folgt für den Druck,

$$p = \left. \frac{\partial \Omega}{\partial V} \right|_T = \begin{cases} \frac{k_B T}{\Lambda_{\text{th}}^3} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) g_{5/2}(z), & T > T_c \\ \frac{k_B T}{\Lambda_{\text{th}}^3} \zeta\left(\frac{5}{2}\right), & T < T_c. \end{cases}$$

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).

6.3.5 Das (ultra)relativistische ideale Bosegas

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

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

⁴²Details findet man z.B. in Ref. [Greiner et al., 1993].

Nachdem wir bereits klassische relativistische Systeme, vgl. Abschn. 5.6, sowie relativistische Fermisysteme untersucht haben, vgl. Abschn. 6.2.6, wenden wir uns jetzt dem Fall der Bose-Statistik zu und beschränken uns auf den ultrarelativistischen Grenzfall⁴³. Mit der modifizierten 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-Darstellung⁴⁴ mit der Fugazität $z = e^{\beta\mu}$

$$\begin{aligned}\Omega(T, V, z) &= -k_B T \ln Z^G(T, V, z) = k_B T \sum_p \ln [1 - ze^{-\beta\epsilon_p}] = \\ &\rightarrow -k_B T \frac{V4\pi}{h^3 c^3} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^2 \ln [1 - ze^{-\beta\epsilon}] .\end{aligned}$$

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

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

folgt nach partieller Integration

$$\begin{aligned}\Omega(T, V, z) &= \frac{V}{\Lambda_R^3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} k_B T \int_0^\infty dx x^2 \ln [1 - ze^{-x}] = \\ &= \frac{V}{\Lambda_R^3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} k_B T \left(-\frac{1}{3}\right) \int_0^\infty dx \frac{x^3 e^{-x}}{1 - ze^{-x}} = \\ &= -\frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{V}{\Lambda_R^3} k_B T g_4 ,\end{aligned}\tag{6.58}$$

wobei wir die Definition des Bose-Integrals (6.50) verwendet haben. Darüber hinaus haben wir berücksichtigt, dass $\mu \rightarrow 0$, 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:

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

Der Druck eines ultrarelativistischen idealen Bosegases ist also unabhängig vom Volumen (von der Dichte⁴⁵) und wächst mit der Temperatur in der vierten Potenz.

⁴³Dieser Fall tritt zum einen bei sehr hohen kinetischen Energien, zum anderen bei Teilchen der Ruhemasse 0 auf.

⁴⁴Wie üblich gehen wir von der Summe zum Integral über:

$$\sum_p \rightarrow \frac{V4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dp p^2 = \frac{V4\pi}{h^3 c^3} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^2 \equiv \int_0^\infty d\epsilon \mathcal{D}_{UR}(\epsilon) , \quad \mathcal{D}_{UR}(\epsilon) = \frac{4\pi V}{c^3 h^3} \epsilon^2 ,\tag{6.57}$$

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

⁴⁵ganz anders als bei Fermionen, wo $p \propto n^{5/3}$

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

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

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 ($m = 1$):

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

- 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 nicht-relativistischen 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

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

- die Wärmekapazität:

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

Der Fall dimensionsreduzierter Bosegase ist Gegenstand einer Aufgabe, s. Abschn. 6.5.

6.3.6 Wechselwirkende Bosesysteme. Suprafluidität*

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:

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

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]

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

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. 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 $k_B T > 1.4E_0$ 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 Flüssigkeit dem Anteil n_n und Supraflüssigkeit mit $n_s = 1 - n_n$). Die Abhängigkeit $n_n(D)$ ist Abb. 6.10.b gezeigt. Man erkennt, dass der größte suprafluide Anteil bei $D \approx 1 \dots 2$ 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 Suprafluidität.

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 untersucht⁴⁶.

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 Bosegas (violette Punkte)

⁴⁶Kosterlitz, Thouless und Haldane erhielten 2016 den Nobelpreis für die Untersuchung von topologischen Phasenübergängen.

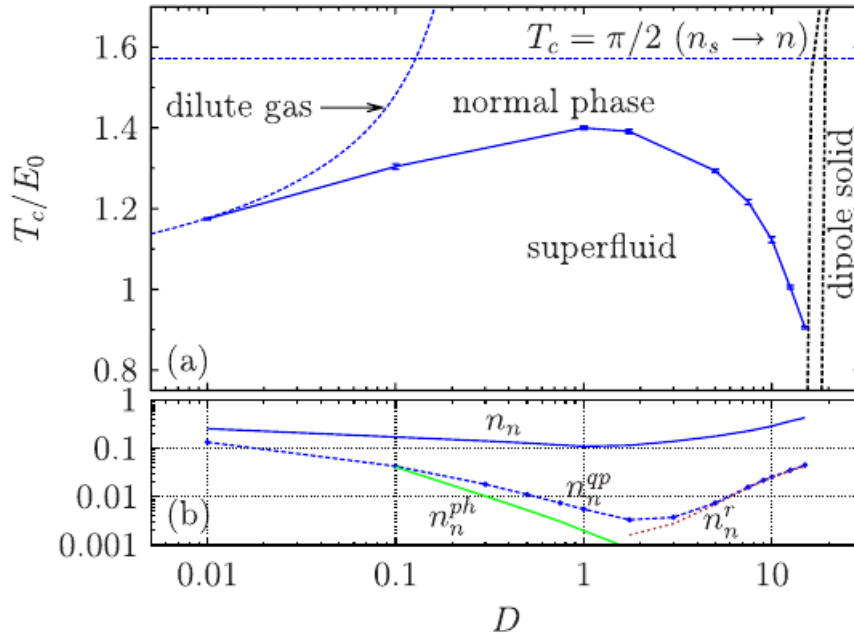


Abbildung 6.10: Phasendiagramm eines makroskopischen zweidimensionalen Bosesystems mit repulsiver Dipolwechselwirkung der dimensionslosen Stärke D , s. Glg. (6.61). (b) Anteil der normalen Dichte, $n_n(D)$, als Funktion der Kopplung für eine konstante Temperatur $T_c/E_0 = 1$. Der Anteil der suprafluiden 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].

immer stärker von der idealen Dispersion ab⁴⁷. Während das Verhalten bei großen Impulsen sich dem des idealen Gases wieder annähert, gibt es drastische Unterschiede bei kleinen und 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 Flüssigkeit, 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].

⁴⁷Dieses Spektrum ergibt sich aus der näherungsweise Diagonalisierung des Hamiltonians mit Wechselwirkung, Glg. (6.61). Die Ergebnisse hier wurden mit exakten Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulationen gewonnen.