20. Das ideale Bose-Gas

- Besetzungszahl von Zuständen: $n_k^{(\nu)} > 1$ erlaubt!

$\longrightarrow$ bei $T \to 0$: Bose-Einstein-Kondensation: $n_1^{(\nu)} \approx \nu$, $n_k^{(\nu)} \approx 0$ sonst

$\hat{=}$ „alle" Bosonen im Grundzustand!

$\longrightarrow$ nicht klassische Effekte

Bsp: Supraleitung durch Cooper-Paare ($\hat{=}$ gepaarte e^-)

Suprafluidität von ^4He

erste Bose-Einstein-Kondensat: 1995 realisiert,

$\longrightarrow$ Nobelpreis 2001 für Cornell, Wieman (NIST) Ketterle (MIT)

20.1 Chemisches Potential

- mittlere Besetzungszahl:

$$N_k^{BE} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} \qquad (18.16)$$

Grundzustand: $\varepsilon_1 = 0$ (Festlegung)

- Es muß stets gelten: $\boxed{\mu < 0}$ (20.1)

denn (1) für $\mu > 0$, $N_k^{BE} = \infty$ für $\mu = \varepsilon_k$ ... unphysikalisch!

(2) Vgl. Herleitung: Z_{BE} in Kap. 18.3 b): $\mu > 0 \to f_k > 1$ $\to Z_{BE} = \infty$ ↯

$\longrightarrow$ Fugazität: $\boxed{\xi = e^{\beta\mu} = e^{\mu/k_BT} \quad \text{mit } 0 < \xi < 1}$ (20.2)

- Besetzung Grundniveau: $\varepsilon_k = 0$

$$\boxed{N_1 = \frac{1}{\xi^{-1} - 1} \longrightarrow \infty} \quad \text{für } \xi \to 1 \longrightarrow \mu \to 0 \;\&\; |\mu| \ll k_BT$$

(20.3)

... Bose-Einstein-Kondensation!

- chem. Pot. für $N_1 \gg 1$:

aus $\xi^{-1} = e^{-\beta\mu} \approx 1 - \beta\mu \xrightarrow{(20.3)} N_1 = -\frac{k_BT}{\mu}$

$$\longrightarrow \boxed{\mu(T) = -\frac{k_BT}{N_1}} \longrightarrow 0, \text{ für } T \to 0 \;(\& \;|\mu| \ll k_BT)$$

(20.4)

20.2 Bose-Einstein-Kondensation

a) mittlere Besetzungszahl: $D(\varepsilon) = D_0\sqrt{\varepsilon}$ (19.1)!

$$N_e = \int_0^\infty \frac{1}{\xi^{-1}e^{\beta\varepsilon}-1}\, D(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

(20.5)

$\xrightarrow[(19.1)]{\text{Taylor in } \xi}$ $\boxed{N_e = \frac{g_0 V}{\lambda_B^3} F_{3/2}(\xi)}$ mit $F_{3/2}(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^n}{n^{3/2}}$

Diskussion:

(i) $F_{3/2}(\xi)$ monoton $\longrightarrow$ $F_{3/2}(\xi=1) = 2.612$ ... Maximalwert

$\rightarrow$ $\boxed{N_e^{max} = 2.612\, \frac{g_0 V}{\lambda_B^3} \sim V T^{3/2}}$ (20.6)

(ii) Problem: Vorgabe von $N > N_e^{max}$, V, T!

Wo sind die restlichen Teilchen

Antwort: im Grundzustand!

$$N = N_1 + N_e \quad (20.7)$$

denn N_1 nicht in N_e, weil $D(\varepsilon=0)=0$ & N_1 groß

b) charakt. Temperatur:

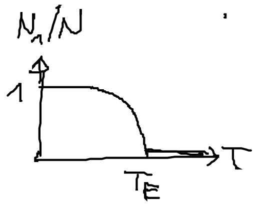
• Kondensation tritt ein für $N_e^{max} = N$

(20.6) $\longrightarrow$ $\boxed{T_{BE} = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m}\left(\frac{1}{2.612}\,\frac{N}{g_0 V}\right)^{2/3}}$ (20.8)

• Besetzung des Grundzustandes:

$T > T_{BE}$: $N_1 \approx 0$

$T < T_{BE}$: $\boxed{N_1 = N - N_e^{max} = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_{BE}}\right)^{3/2}\right]}$



Bem: (1) $T = T_{BE}$ ... Kondensation setzt ein

$T \to 0$ ... vollständige Kond.: $N_1 = N$!

(2) $T_{BE} \sim \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \rightarrow$ hohe Dichte nötig! $\rightarrow$ Abkühlung

(3) ^4He: mit Dichte von flüssigem $^4He \longrightarrow T_{BE} \approx 3K$

Suprafluidität: bei $T = 2{,}17K$

(4) 1995: direkte Beobachtung $\longrightarrow$ Folie

21. Quantenstatistik mit Operatoren

- „Statistische Mechanik" für QM-Zustände!

21.1 Dichtematrix

a) Vergleich:

- Idee: (i) Energie von Zuständen $U_s, H \longrightarrow \hat{H}$ ... Hamiltonoperator

  (ii) Ensemble von qm-Zuständen

$\longrightarrow S = k_B \ln g_R$ (Nebenbed.)

Zahl von Zuständen

$U = \langle \hat{H} \rangle$ ... innere Energie

$N = \langle \hat{N} \rangle$ ... mittlere Teilchenzahl

- Vergleich: s. Folie

b) Definition: Dichtematrix = statist. Operator für stat. Ensemble

$$\boxed{\hat{\varrho} := \sum_s |s\rangle P(s) \langle s|} \qquad (21.1)$$

mit $\{|s\rangle\}$ ein VONS

- Mittelwert: $\langle \hat{A} \rangle = \sum_s P(s) \langle s | \hat{A} | s \rangle$ & $\langle s | t \rangle = \delta_{ts}$

$1 = \sum_t |t\rangle\langle t|$

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \sum_s \langle s | \hat{\varrho} \hat{A} | s \rangle := \mathrm{tr}\,(\hat{\varrho} \hat{A})} \qquad (21.2)$$

.... Spurbildung (engl.: trace) für Operatoren

- Normierung: $\hat{A} = 1$

$$\boxed{\mathrm{tr}\,\hat{\varrho} = \sum_s P(s) = 1} \qquad (21.3)$$

$$\boxed{P(s) = \langle s | \hat{\varrho} | s \rangle} \qquad (21.4)$$

- Es gilt:

$$\boxed{\mathrm{tr}(\hat{\rho}^2) \underset{\uparrow}{=} \sum_s P(s)^2 \underset{\uparrow}{\leq} 1} \quad (21.5)$$

o.B. jedes $P(s) \leq 1$

„Jeder positiv semi-definite Operator ($\langle s|\hat{\rho}|s\rangle \geq 0$) mit $\mathrm{tr}\,\hat{\rho} = 1$ ist als Dichtematrix geeignet"

c) reine Zustände:

- $P(s) = \delta_{sm} \longrightarrow \boxed{\hat{\rho} = |m\rangle\langle m| \underset{\text{o.B.}}{\Longleftrightarrow} \hat{\rho}^2 = \hat{\rho}}$ (21.6)
- Nernstsches Postulat: $T \to 0$, Grundzustand $|1\rangle$

$$\longrightarrow \boxed{\lim_{T\to 0}(\hat{\rho}^2 - \hat{\rho}) = \hat{O}} \quad (21.7)$$

21.2 Satz von Liouville

- Zeitentwicklung von $\hat{\rho}$:

(i) Schrödinger-Gl.: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|s\rangle = \hat{H}|s\rangle$ (21.8)

adjung.: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle s| = -\langle s|\hat{H}$

(ii) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = \sum_s \{\hat{H}\underbrace{|s\rangle P(s)\langle s|}_{\hat{\rho}} - \underbrace{|s\rangle P(s)\langle s|}_{\hat{\rho}}\hat{H}\}$

$\hat{\rho} = \sum_s P(s)|s\rangle\langle s|$

$$\longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]} \quad (21.9)$$

... von-Neuman-Gleichung

Bem: (i) vgl. Liouville-Gl. (klassisch): $\frac{\partial}{\partial t}\rho = \{H, \rho\}$

(ii) TD-GG: $\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \hat{O} \longleftrightarrow [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$!

21.3 Thermodynam. Ensembles

a) mikrokanonisch: $g(U,V,N)$ ... Zahl der Zustände $|s\rangle$ mit U,V,N

$$P(s) = \frac{1}{g} \longrightarrow \boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{g} \sum_s{}' |s\rangle\langle s|} \quad (21.10)$$

$\sum'$... nur $|s\rangle$ mit U,V,N

b) kanonisch

- $P(s) = \frac{1}{Z} e^{-\beta U_s} \overset{\hat{H}|s\rangle = U_s|s\rangle}{=} \frac{1}{Z} \langle s| e^{-\beta \hat{H}} |s\rangle$

$$\xrightarrow{(21.4)} \boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}} \quad (21.11)$$

- Zustandssumme: $Z = \sum_s e^{-\beta U_s} = \sum_s \langle s| e^{-\beta \hat{H}} |s\rangle$

$$\longrightarrow \boxed{Z = \mathrm{tr}\, e^{-\beta \hat{H}}} \quad (21.12)$$

$$\longrightarrow F = -k_B T \ln Z \text{ etc}$$

c) großkanonisch:

- analog: $$\boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{Z_G} e^{\beta(\mu \hat{N} - \hat{H})}} \quad (21.13) \quad \text{mit} \quad \boxed{Z_G = \mathrm{tr}\, e^{\beta(\mu \hat{N} - \hat{H})}} \quad (21.14)$$

mit $\hat{N}$ ... Teilchenzahloperator

Bsp: harm. Oszillator: $\hat{N} = \sum_i a_i^+ a$ ... zählt alle Schwingungsquanten!