

12. Ideale Quantengase

- Erinnerung: großkanonische Zustandssumme & freie Energie für Quantengase (Fermionen/Bosonen) aus Kap. 8.1.1.:

$$\rightarrow Z_{gk} = \prod_j [1 + \sigma e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}]^\sigma = \prod_j \sum_{n_j} e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n_j} \quad (1)$$

Produkt über alle Ein-Teilchen-Zustände der Energie ϵ_j

$$\rightarrow J = -k_B T \ln Z_{gk}$$

$$\text{mit } \sigma = \begin{cases} +1 & \text{, Fermionen} \\ -1 & \text{, Bosonen} \end{cases}$$

12.1. Fermi-Dirac- & Bose-Einstein-Verteilung

- Frage: Wie viele Teilchen sind im Mittel im Ein-Teilchen-Zustand der Energie ϵ_j ?

$$\hookrightarrow \langle \hat{n}_k \rangle = \text{Sp} \{ \hat{n}_k \hat{Z}_{gk}^{-1} \}$$

↑
Teilchenzahlop. des k -ten Ein-Teilchen-Zustands

$$= \frac{1}{Z_{gk}} \text{Sp} \left\{ \hat{n}_k e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}^j)} \right\}$$

Werte Spur in Besetzungszahldarstellung aus

$$= \frac{\prod_j \sum_{n_j} n_k e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n_j}}{\prod_e \sum_{n_e} e^{-\beta(\epsilon_e - \mu)n_e}}$$

$$= \frac{\sum_{n_1} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \cdots \sum_{n_k} n_k e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k} \cdots}{\sum_{n_1} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \cdots \sum_{n_k} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k} \cdots}$$

Im Zähler & Nenner tauchen die gleichen Summen auf, bis auf die n_k -Summe

$$= \frac{\sum_{n_k} n_k e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k}}{\sum_{n_k} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k}}$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left[\sum_{n_k} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k} \right]$$

$$\stackrel{gl. (1)}{=} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left[1 + \sigma e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \right]^\sigma$$

$$= \frac{\sigma}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left[1 + \sigma e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \right]$$

$$= \frac{\sigma}{\beta} \frac{1}{1 + \sigma e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} \quad \sigma \beta e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \quad \sigma^2 = 1$$

$$\langle \hat{n}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + \sigma}$$

Definition: Die mittlere Besetzungszahl $f_k^{F/B}$ für Fermionen/Bosonen heißen

Fermi-Dirac-Verteilung: $f_k^F \equiv f^F(\epsilon_k) := \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$

Bose-Einstein-Verteilung: $f_k^B \equiv f^B(\epsilon_k) := \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$

• Diskussion:

• Interpretation: $f_k^{F/B}$ gibt die mittlere Zahl von Teilchen der Energie ϵ_k im Ein-Teilchen-Zustand $|\epsilon_k\rangle$ an.

Bosonen: $f_k^B \geq 0$

Fermionen: $0 \leq f_k^F \leq 1$ Pauli-Prinzip

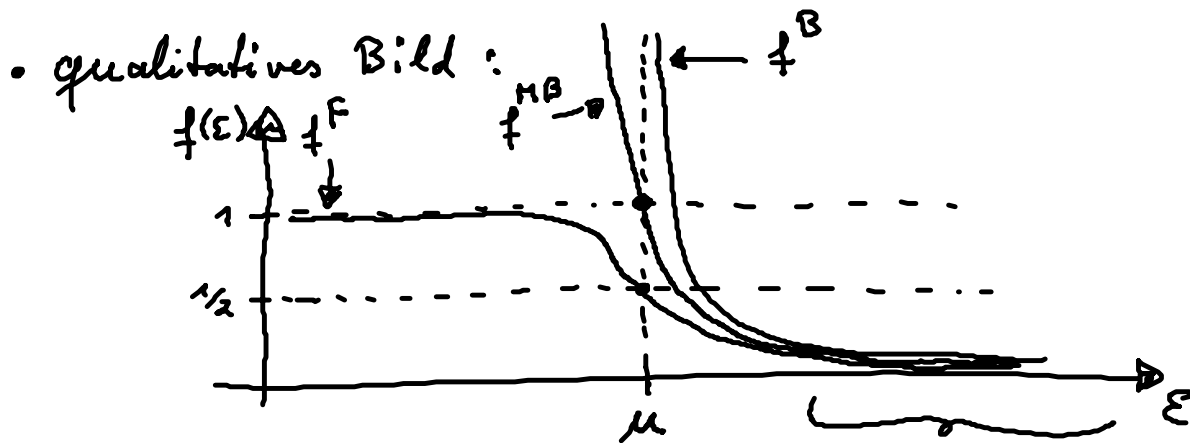
• klassischer Grenzfall: $\beta\mu \rightarrow -\infty$

$$\hookrightarrow f_k^{F/B} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + \sigma} \approx e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \stackrel{MB}{=} f_k^{MB}$$

Maxwell-Boltzmann

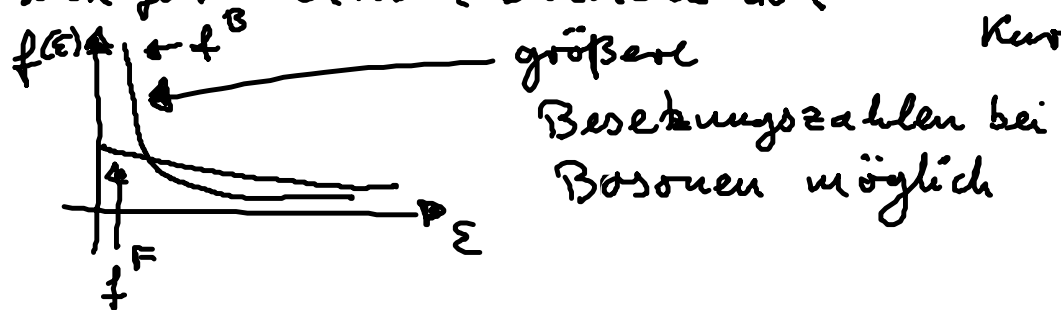
Da $e^{\beta\mu} \ll 1$ ist auch $f_k^{MB} \ll 1$

→ Im klassischen Grenzfall gibt es im Mittel nur wenige Teilchen in jedem Ein-Teilchen-Zustand und die Unterscheidung in Bosonen/Fermionen spielt keine Rolle



- $f^B(\epsilon)$ divergiert $\epsilon \rightarrow \mu$
- μ für Fermionen beliebig

Discussion für identische Teilchenzahl (Fläche unter Kurve)



- mittlere Energie : $E = \langle \hat{A} \rangle = \sum_j \epsilon_j f^{F/B}(\epsilon_j)$
- mittlere Teilchenzahl : $\bar{N} = \langle \hat{N} \rangle = \sum_j f^{F/B}(\epsilon_j)$

• $f_k^{F/B} = f_k^{F/B}(\mu, T, V)$

↑ steckt in ϵ_k
 ↑ Temperatur der Umgebung
 ↑ Welcher Wert hat μ ?

→ μ erhält man aus chem. Zustandsgl.
 $\bar{N} = \bar{N}(T, V, \mu)$

„Strategie“: bestimme \bar{N} (T, V, μ) und berechne daraus $\mu = \mu(T, V, \bar{N})$

12.2. Bosonen bei tiefen Temperaturen & Bose-Einstein-Kondensation

• Was erwarten wir?

• tiefe T : System will Energie minimieren
→ Bosonen besetzen möglichst tiefe Energieniveaus

• kein Pauli-Prinzip → alle Bosonen können Ein-Teilchen-Grundzustand besetzen



$|\epsilon_0\rangle \rightarrow g_0 z$

→ $\langle \hat{n}_0 \rangle \sim N$ für $T \rightarrow 0$

$\langle \hat{n}_{k>0} \rangle \approx 0$ „makroskopische Besetzung des $g_0 z$ “

im Gegensatz zum klassischen Fall, wo alle $\langle \hat{n}_k \rangle \ll 1$ gilt

• Modellsystem: Teilchen im Kasten



Ein-Teilchen-Energien $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

• Erinnerung Kap 8.1.1.(b)

$$\underline{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z) \\ n_j \in \mathbb{Z}$$

Damit $\sum_{\underline{k}} z_{\underline{k}}$ konvergiert muss $\mu < \varepsilon_{\underline{k}} \forall \underline{k}$

$$\Rightarrow \text{Hier: } \boxed{\begin{array}{l} \mu < 0 \text{ ? ,} \\ 0 \leq z < 1 \text{ ?} \end{array}} \text{ mit } z = e^{\beta\mu}$$

• Betrachte Teilchendichte ρ

$$\rho = \frac{\overline{N}}{V} = \frac{\langle \hat{N} \rangle}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} f^B(\varepsilon_{\underline{k}}) = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)} - 1} \\ = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)}}$$

verwende geometrische Reihe rückwärts

$$= \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} e^{-\beta(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)} \sum_{l=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_{\underline{k}} - \mu)l} \\ = \frac{1}{V} \sum_{l=1}^{\infty} e^{\beta\mu l} \sum_{\underline{k}} e^{-\beta\varepsilon_{\underline{k}} l}$$

Im thermodynamischen Limes (TL), d.h. $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$,

$N/V = \rho = \text{konst.}$, lässt sich Summe über \underline{k} als Integral nähern:

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_{l=1}^{\infty} e^{\beta\mu l} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k e^{-\beta \frac{\hbar^2}{2m} |\underline{k}|^2 l} \quad (2)$$

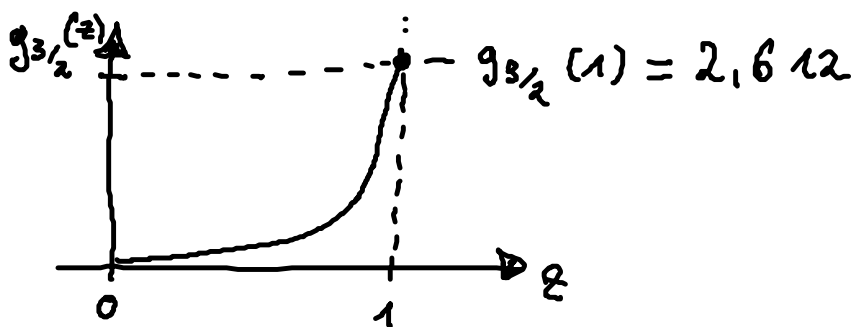
$$\rho = \frac{1}{\Lambda^3} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu l}}{l^{3/2}} = \frac{1}{\Lambda^3} \left(z + \frac{1}{2^{3/2}} z^2 + \frac{1}{3^{3/2}} z^3 + \dots \right)$$

$$\Lambda = \sqrt{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}}$$

- Bemerkungen:
- $z = e^{\beta\mu}$ nennt man hier Virial d. Fugazität
 - ρ als Reihe nach dem Virial
 - für $\mu < 0$ reicht es für höhere Terme der Reihe zu betrachten \rightarrow „Virialentwicklung“

Definition: Verallgemeinerte Zeta-Funktion, bzw. Polylogarithmus

$$g_\nu(z) := \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^\nu}$$



$$\rightarrow \rho = \frac{N}{V} = \frac{g_{3/2}(z)}{\Lambda^3} \quad (3)$$

• Problem mit Gl. (3):

Für $\rho \lambda_{th}^3 > g_{3/2}(1)$ ist Gl. (3) nicht mehr lösbar.

Da $\lambda_{th} \sim \frac{1}{\sqrt{T}}$, gibt es eine kritische Temperatur T_c unterhalb der Gl. (3) nicht lösbar ist:

$$\rho \lambda_{th}^3 \Big|_{T=T_c} = g_{3/2}(1) = 2,612$$

$$T_c = \frac{2\pi \hbar^2}{k_B m} \left(\frac{\rho}{2,612} \right)^{2/3}$$

• Frage: Wieso ist unsere Rechnung für $T < T_c$ nicht gültig?

↳ Problem bereitet der TL in Gl. (2)

$$\sum_{\underline{k}} f_{\underline{k}}^B \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k f_{\underline{k}}^B = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dk k^2 f_k^B$$

D.h. die Besetzung $f_{\underline{k}=0}^B$ trägt zum Integral und damit zu Gl. (3) nicht bei! Hier erwarten wir jedoch eine große Besetzung bei niedrigen Temperaturen.

• Korrigierter Ansatz: Abspazieren des Beitrags mit $\underline{k}=0$

$$\rho = \frac{1}{V} f_{\underline{k}=0}^B + \frac{1}{V} \sum_{\underline{k} \neq 0} f_{\underline{k}}^B$$

Dieser Term kann wie oben behandelt werden

$$\rho = \frac{1}{v} \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3}$$

• Schreibe:

$$\rho_0 := \frac{1}{v} \frac{1}{z^{-1} - 1}$$

Anteil der Dichte von
Bosonen im Ein-Teilchen-gZ

$$\rho_u := \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} = \rho \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)}$$

Def. von T_c eingesetzt

Anteil der
Dichte von
Bosonen
in ange-
regten
Zuständen

$$\rightarrow \rho = \rho_0(T, \mu) + \rho_u(T, \mu) \quad (4)$$

• Betrachte $T > T_c$: Dann $\mu < 0, z < 1$

Im TL gilt dann:

$$\rightarrow \rho_0(T, \mu) = \lim_{\substack{v \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}} \frac{1}{v} \frac{1}{\underbrace{e^{-\beta\mu} - 1}_{\text{endlich}}} = 0$$

\rightarrow Ein-Teilchen-gZ ist "leer" ?

$$\rightarrow \rho = \rho_u = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3}$$

• Betrachte $T < T_c$

$$\text{Dann: } \rho = \frac{1}{v} \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{g_{3/2}(1)}{\lambda^3}$$

$$\Rightarrow z \approx 1 - \frac{1}{v} \frac{\lambda_{th}^3}{g_{3/2}(1) - g_{3/2}} \xrightarrow[V \rightarrow \infty, N \rightarrow \infty]{} 1, \mu = 0$$

$$\rightarrow f(T) = f_0(T) + f\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \cdot 1$$

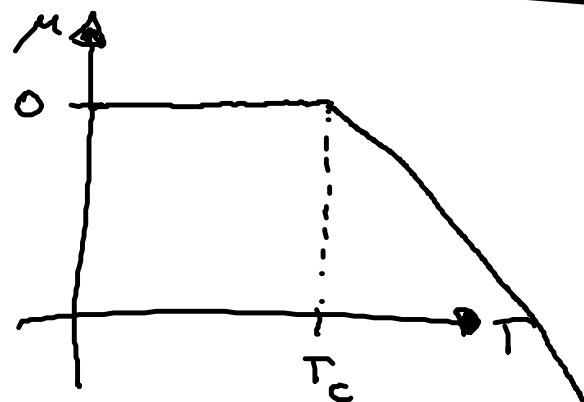
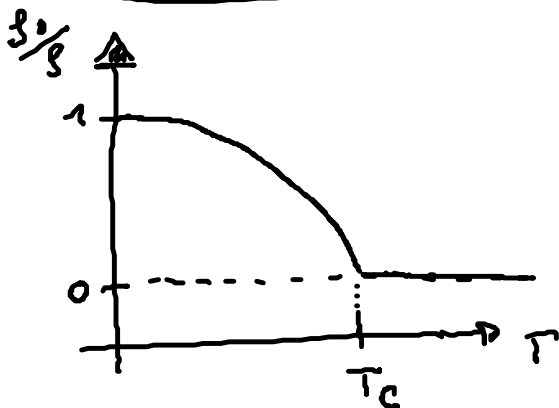
bzw. $\frac{f_0}{f} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$

Anteil der Teilchen
im Ein-Teilchen-gZ

Zusammenfassend:

$$f(T, \mu) = \begin{cases} f_0(T) + f_{in}(T, \mu=0) & | T < T_c \\ f_{in}(T, \mu) & | T > T_c \end{cases}$$

$$\frac{f_0}{f} = \begin{cases} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} & | T < T_c \\ 0 & | T > T_c \end{cases}$$



Man sieht „Knick“ bei $T = T_c$

↳ Phasenübergang: „Bose-Einstein-Kondensation“ (BEK, BEC)

Bemerkungen:

- Kein Phasenübergang im Ortsraum, sondern im Impulsraum
- „Kondensation“ der Bosonen in Zustand niedrigster Ein-Teilchen-Energie, hier $\underline{k} = \underline{0}$
- Makroskopische Besetzung des Ein-Teilchen-GZ bei endlicher Temperatur, also nicht erst bei $T = 0$

$$\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{l} \leftarrow \text{Ein-Teilchen-Zustände} \\ |E_1\rangle \\ |E_0\rangle \end{array}$$

Es gilt: $\Delta \ll k_B T_c$?

thermische Energie ist viel größer als der Abstand des GZ vom ersten angeregten Zustand

- Genaue Betrachtung zeigt, dass es sich um einen Phasenübergang erster Ordnung handelt
- Phasenübergang in einem idealen Gas, d. h. in einem System ohne Wechselwirkung zwischen den Teilchen
- QM-Phänomen, welches allein aus der Symmetrie der Viel-Teilchen-Wellenfkt. folgt

⇒ „Bosonen besetzen gerne den gleichen Zustand“

- erste theoretische Arbeit von Einstein 1925
basierte auf Arbeit von Bose 1924 (Photonen)
- für $\rho = 10^{22} \text{ cm}^{-3} \rightarrow T_c \approx 1 \mu\text{K}$ kein Gas, sondern
Festkörper
Im Experiment $\rho = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \rightarrow T_c \approx 1 \mu\text{K}$

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

→ Nobel-Preis für Cornell, Wiemann,
Ketterle 2001