

XI.4 Ideales Bose-Gas

In diesem Abschnitt werden die thermodynamischen Eigenschaften eines idealen Gases aus Bosonen untersucht, zunächst im Fall nicht-relativistischer massiver Teilchen (§ XI.4.1), dann für Bosonen, deren Anzahl nicht erhalten ist (§ XI.4.2).

XI.4.1 Ideales Gas massiver Bosonen

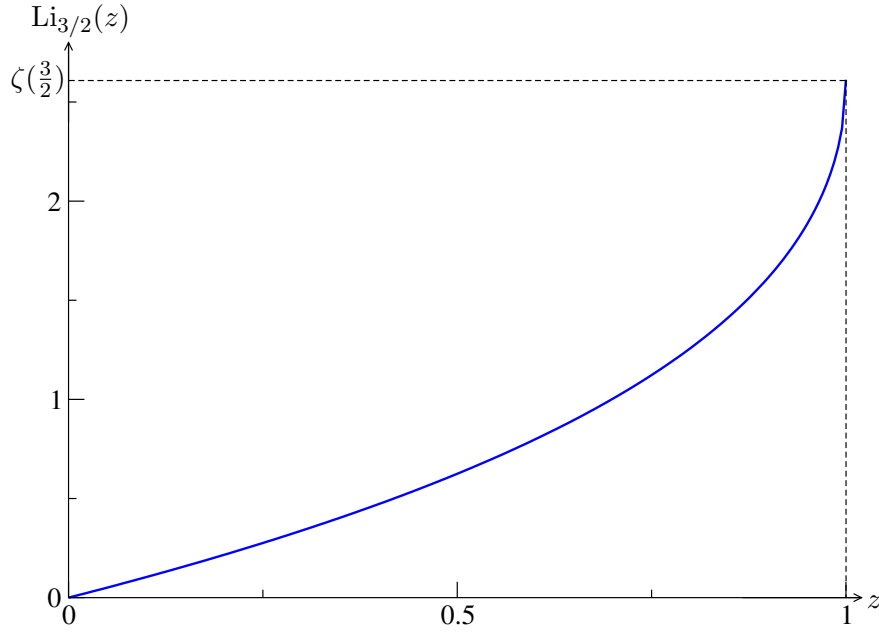
Gemäß Gl. (XI.53) lautet die Zustandsdichte eines idealen Gases aus Bosonen mit der Masse m und dem Spin s

$$\mathcal{D}(\varepsilon) = (2s + 1) \mathcal{V} \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon} \Theta(\varepsilon). \quad (\text{XI.53})$$

Dabei hat der Grundzustand die Energie $\varepsilon_1 = 0$. Wiederum wird die mittlere Besetzungszahl eines Energieniveaus durch die Bose–Einstein-Verteilung

$$f^{(\text{B})}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} - 1} \quad \text{mit } \mu < 0 \quad (\text{XI.90})$$

gegeben.

Abbildung XI.3 – Verlauf des Polylogarithmus $\text{Li}_{3/2}(z)$

XI.4.1 a Massive Bosonen bei tiefer Temperatur. Bose-Kondensation

Gemäß Gl. (XI.59)–(XI.60) kann die Teilchendichte $n = \langle N \rangle / \mathcal{V}$ eines idealen Bose-Gases in der Form

$$n = \frac{2(2s+1)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} u_- \left(\frac{\mu}{k_B T} \right) = \frac{2s+1}{\lambda_{\text{th}}(T)^3} \text{Li}_{3/2}(e^{\mu/k_B T}) \quad (\text{XI.91a})$$

umgeschrieben werden, wobei $\lambda_{\text{th}}(T)$ die thermische Wellenlänge bei der Temperatur T ist. Dabei bezeichnet $\text{Li}_{3/2}$ den Abb. XI.3 dargestellten Polylogarithmus [54, Kap. 25.12(ii)] der Ordnung $\frac{3}{2}$

$$\text{Li}_{3/2}(z) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{z^{-1}e^x - 1} dx = \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^{3/2}}. \quad (\text{XI.91b})$$

Im Limes $z = e^{\mu/k_B T} \rightarrow 0$ gilt $\text{Li}_{3/2}(z) \sim z$, entsprechend dem Grenzfall kleiner Teilchendichten oder hoher Temperaturen.

Wenn die Temperatur sinkt, während die Teilchendichte fest bleibt, dann nimmt der Betrag von μ ab. Für $z \rightarrow 1$ konvergiert der Polylogarithmus nach einem endlichen Wert

$$\text{Li}_{3/2}(1) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^{3/2}} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \simeq 2,612 \dots,$$

mit der Riemann-Funktion ζ . Somit wird der Grenzwert $\mu = 0$ für einen endlichen Wert des Verhältnisses n/λ_{th}^3 erreicht, d.h. bei fester Teilchendichte für eine positive Temperatur T_0 gegeben durch

$$n = (2s+1) \left(\frac{mk_B T_0}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Leftrightarrow T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left[\frac{1}{2s+1} \frac{n}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right]^{2/3}. \quad (\text{XI.92})$$

Diese Temperatur T_0 hängt nur von einer einzigen thermodynamischen Zustandsgröße, der Teilchendichte n , ab.

Für eine Temperatur $T > T_0$ und eine feste Teilchendichte n hat Gl. (XI.91a) eine einzige negative Lösung in μ . Die thermodynamischen Eigenschaften des entsprechenden idealen Bose-Gases in diesem Regime werden hiernach in § XI.4.1 b untersucht.

Für $T < T_0$ wird $n\lambda_{\text{th}}(T)^3/(2s+1) > \zeta(\frac{3}{2})$, so dass Gl. (XI.91a) keine Lösung mit $\mu < 0$ hat. Dies bedeutet, dass Gl. (XI.91a) für solche Temperaturen nicht gilt.

Physikalisch erwartet man, dass sich die Teilchen bei tiefen Temperaturen auf den niedrigeren Energieniveaus befinden. Nimmt man beispielsweise an, dass die Teilchen in einem quaderförmigen Volumen mit periodischen Randbedingungen eingeschlossen sind, so sind die Ein-Teilchen-Energieniveaus durch Gl. (XI.54c) gegeben, mit einem $(2s+1)$ -mal entarteten Grundzustand mit Energie $\varepsilon_1 = 0$. Da die Teilchen Bosonen sind, können auf einem niedrigen N -Teilchen-Energieniveau viele Teilchen im Ein-Teilchen-Grundzustand sein.

Sei $\langle N_0(T) \rangle$ die durchschnittliche Anzahl von Teilchen in diesem Grundzustand. Dann gilt

$$\langle N \rangle = \sum_a \frac{1}{e^{(\varepsilon_a - \mu)/k_B T} - 1} = \langle N_0(T) \rangle + \sum_{a; \varepsilon_a > \varepsilon_1} \frac{1}{e^{(\varepsilon_a - \mu)/k_B T} - 1} \quad (\text{XI.93})$$

mit

$$\langle N_0(T) \rangle = \frac{2s+1}{e^{-\mu/k_B T} - 1}.$$

Wenn $|\mu|/k_B T$ der Ordnung $1/\langle N \rangle \propto 1/\mathcal{V}$ ist, wobei eine feste Teilchendichte angenommen wird, dann ist $\langle N_0(T) \rangle$ „makroskopisch“, d.h. proportional zum Volumen bzw. zur mittleren Teilchenzahl

$$\langle N_0(T) \rangle \underset{\mu \rightarrow 0^-}{\sim} (2s+1) \frac{k_B T}{|\mu|} \approx \langle N \rangle. \quad (\text{XI.94})$$

Für das erste angeregte Energieniveau gilt $\varepsilon_a \propto 1/L^2$, wobei L eine der Kantenlängen des Volumens $\mathcal{V}$ bezeichnet. Aus $L \propto \mathcal{V}^{1/3} \sim \langle N \rangle^{1/3}$ folgt $\varepsilon_a \propto \langle N \rangle^{-2/3}$. Dann ist die mittlere Besetzungszahl $\langle n_a \rangle$ der Ordnung $\langle N \rangle^{2/3}$, d.h. viel kleiner als $\langle N_0(T) \rangle$. In einem solchen Fall ist die mittlere Besetzungszahl keine langsam variierende Funktion der Energie für $\varepsilon \rightarrow 0$, so dass das Ersetzen (XI.45) einer diskreten Summe durch ein Integral nicht zulässig ist.

Dagegen wird die Besetzungszahl regulär für $\varepsilon_a > \varepsilon_1$, so dass die Summe über die angeregten Niveaus durch ein Integral ersetzt werden kann. Dazu gilt für diese Energieniveaus $\mu \ll \varepsilon_a$, so dass man $\mu = 0$ im entsprechenden Integral annehmen kann. Insgesamt lautet also die mittlere Teilchenzahl für $T < T_0$

$$\langle N \rangle = \langle N_0(T) \rangle + \int_0^\infty \frac{\mathcal{D}(\varepsilon)}{e^{\varepsilon/k_B T} - 1} d\varepsilon = \langle N_0(T) \rangle + (2s+1) \frac{\mathcal{V}}{\lambda_{\text{th}}^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \quad (\text{XI.95})$$

wobei $\langle N_0(T) \rangle$ durch Gl. (XI.94) gegeben ist.

Mithilfe der Definition (XI.92) der Temperatur T_0 kann man diese Gleichung noch in der Form

$$\frac{\langle N_0(T) \rangle}{\langle N \rangle} = 1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \quad \text{für } T < T_0 \quad (\text{XI.96})$$

schreiben. Darauf sieht man, dass sich ein makroskopischer Anteil der Bosonen im Grundzustand befindet, der mit abnehmender Temperatur zunimmt. Im Grenzfall $T = 0$ sind alle Bosonen im Ein-Teilchen-Grundzustand, $\langle N_0(T=0) \rangle = \langle N \rangle$, wie zu erwarten war.

Dieses Phänomen einer makroskopischen Besetzung des Ein-Teilchen-Grundzustands wird als *Bose-Einstein-Kondensation* bezeichnet, und T_0 ist die Temperatur des Phasenübergangs zwischen dem „normalen“ Bose-Gas und dem *Bose-Einstein-Kondensat*.

Bei dieser Kondensation muss man berücksichtigen, dass sie nicht — wie beispielsweise im Fall der Kondensation eines Dampfs — im Ortsraum, sondern im Impulsraum stattfindet: Im Kondensat befinden sich Teilchen im Zustand mit dem minimalen Impuls — hier entspricht $\varepsilon = 0$ tatsächlich $\vec{p} = \vec{0}$ —, d.h. mit der maximalen Delokalisierung — λ_{th} geht nach ∞ wenn $T \rightarrow 0$ — im Ortsraum.

Um das Verhalten bei fester Temperatur $T < T_0$ zu finden, kann man Gl. (XI.95) als

$$n = \frac{\langle N \rangle}{\mathcal{V}} = \frac{\langle N_0(T) \rangle}{\mathcal{V}} + (2s+1) \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \quad (\text{XI.97})$$

umschreiben. Der zweite Term im rechten Glied hängt nur von der Temperatur ab, und bleibt somit konstant bei fester Temperatur. Erhöht man die Teilchendichte n , so ändert sich nur der erste

Term, d.h. die Besetzung des Grundzustands. Dagegen bleiben die mittleren Besetzungszahlen der angeregten Ein-Teilchen-Zustände unverändert.

Bemerkungen:

* Bei der Beziehung (XI.96) muss man verstehen, dass für $T \rightarrow T_0^-$ und in der Tat auch für $T \geq T_0$ die mittlere Anzahl der Teilchen im Grundzustand vernachlässigbar gegen $\langle N \rangle$ ist.

* Der Abstand zwischen der Energien des Grundzustands und des ersten angeregten Niveaus ist bis auf Faktoren der Ordnung 1

$$\Delta\varepsilon \sim \frac{\hbar^2}{mL^2} \simeq \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{n}{\langle N \rangle} \right)^{2/3} \ll \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3} \sim k_B T_0.$$

Die Bose-Kondensation findet bei Temperaturen viel höher als $\Delta\varepsilon/k_B$ statt. Jedoch bleibt der erste angeregte Niveau viel weniger besetzt als der Grundzustand.

* Der Ein-Teilchen-Grundzustand — d.h. der Zustand, in dem die Bosonen unterhalb T_0 kondensieren — hängt von der Wahl der Randbedingungen ab. Wählt man z.B. stationäre Randbedingungen, wobei die Wellenfunktion an den Wänden des Volumens Null ist, dann entspricht der Grundzustand einem endlichen Impuls, statt $\vec{p} = \vec{0}$. Diese Sensitivität bezüglich der Randbedingungen für Systeme von nicht-wechselwirkenden massiven Bosonen bei tiefen Temperaturen stellt eine Verletzung der Extensivität dar, da Oberflächeneffekte einen Einfluss auf Volumen-Eigenschaften haben.

* Das Auftreten eines Phasenübergangs zwischen Bose-Gas und -Kondensat folgt aus der Existenz eines endlichen Grenzwerts für $\text{Li}_{3/2}(z)$ im Limes $z \rightarrow 1^-$, so dass die Temperatur nicht unendlich klein werden kann.

In einem D -dimensionalen Raum ist die Zustandsdichte massiver Teilchen proportional zu $\varepsilon^{(D-2)/2}$, vgl. z.B. Gl. (XI.56) und (XI.57) für $D = 2$ bzw. $D = 1$. Dann wird der Zusammenhang (XI.91a) zwischen Teilchendichte, thermischer Wellenlänge und chemischem Potential durch eine ähnliche Beziehung mit dem Polylogarithmus $\text{Li}_s(e^\alpha)$ der Ordnung $s = D/2$.⁽⁴²⁾ Dieser Polylogarithmus hat einen endlichen Grenzwert für $e^\alpha \rightarrow 1^-$ nur für $s > 1$, divergiert aber nach $+\infty$ wenn $s \leq 1$. Dementsprechend findet in einem ein- oder zweidimensionalen idealen Gas aus Bosonen kein Phasenübergang statt, da die thermische Wellenlänge in Gl. (XI.98) unendlich groß werden kann. Diese Abhängigkeit der Eigenschaften eines Phasenübergangs von der Raumdimension ist in der Tat ein allgemeines Phänomen.

⁽⁴²⁾ Aus dimensional Gründen soll diese Beziehung

$$n \sim \frac{1}{\lambda_{\text{th}}^D} \text{Li}_{D/2}(e^\alpha) \quad (\text{XI.98})$$

sein, wobei die beiden Seiten die Dimension $[\text{Länge}]^{-D}$ haben.