

2. Thermodynamik nicht wechselwirkender Bosonen

Wir betrachten ein Ensemble von Bosonen im thermodynamischen Gleichgewicht in der großkanonischen Gesamtheit. Obwohl diese für Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur der Bosekondensation an manchen Stellen fragwürdig wird, wollen wir sie hier verwenden, da wir eine einfache Behandlung im Rahmen der zweiten Quantisierung erlauben. Der statistische Operator in der großkanonischen Beschreibung lautet

$$(1) \quad \mathcal{G} = \frac{1}{Z} \exp \{ -\beta (\hat{H} - \mu \hat{N}) \}$$

Hierbei sind $\beta = 1/k_B T$, $\hat{H}$ der Hamiltonoperator, $\hat{N}$ der Teilchenzahloperator, μ ist das sog. chemische Potential. Z ist die Zustandssumme

$$(2) \quad Z = \text{Tr} \{ \exp (-\beta (\hat{H} - \mu \hat{N})) \}$$

Tr bedeutet Spurbildung über alle Zustände φ_n mit $n=0,1,2,\dots$ Teilchenzahlen. Im Falle eines idealen, d.h. nicht wechselwirkenden Bosegases gilt

$$(3) \quad \hat{H} = \int dx \, \hat{\psi}^\dagger(x) h_0 \hat{\psi}(x) = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu} = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \hat{n}_{\nu}$$

wobei die ϵ_{ν} die Einpartikelenenergien und $\hat{n}_{\nu} = \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}$

den Teilchenzahloperator des zugehörigen Energiezustandes bedeutet. Da ebenfalls gilt

$$(4) \quad \hat{N} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) = \sum_v \hat{n}_v$$

findet man für die Zustandssumme

$$Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_v (\epsilon_v - \mu) \hat{n}_v} \right\}$$

(5)

$$= \prod_v \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_v - \mu)n}$$

wobei das bekannte Eigenwertspektrum von $\hat{n}_v = \hat{b}_v^\dagger \hat{b}_v$ ($\hat{n}_v |n\rangle = n |n\rangle$ $n=0,1,2,\dots$) verwendet wurde.

Das liefert

(6)

$$Z = \prod_v \frac{1}{1 - z e^{-\beta \epsilon_v}}$$

mit $z = e^{\beta \mu}$ der sog. Fugazität. Die Zustandssumme liefert alle relevanten thermodynamischen Größen. z.B. hat man

$$\langle \hat{N} \rangle = \text{Tr} \left\{ \sum_v \hat{n}_v \right\} = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \sum_v \hat{n}_v e^{-\beta \sum_n (\epsilon_n - \mu) \hat{n}_n} \right\}$$

$$(7) \quad = \frac{1}{Z} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_n (\epsilon_n - \mu) \hat{n}_n} \right\}$$

$$= k_B T \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \mu} Z = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z = z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z$$

$$\begin{aligned}
 n' &= \int_{0+}^{\infty} dk f(k) \frac{1}{\frac{1}{\lambda} e^{\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m}} - 1} \\
 (13) \quad &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_{0+}^{\infty} dk f(k) z^n e^{-\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m} n}
 \end{aligned}$$

wobei $f(k) = \frac{2}{\pi}$ in 1D $f(k) = \frac{2\pi k}{(2\pi)^2}$ in 2D und $\frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3}$ in 3D ist

1-dimensionales, ideales, homogenes Bosegas

$$(14) \quad n'_{1D} = \frac{N'_{1D}}{L} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{1/2}} \frac{1}{\lambda} = g_{1/2}(z) \frac{1}{\lambda}$$

$$\text{mit } \lambda = \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2}{m k_B T}}$$

$g_{1/2}(z)$ divergiert für $z \rightarrow 1 \Rightarrow n'_{1D}$ nicht von oben beschränkt $\Rightarrow$

~~✓~~ Bosekondensation in 1-D in einem homogenen System

2-dimensionales, ideales, homogenes Bosegas

$$(15) \quad n'_{2D} = \frac{N'_{2D}}{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 = g_1(z) \left(\frac{1}{\lambda}\right)^2$$

und $g_1(z)$ divergiert für $z \rightarrow 1$

~~✓~~ Bosekondensation in 2-D in homogenem System

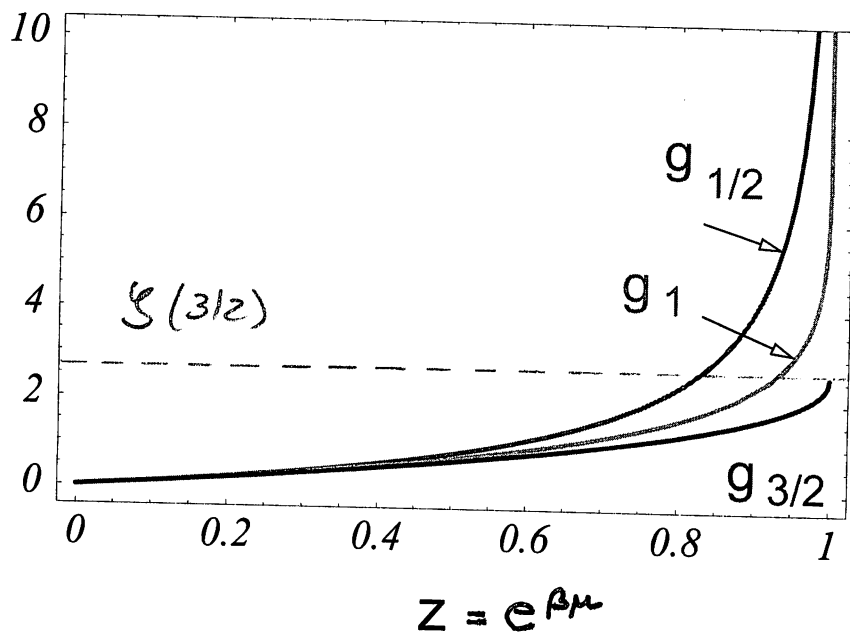
3-dimensionales, ideales, homogenes Bosegas

$$(16) \quad n'_{30} = \frac{N'_{30}}{V} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \left(\frac{1}{\lambda} \right)^3 = g_{3/2}(z) \left(\frac{1}{\lambda} \right)^3$$

$$g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) \approx 2.61238$$

ζ -Riemann Zeta

$$(17) \Rightarrow n'_{30}{}^{\max} = \zeta(3/2) \left(\frac{1}{\lambda} \right)^3 \quad \text{Bosekondensation für } n_{30} > n'_{30}{}^{\max} !$$



Der relative Anteil der Teilchen im Grundzustand kann wie folgt abgeleitet werden

$$\frac{N_0}{N} \approx \frac{N - N'_{30}}{N} \approx 1 - \zeta(3/2) \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{N}$$

$$(18) \quad \boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}} \quad \text{für } T \leq T_c$$

mit der kritischen Temperatur

$$(19) \quad \boxed{T_c = \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B [\zeta(3/2)]^{2/3}} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}}$$

Bosekondensation tritt entweder für $N > N_{30}^{\max}$ oder $T < T_c$ auf, was mit Hilfe der Phasenraumdichte durch

$$(20) \quad \boxed{n \lambda^3 \geq n \lambda^3(T_c) = \zeta(3/2) = 2.61238}$$

ausgedrückt werden kann.

Bem. Die Nichtexistenz langreichweitiger Ordnung (Bose-kondensation u.ä.) in 1-D und 2-D homogenen Systemen ist von Hohenberg Phys. Rev. 158 383 (1967) und Mermin und Wagner Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966) allgemein bewiesen worden.

Für das chemische Potential findet man aus (8) mit $\nu=0$

$$(21) \quad z = e^{\beta\mu} = \frac{1}{1 + \frac{1}{N_0}} \quad \text{oder} \quad \boxed{\mu = -k_B T \ln \left(1 + \frac{1}{N_0}\right)}$$

$$\text{im TD Limes } N_0 \rightarrow \infty \quad \begin{matrix} \mu \rightarrow 0 \\ z \rightarrow 1 \end{matrix}$$

(B) Bosekondensation in harmonischen Fallen

In einem äußeren harmonischen Potential

$$(22) \quad U = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$$

welches wir zur Vereinfachung als isotrop betrachten wollen,
d.h. $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ sind die Energiezustände durch

$$(23) \quad E_{\vec{l}} = l \hbar \omega \quad l = \begin{cases} l_x & 1D \\ l_x + l_y & 2D \\ l_x + l_y + l_z & 3D \end{cases}$$

gegeben. Damit findet man für die Berechnung der
angeregten Zustände $\vec{l} \neq 0$ $\vec{l} = \{l_x\} \dots \{l_x, l_y, l_z\}$

$$N' = \sum_{\vec{l} \neq 0} \frac{1}{\frac{1}{z} e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

(24)

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\vec{l} \neq 0} z^k e^{-\beta k \hbar \omega}$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} z^k \left[\left(\frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega k}} \right)^d - 1 \right]$$

$d = \text{Dimension}$

Nun gilt für große x

$$(25) \quad \left(\frac{1}{1-e^{-x}} \right)^d - 1 \leq \begin{cases} \frac{1}{x} & d=1 \\ \frac{1}{x^2} & d=2 \\ \frac{1}{x^3} & d=3 \end{cases}$$

Der Fall $d=1$ muß gesondert behandelt werden:

$$(26) \quad d=2 \quad \boxed{N'_{2d} \leq \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^2} \left(\frac{1}{\beta \hbar \omega} \right)^2 = g_2(z) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^2}$$

$$(27) \quad d=3 \quad \boxed{N'_{3d} \leq \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^3} \left(\frac{1}{\beta \hbar \omega} \right)^3 = g_3(z) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3}$$

mit $g_2(z) \leq g(2) = 1.64493$

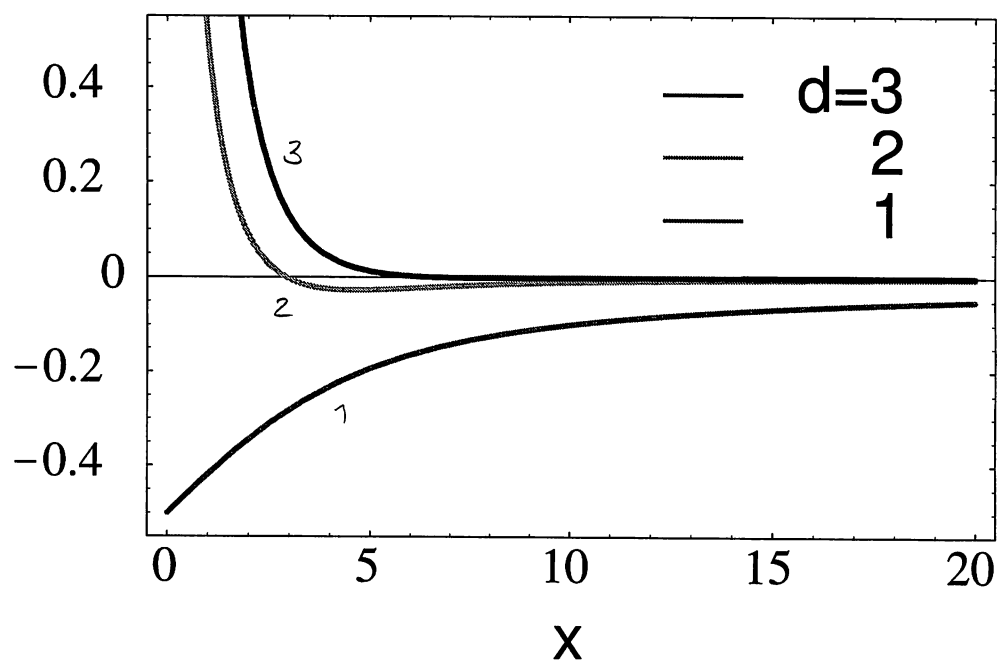
$g_3(z) \leq g(3) = 1.20206$

folgt, daß Bosekondensation in 3-D und 2-D existiert.

man findet analog zu den Rechnungen im homogenen Fall

$$(28) \quad \boxed{\left(\frac{N_0}{N} \right)_{2d} = 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(2d)}} \right)^2} \quad \boxed{T_c^{(2d)} = \frac{\hbar \omega}{k_B g(2)^{1/2}} N^{1/2}}$$

$$\left(\frac{1}{1-e^{-x}}\right)^d - 1 - \frac{1}{x^d}$$



3d
(29)

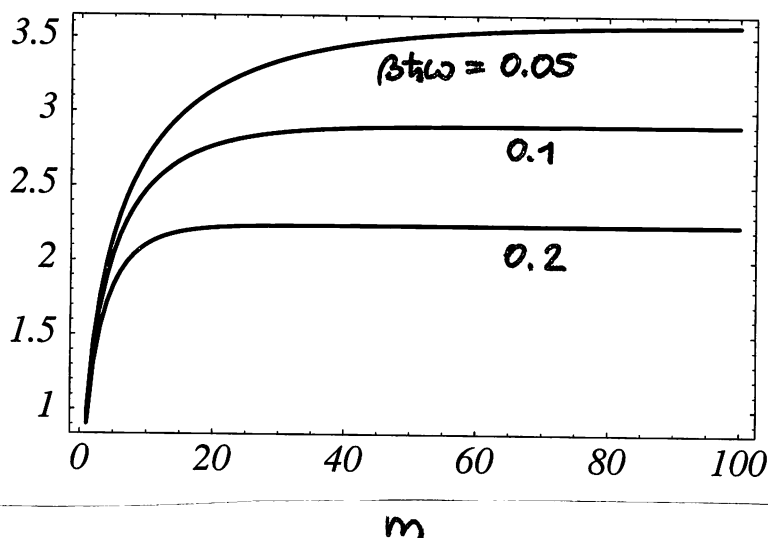
$$\left(\frac{N_0}{N}\right)_{3d} = 1 - \left(\frac{T}{T_c^{(3d)}}\right)^3$$

$$T_c^{(3d)} = \frac{\hbar\omega}{k_B g(3)^{1/3}} N^{1/3}$$

Für $d=1$ kann die Summe in (24) numerisch ausgewertet werden für $z = z_{\max} = 1$

$$S_m = \sum_{k=1}^m \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega k}} - 1 \right)$$

$\beta \hbar \omega S_m$



D.h. in einem externen harmonischen Potential gibt es auch Bose-Kondensation in 1-D

Bem.:

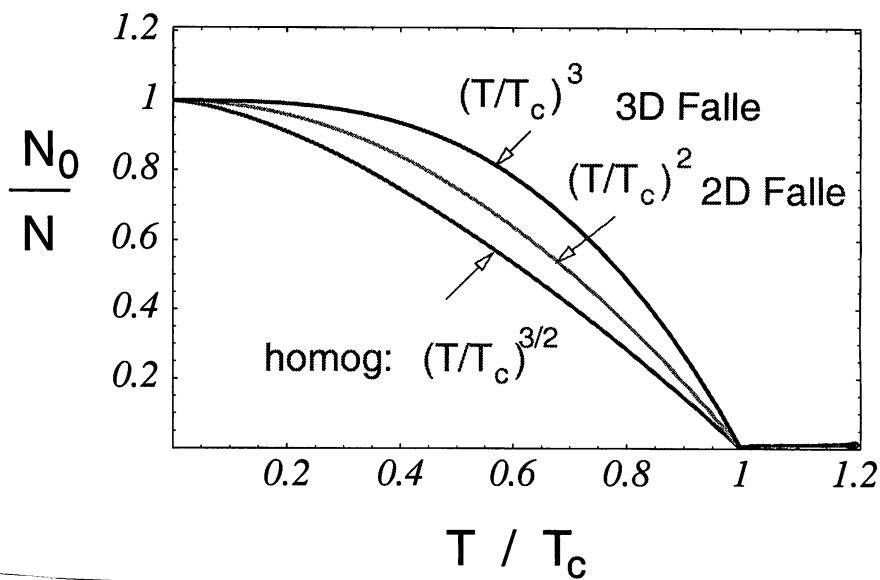
- $k_B T_c \gg \hbar\omega$ falls $N \gg 1$
Kondensation tritt auf wenn thermische Energie groß gegen Energieabstand

- obige Diskussion auf Fälle mit unterschiedlichen Frequenzen erweiterbar

(30)

$$\omega \rightarrow \bar{\omega} = \sqrt[3]{\omega_x \omega_y \omega_z}$$

relativ Teilchenzahl im Kondensat:



Für die Bosekondensation in einer Falle ist neben der Teilchenzahl auch die Teilchendichtedichte von Interesse:

$$(31) \quad g(\vec{r}) = \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle_\beta$$

Im wechselwirkungsfreien Fall gilt

$$(32) \quad \hat{H} = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \hat{n}_{\nu} \quad \hat{N} = \sum_{\nu} \hat{n}_{\nu}$$

$$(33) \quad \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\nu} \varphi_{\nu}(\vec{r}) \hat{b}_{\nu}$$

wobei die $\varphi_{\nu}(\vec{r})$ die Einsteilchenwellenfunktionen des harmonischen Fellenpotentials sind,

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}) \varphi_{\alpha}(\vec{r}) \text{Tr} \left\{ \underbrace{\hat{b}_{\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\alpha}}_{\sim \delta_{\alpha\alpha}} e^{-\beta \sum_{\nu} (\epsilon_{\nu} - \mu) \hat{n}_{\nu}} \right\}$$

$$= \sum_{\alpha} |\varphi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \langle \hat{n}_{\alpha} \rangle_{\beta}$$

$$(34) \quad = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} |\varphi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \left(- \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\alpha}} Z \right) \frac{1}{\beta}$$

$$= - \sum_{\alpha} |\varphi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \epsilon_{\alpha}}$$

$$= \sum_{\alpha} |\varphi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \frac{1}{\frac{1}{Z} e^{\beta \epsilon_{\alpha}} - 1} \quad (\text{siehe Gl. 7, 8})$$

Für $z \rightarrow 1$ ist der Term $\alpha = 0$ ($\epsilon_0 = 0$) dominant

$$(35) \quad g(\vec{r}) \xrightarrow{z \rightarrow 1} |\varphi_0(\vec{r})|^2 \frac{1}{\frac{1}{z} - 1} = |\varphi_0(\vec{r})|^2 N_0$$

Ein allgemeiner Ausdruck für $g(\vec{r})$ lässt sich durch Verwendung der Eigenfunktionen des isotropen harmonischen Oszillators finden. Alternativ verwendet man $|\varphi_{\alpha}(\vec{r})|^2 = \langle \vec{r} | \epsilon_{\alpha} \rangle \langle \epsilon_{\alpha} | \vec{r} \rangle$ und somit

$$(36) \quad g(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \frac{1}{\frac{1}{z} e^{\beta \hat{h}} - 1} | \vec{r} \rangle$$

wobei $\hat{h}$ der 1-Teilchenhamiltonoperator abzüglich der Grundzustandsenergie $3/2 \hbar \omega$ ist. Reihenentwicklung

und ($d=3$)

$$(37) \quad \langle \vec{r} | e^{-\beta k \hbar} | \vec{r} \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{3/2} \left(1 - e^{-2\beta k \hbar \omega} \right)^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega r^2}{\hbar} \tanh \left[\frac{\beta k \hbar \omega}{2} \right] \right\}$$

liefert

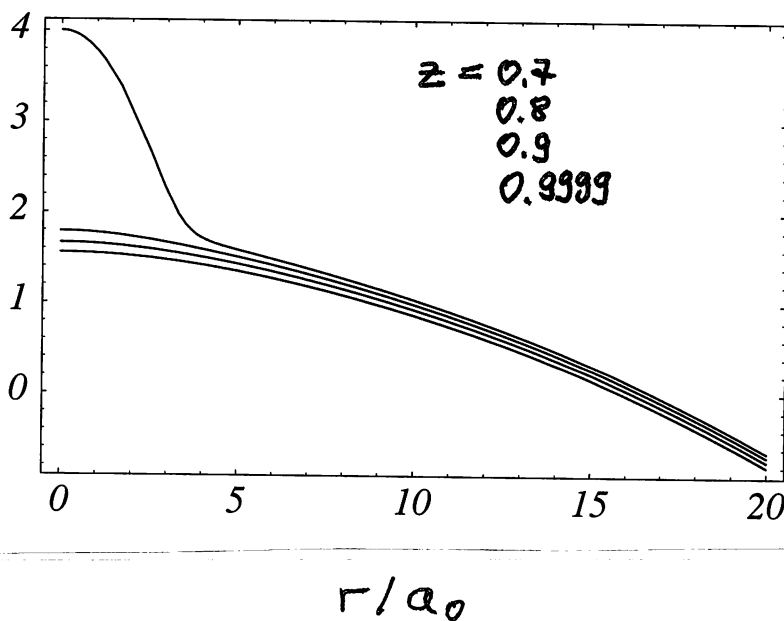
$$(38) \quad g(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{a_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} k^k \left(1 - e^{-2\beta k \hbar \omega} \right)^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{r^2}{2a_0^2} \tanh \left[\frac{\beta k \hbar \omega}{2} \right] \right\}$$

$a_0 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2}$ ist der Radius der Grundzustandswellenf.

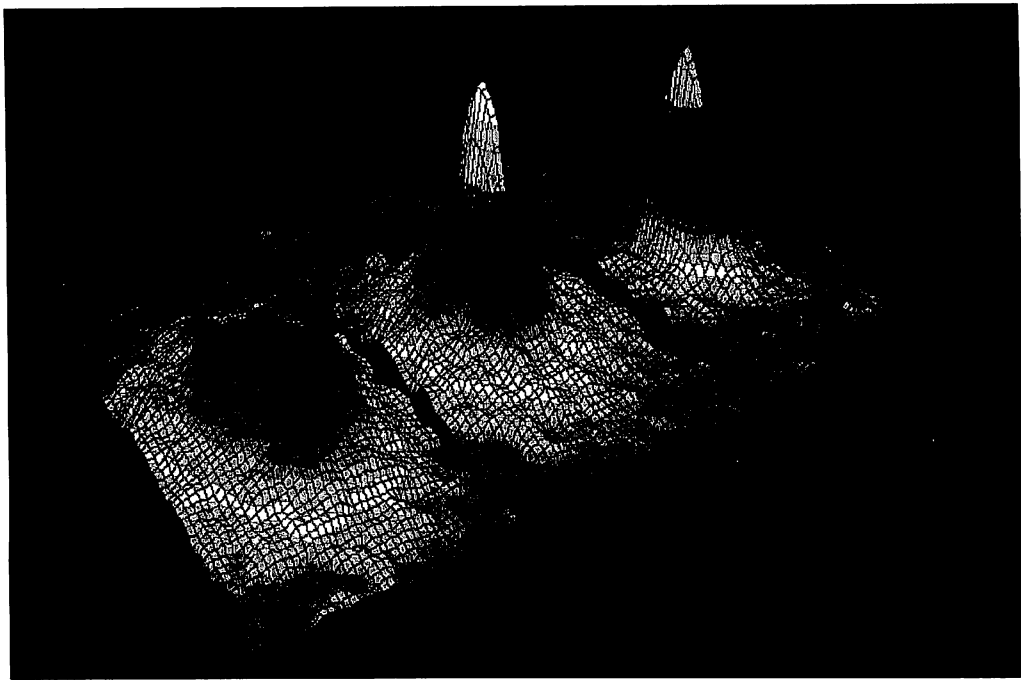
$$\frac{k_B T}{\hbar \omega} = 20$$

$$\bar{g} = g a_0^3 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2}$$

$\log_{10}(\bar{g})$



Die ausgeprägte Erhöhung der Dichte im Zentrum der Falle ist eine deutliche Signatur der Bosekondensation, Man beachte $k_B T \gg \hbar \omega$.



Anderson et al. (Wieman & Cornell JILA) Science 269(1995) 198

(C) Besetzungszahlfunktion im homogenen Kondensat

Für die Wahrscheinlichkeit $P_v^{GC}(n)$ den v ten Energiezustand im großkanonischen Ensemble mit n Teilchen besetzt zu haben findet man

$$\begin{aligned}
 P_v^{GC}(n) &= \langle n_v | \text{Tr}_{\alpha \neq v} \{ \hat{\mathcal{B}}_{GC} \} | n_v \rangle \\
 &= \frac{1}{Z} \text{Tr}_{\alpha \neq v} \{ \langle n_v | e^{-\beta \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha} - \mu) \hat{n}_{\alpha}} | n_v \rangle \} \\
 (39) \quad &= (1 - ze^{-\beta \epsilon_v}) e^{-\beta (\epsilon_v - \mu) n} = (1 - ze^{-\beta \epsilon_v}) z^n e^{-\beta \epsilon_v n}
 \end{aligned}$$

$$\text{denn } Z = \text{Tr}_{\alpha} \{ e^{-\beta \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha} - \mu) \hat{n}_{\alpha}} \} = \prod_{\alpha} \frac{1}{1 - ze^{-\beta \epsilon_{\alpha}}}$$

mit

$$(40) \quad \langle \hat{n}_v \rangle = \frac{1}{\frac{1}{z} e^{\beta \varepsilon_v} - 1} = \frac{z e^{-\beta \varepsilon_v}}{1 - z e^{-\beta \varepsilon_v}}$$

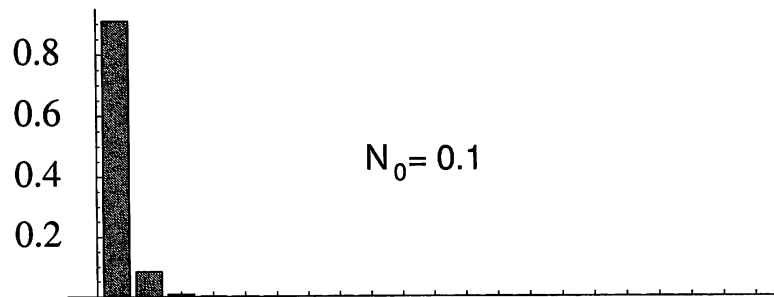
folgt

(41)

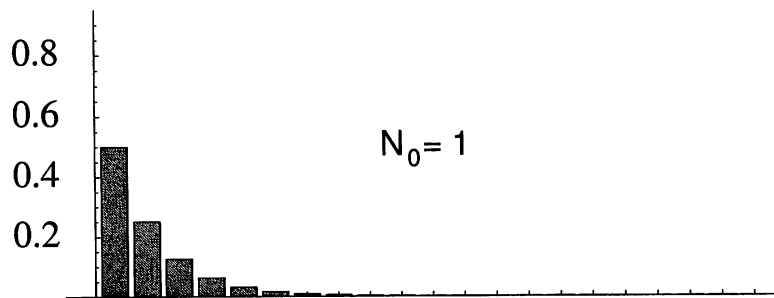
$$P_v^{ac}(n) = \frac{1}{\langle \hat{n}_v \rangle + 1} \left[\frac{\langle \hat{n}_v \rangle}{\langle \hat{n}_v \rangle + 1} \right]^n$$

Diese Verteilung ist für einen makroskopisch berechneten Grundzustand extrem breit.

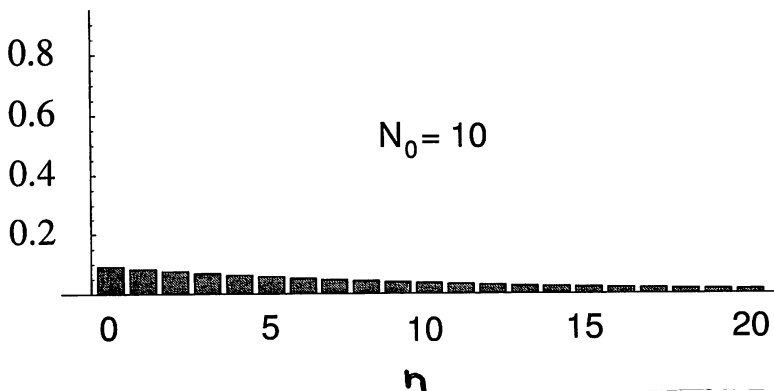
$P_0^{ac}(n)$



$T > T_c$



$T \approx T_c$



$T < T_c$

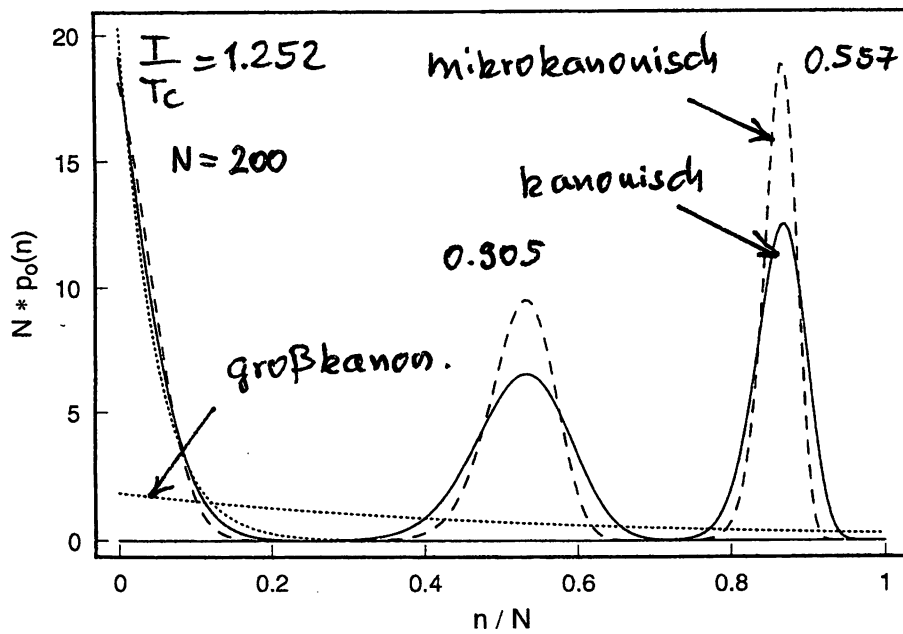
Die Schwankungsbreite im Grundzustand ist

$$\begin{aligned} \langle \Delta n_0^2 \rangle &= \langle \hat{n}_0^2 \rangle - \langle \hat{n}_0 \rangle^2 \\ (42) \quad &\sim \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right] \langle \hat{N} \rangle^2 \\ &T \leq T_c \end{aligned}$$

D.h. für $T \leq T_c$ skaliert $\langle \Delta n_0^2 \rangle$ wie N^2 ! Dies ist ein Artefakt der großkanonischen Beschreibung in der die Gesamteilchenzahl thermische Fluktuationen $\langle \hat{N}^2 \rangle \sim \langle \hat{N} \rangle^2$ aufweist. Für $T \leq T_c$ übertragen sich diese Fluktuationseigenschaften auf den Kondensatzustand. Im kanonischen bzw. mikrokanonischen Ensemble tritt dieses Problem nicht auf. Die Berechnung physikalischer Größen in diesen Gesamtheiten ist wegen der Einschränkung auf eine fixe Teilchenzahl (kanonisch) bzw. eine fixe Teilchenzahl und eine fixe Energie (mikrokanonisch) jedoch weitaus komplizierter. z.B. findet man für die kanonische Zustandssumme

$$(43) \quad Z_c = \sum_{n_0=0}^{\infty} e^{-\beta \epsilon_0 n_0} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta \epsilon_1 n_1} \dots \int_{\sum_i n_i = N} \delta_{\sum_i n_i, N}$$

welche aufgrund der Deltafunktion schwer auszuwerten ist.



Weiss & Wilkens
Opt. Express 1
(1997) 272

Berechnungszuverlässigkeit
des Grundzustandes
für verschiedene T/T_c

(D) Ein-Teilchen-Dichtematrix und Impulsverteilung des homogenen idealen Bosegases

In Abschnitt (B) haben wir die 1-Teilchen-dichte $g(\vec{r}) = \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle_\beta$ kennengelernt. Um alle 1-Teilcheneigenschaften, d.h. z.B. auch die Impulsverteilung $g(\vec{p})$ berechnen zu können, benötigt man die sog. 1-Teilchen-dichtematrix

$$(44) \quad G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_2) \rangle_\beta$$

Für den Fall eines idealen homogenen Bosegases können wir $G(\Delta\vec{r}) = G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ leicht berechnen:

$$(45) \quad G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\alpha} \langle N_{\alpha} \rangle \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}_1) \varphi_{\alpha}(\vec{r}_2)$$

Die homogenen Wellenfunktionen sind außer für $\epsilon_0 = 0$ ebene Wellen $\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

d.h.

$$(46) \quad \phi(\vec{r}) = \frac{\langle N_0 \rangle}{V} + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{0^+} d^3\vec{k} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\frac{1}{2} e^{\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} - 1}$$

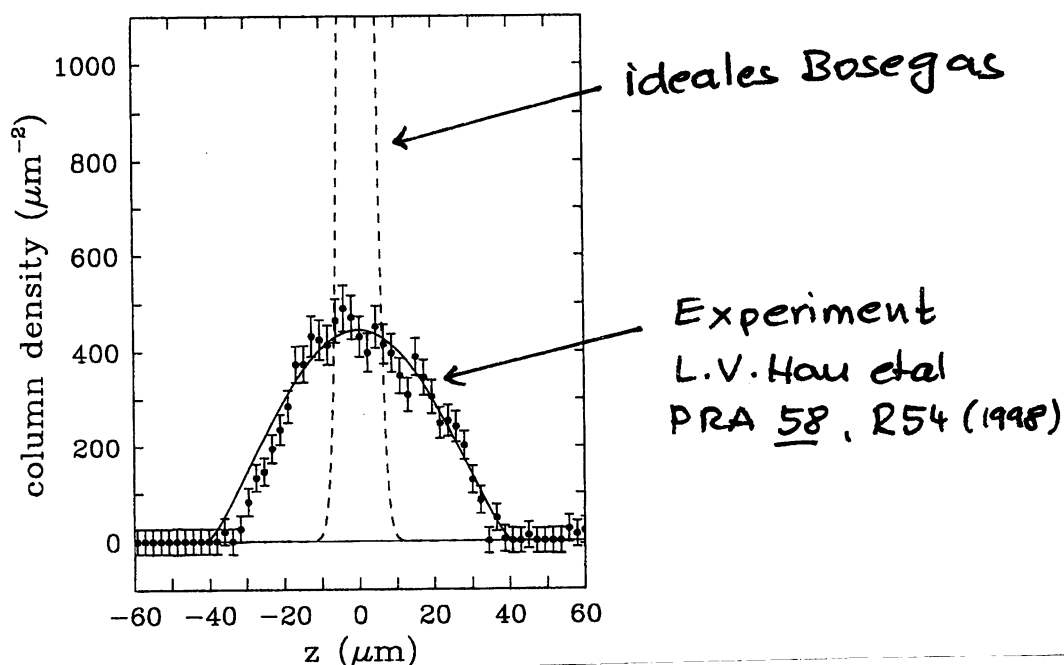
Damit erhält man für die Impulsverteilung

$$g(\vec{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_V d^3\vec{q} \phi(\vec{q}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{q}/\hbar}$$

$$(47) \quad = N_0 \delta(\vec{p}) + \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)} - 1}$$

Das Auftreten eines singulären Anteils $\delta(\vec{p})$ ist ein Ausdruck der Bosekondensation

(E) Wie gut ist das Modell des idealen Bosegases?



$\Rightarrow$ Verbesserung des Modells notwendig!