II.7. (Wechselwirkungsfreie) Bosonen bei tiefen Temperaturen

Was erwarten wir?

tiefe Temperaturen → System will die Energie minimieren

→ Bosonen besetzen möglichst niedrige Energiezustände

Beachten: Für Bosonen gibt es kein Pauli Prinzip
→ Im Prinzip können alle Teilchen den Einteilchen Grundzustand besetzen

Wir erwarten:

Teilchenzahl

$$\langle \hat{n}_{\alpha_0} \rangle \sim N \qquad \text{für } T \to 0$$

Quantenzahl des tiefsten Niveaus

→ "makroskopische Besetzung des Grundzustandes"

Im Folgenden

Besetzung des Grundzustandes ist nicht trivial
Zwischen der Hochtemperaturphase (Teilchen gemäß der Bose-Statistik verteilt und der makroskop. Besetzung des Grundzustandes findet ein Phasenübergang statt
→ Bose-Einstein-Kondensation

Modellsystem

Teilchen im Kasten mit Volumen $V = L^3$, keine Wechselwirkungen und Spin $S=0$

Einteilchenergie

$$\varepsilon_\alpha \longrightarrow \varepsilon_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{mit} \quad \underline{k} = \frac{2\pi}{L}(m_x, m_y, m_z)$$

Bose-Einstein Statistik

$$\langle n_\alpha \rangle = \langle n_{\underline{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}$$

$\beta = \frac{1}{kT}$

μ - chem. Potential

$p = \hbar k$

Damit $\langle n_{\underline{k}} \rangle$ positiv und endlich ist muss gelten $e^{\beta\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)} > 1$ $\forall\ \underline{p}$, also insbesondere für $\underline{p} = 0$

$\Rightarrow \mu < 0$

bzw. $z = e^{\beta\mu} < 1$ $(z > 0)$

z Fugazität

Betrachten nun die mittlere Teilchendichte

$$\varrho = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \langle \hat{n}_k \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}$$

Idee

Für sehr große Systeme (also im thermodynam. Limes $N \to \infty$, $V \to \infty$ bzw $L \to \infty$ mit $N/V = \text{const.}$) wird der Abstand der Energieniveaus sehr klein

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \frac{2\pi}{L} \quad \text{klein}$$

$\longrightarrow$ Nähern Summe durch ein Integral

$$\sum_{\underline{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu)}-1} = \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu)}-1}$$

$$\longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\underline{k} \, \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu)}-1}$$

$$\rho = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{k} \, \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu)}-1} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk \, k^2 \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}}-\mu)}-1}$$

Wählen nun als neue Integrations variable $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$d\varepsilon = \frac{\hbar^2 k}{m} dk \qquad \Rightarrow \quad dk = \frac{m}{\hbar^2 k} d\varepsilon$$

$$k^2 dk = \frac{km}{\hbar^2} d\varepsilon = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar^3} m \, d\varepsilon$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \sqrt{2} \, \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon \, \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} \qquad (*)$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \beta^{-3/2} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{1/2}}{e^x e^{-\beta\mu}-1} \qquad \text{mit } x = \beta\varepsilon$$

definiere

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1}-1} \qquad z = e^{\beta\mu}$$

$\uparrow$ Gammafkt

speziell

$$g_{3/2}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{1/2}}{e^x z^{-1}-1} \qquad \text{mit } \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

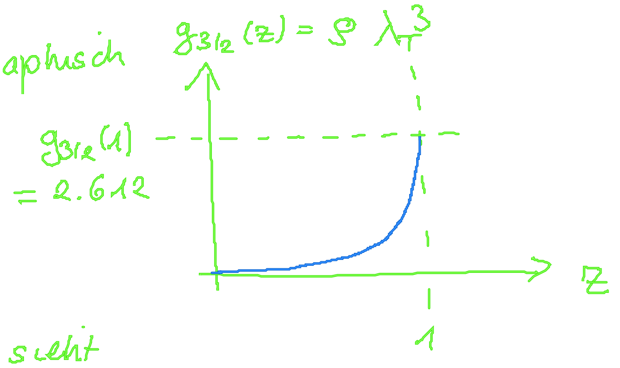
$$\boxed{\rho = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{1}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z) \quad (*)} \qquad \lambda_T = \left(\frac{\hbar^2 2\pi}{m k_B T}\right)^{1/2}$$

therm. Wellenlänge

Dichte als Fkt von μ und T

(beachte T steckt in λ_T und in z!)

graphisch



Man sieht

- Für $\rho\lambda_T^3 < 2.612$ ist $z < 1$: "Normales" Verhalten
  z wächst mit dem Druck
- Für $\rho\lambda_T^3 > 2.612$ kann man Gl. $\circledast$ nicht,
  nach mehr nach z auflösen

→ Definiere krit. Temperatur T_c unterhalb der Gl. $\circledast$ nicht mehr lösbar ist

$$\rho\lambda_T^3\Big|_{T_c} = g_{3/2}(1) = 2.612$$

$$\rho\left(\frac{\hbar^2 2\pi}{m k_B T_c}\right)^{3/2} = 2.612$$

$$\Rightarrow \boxed{T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m}\left(\frac{\rho}{2.612}\right)^{2/3}} \sim \rho^{2/3}$$

$T > T_c$ $\quad \rho\lambda_T^3 < 2.612$ $\quad z$ im erlaubten Bereich

$T < T_c$ $\quad \rho\lambda_T^3 > 2.612$

$T = T_c$ $\quad z = 1$

Wenn $z = 1$

$$\langle n_{\underline{k}=0}\rangle = \frac{1}{e^{\varepsilon_0} z^{-1} - 1} \approx \frac{1}{z^{-1} - 1} \underset{\text{für } z \to 1}{\longrightarrow} \infty$$

$\Rightarrow$ Unser Ergebnis $\rho \lambda_T^3 = g_{3/2}(z)$ kann für $T \leq T_c$ nicht mehr richtig sein

Fehler entsteht beim Übergang von der Summe zum Integral

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \langle n_{\underline{k}} \rangle \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\underline{k}\; n(\underline{k})$$

$$= \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty dk\; k^2 n(k)$$

Term $k=0$ trägt nicht bei, obwohl wir hier eine makroskop. Besetzung erwarten

Neuer Ansatz bei tiefen Temperaturen (ziehen $k=0$ Term aus dem Integral bzw. der Summe ziehen:

$$\rho = \frac{1}{V} \langle n_{\underline{k}=0} \rangle + \frac{1}{V} \sum_{k \neq 0} \langle n_k \rangle$$

Der zweite Term bleibt auch für $\mu \to 0$ endlich und kann daher wie vorher behandelt werden

$$\rho = \underbrace{\frac{1}{V} \frac{1}{z^{-1} - 1}} + \lambda_T^{-3} g_{3/2}(z)$$

$$= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Anteil der} \\ \text{Bosonen im Grundzustand}}}{\varrho_0(T,\mu)} + \underset{\uparrow}{\varrho_n(T,\mu)}$$

Anteil der Bosonen im angeregten Zustand

Schreiben ϱ_n mit Defn $T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m}\left(\frac{\varrho}{2.612}\right)^{2/3}$

um

$$\varrho_n(T,\mu) = \varrho\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\frac{g_{3/2}(z)}{2.612}$$

$$\lambda_T = \left(\frac{\hbar^2 2\pi}{m k_B T}\right)^{1/2} = \left(\frac{2.612}{\varrho}\right)\sqrt{\frac{T_c}{T}}$$

Diskussion

$T > T_c$ $\quad z < 1 \quad (\mu < 0)$

im thermodynam. Limes

$$\varrho_0(T,\mu) = \lim_{\substack{V\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{1}{V}\frac{1}{z^{-1}-1} = 0$$

$\rightarrow$ Einteilchen Grundzustand ist "leer" und $\varrho = \varrho_n(T,\mu)$ wie vorher

$T < T_c$ Lösen $\varrho = \varrho_0 + \varrho_n$ nach z ergibt sich (Beweis)

$$z = 1 - \frac{\overset{\text{klein, positiv}}{\tilde{a}(T)}}{V} \longrightarrow 1$$

im thermodynam. Limes

$$\Rightarrow g_{3/2}(z) \simeq g_{3/2}(1) = 2.612$$

$$\varrho = \varrho_0(T) + \varrho\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

$$\boxed{\frac{\varrho_0(T)}{\varrho} = 1 - (T/T_c)^{3/2}}$$

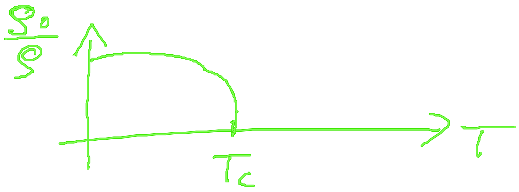
Anteil des "Kondensats", d.h. der Teilchen im Grundzustand

Zusammenfassend

$$\varrho(T,\mu) = \begin{cases} \varrho_n(T,\mu) = \lambda_T^{-3}\, g_{3/2}(z) & T > T_c \\ \varrho_0(T) + \varrho_n(T,\mu=0) & T < T_c \end{cases}$$

$$\frac{\varrho_0(T)}{\varrho} = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ 1 - (T/T_c)^{3/2} & T < T_c \end{cases} \qquad \text{Phasenübergang}$$

$\Rightarrow$ wir können $\varrho_0(T)/\varrho$ als Ordnungsparameter der Bose-Einstein-Kondensation auffassen



Bemerkungen

- BE-Kondensation findet im Impulsraum statt
  keine räumliche Phasentrennung (wie bei einem klassischen System)

also Kondensation $\Leftrightarrow$ Übergang der Bosonen in den niedrigsten Energiezustand

- BE-Kondensation setzt ein wenn $\varrho\,\lambda_T^3 = 2.612$

also $\underbrace{\rho^{-1/3}}_{\substack{\text{mittlere}\\ \text{Teilchenabstand}}} = \underbrace{\mathcal{O}(\lambda_T)}_{\substack{\text{Maß für Ausdehnung des}\\ \text{quantenmechan. Wellenpakets}}}$

- Die BE - Kondensation ist ein rein quantenmechan. Phänomen, folgt nur aus der Symmetrie der Vielteilchenwellenfkt
  $\Rightarrow$ Sie hat nichts mit echten Wechselwirkungen zu tun

- Erste theoret. Arbeiten zu BE - Kondensation

  Bose 1924 (Photonen)

  Einstein 1925

Ersten experimentelle Realisierung 1995 mit stark verdünnten Gasen aus Alkali - Atomen (Na, Rb)

$\longrightarrow$ Nobel - Preis Ketterle 2001