

Bose-Einstein-Kondensation (BEC)

Unter Bose-Einstein-Kondensation versteht man dass sich Teilchen eines idealen Bosegases mit der Dispersionsrelation $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur T_C in dem niedrigsten Energiezustand versammeln. Dies ist ein rein quantenmechanischer Effekt da für eine Kondensation im klassischen Sinne die Teilchen miteinander wechselwirken können müssen z.B. Gitter aufbauen können, was bei einem idealen Gas nicht der Fall ist.

Wir möchten nun die kritische Temperatur T_C bestimmen. Dazu nutzen wir die Tatsache aus dass die Teilchenzahl bei jeder Temperatur erhalten bleiben muss. Die Anzahl der Teilchen lässt sich nach folgender Formel bestimmen

$$N(T, V, \mu) = V \int d\epsilon \mathcal{N}(\epsilon) n(\epsilon - \mu) \quad (1)$$

Wobei $n(\epsilon - \mu)$ die Bose-Einstein Verteilungsfunktion ist und $\mathcal{N}(\epsilon)$ ist die Zustandsdichte. Die Zustandsdichte für ein Gas im 3-dimensionalen Raum.

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon} \quad (2)$$

Die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion die da lautet

$$n(\epsilon - \mu) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (3)$$

gibt die Anzahl der Teilchen in einem Zustand mit der Energie $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ an. Betrachtet man den Exponenten in der Gleichung (3) so stellt man fest, dass das chemische Potential μ immer kleiner sein muss als ϵ , wenn das nicht der Fall ist würde sich eine negative Teilchenzahl ergeben. D.h. es muss gelten

$$\mu \leq \epsilon \quad (4)$$

Da die kleinst mögliche Energie $\epsilon(k=0) = 0$ mit dem Impuls $k=0$ ist, gilt für die Gleichung (4)

$$\mu \leq 0 \quad (5)$$

Dies ist eine wichtige Bedingung für das chemische Potential, dass die Energie beschreibt das man aufwenden muss um ein zusätzliches Teilchen dem System hinzuzufügen.

Betrachtet man weiterhin Gleichung (3) für sehr tiefe Temperaturen $T \rightarrow 0$ stellt man fest, dass $n(\epsilon - \mu) \rightarrow 0$ ebenfalls gegen Null geht. Was dazu führt dass die Anzahl der Teilchen in Gleichung (1) ebenfalls gegen Null gehen lässt was mit der Teilchenzahl-Erhaltung im Widerspruch steht. Deswegen Teilt man die Gleichung (1) in zwei Summanden wie folgt auf

$$N(T, V, \mu) = N_0 + N_T = N_0 + V \int d\epsilon \mathcal{N}(\epsilon) n(\epsilon - \mu) \quad (6)$$

Dabei repräsentiert N_0 die Anzahl der Teilchen im Grundzustand $\epsilon(k=0)$ und der zweite Summand N_T die Teilchen in allen anderen möglichen Zuständen. N_0 ist für hohe Temperaturen zu vernachlässigen, da man davon ausgeht, dass die meisten Teilchen nicht im Grundzustand sind, für $N \rightarrow \infty$ gilt $\frac{N_0}{N} \rightarrow 0$. Die Quintessenz bei BEC ist, dass bei sinkender Temperatur das chemische Potential im zweiten Summanden dafür sorgt dass die Teilchenanzahl bis zu einer kritischen Temperatur T_C erhalten bleibt. Ist die Bedingung in Gleichung (5) erreicht, kann das chemische Potential nicht mehr für Teilchenerhalt sorgen. D.h. damit die Teilchen dennoch erhalten bleiben, müssen sie sich im ersten Summanden N_0 versammeln und somit den gleichen quantenmechanischen energetischen Zustand $\epsilon_0 = 0$ einnehmen. Was man als Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet. Kurz vor der kritischen Temperatur muss gelten N_0 immer noch Null und μ fast Null. Damit können wir die Gleichung (6) vereinfachen zu

$$N(T_C, V, \mu = 0) = V \int d\epsilon \mathcal{N}(\epsilon) n(\epsilon) \quad (7)$$

Mit den Gleichungen (2) und (3) ergibt sich

$$N(T_C, V, \mu = 0) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{\exp\left(\frac{\epsilon}{k_B T_C}\right) - 1} \quad (8)$$

Mit der Substitution $u = \frac{\epsilon}{k_B T_C}$ und $\frac{du}{d\epsilon} = \frac{1}{k_B T_C} \rightarrow d\epsilon = k_B T_C du$ eingesetzt in Gleichung (8)

$$\begin{aligned} N(T_C, V, \mu = 0) &= \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \int_0^\infty k_B T_C du \frac{\sqrt{u k_B T_C}}{e^u - 1} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m k_B T_C}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \int_0^\infty du \frac{\sqrt{u}}{e^u - 1} \end{aligned} \quad (9)$$

Das Integral lässt sich mit Hilfe der ζ -Funktion bestimmen, es gilt

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{u^{s-1}}{e^u - 1} du \quad (10)$$

Somit lautet die Gleichung (9)

$$N(T_C, V, \mu = 0) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m k_B T_C}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \quad (11)$$

Um die kritische Temperatur bei der die Kondensation beginnt zu bestimmen stellen wir die Gleichung (11) nach T_C um und setzen $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ ein

$$T_C = \frac{\hbar^2}{2m k_B} \left(\frac{N 4\pi^2}{V \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B} \left(\frac{N}{V \zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (12)$$

Damit lässt sich die kritische Temperatur mit der folgenden Gleichung bestimmen

$$\boxed{T_C = \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B} \frac{1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{2\pi m k_B} \frac{1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}} \quad (13)$$

Es lässt sich weiterhin $\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2,61$ ungefähr angeben.

Für das Verhältnis zwischen Teilchen im Grundzustand und den Gesamtanzahl der Teilchen gilt

$$\frac{N_0}{N} \stackrel{(6)}{=} \frac{N - N_T}{N} = 1 - \frac{N_T}{N} \quad (14)$$

Im Falle $T < T_C$ sammeln sich die meisten Teilchen im Grundzustand N_0 so dass gilt $N \approx N_0$ und somit erhalten wir folgendes Verhältnis

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{\frac{3}{2}} \quad \text{für } T < T_C \quad (15)$$

Phänomenologische Herleitung

Betrachte die De-Brouglie-Beziehung zwischen Welle und Impuls

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (16)$$

Für den Impuls eines Teilchen in einem Gas kann die Kinetische Energie wie folgt angenommen werden

$$E = \frac{p^2}{2m} \Leftrightarrow p = \sqrt{2mE} \quad (17)$$

Die Energie E in Gleichung (17) ersetzt man nun mit der thermischen Energie, damit eine Abhängigkeit von der Temperatur in die Beziehung aufgenommen wird. Am einfachsten ist der Ansatz $E \equiv U = \frac{f}{2} k_B T = \frac{3}{2} k_B T$ welches eine brauchbare Näherung liefert. Die thermische Wellenlänge lautet somit aus Gleichung (16)

$$\lambda_{\text{th}} = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} \quad (18)$$

Eine genauere Approximation für die thermische Wellenlänge gibt uns dagegen die Zustandssumme eines ideales Gases. Dabei kommt in der Rechnung eine Energie $E \equiv U = \pi k_B T$ heraus. Für die thermische Wellenlänge wird deswegen im weiteren folgende Gleichung verwendet

$$\boxed{\lambda_{\text{th}} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}} \quad (19)$$

Uns interessiert die kritische Temperatur. Die Gleichung (19) nach T umgestellt lautet dann

$$T = \frac{h^2}{2\pi m k_B \lambda_{\text{th}}^2} \quad (20)$$

Die einzige noch uns unbekannte Größe in der Gleichung (20) ist die thermische Wellenlänge λ_{th} bei welcher quantenmechanische Effekte auftreten sollen. Sinnvoller weise nimmt man eine Wellenlänge an die mindestens so groß ist wie der Abstand zum nächsten Atom, weil dann eine Überlappung der Wellen-Teilchen erst stattfinden kann. Die Bedingung sollte also lauten

$$\lambda_{\text{th}} \gtrsim d \quad (21)$$

Man überlegt sich den Abstand d folgendermaßen. In einem Würfel das N -Teilchen beinhaltet, muss eine Würfelkante $\sqrt[3]{N}$ Teilchen haben. Das gleiche gilt für die Würfelstrecke eines Volumens, nämlich $\sqrt[3]{V}$. Das Verhältnis zwischen Kantenlänge und Teilchen auf ihr gibt uns den Abstand zwischen den Teilchen

$$d = \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3} \quad (22)$$

Diese Beziehung in Gleichung (20) eingesetzt ergibt

$$T_C = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (23)$$

Vergleicht man nun mit Gleichung (13) muss man feststellen, dass die Approximation in (23) um den Faktor $\frac{1}{\zeta(\frac{3}{2})^{\frac{3}{2}}} \approx 0,237$ abweicht.