Gerhard Kahl & Florian Libisch

STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

6. Tutoriumstermin (24.5.2019)

T20. Berechnen Sie die Zustandsdichte eines idealen Quantengases in einer Box mit harten Wänden und Kantenlänge L in

(a) drei Dimensionen.

(b) zwei Dimensionen.

(c) einer Dimension.

Geben Sie in allen drei Fällen auch den Zusammenhang zwischen Energie und Druck an.

Lösung: Neben vielen anderen Wegen die Zustandsdichte $D(E)$ eines solchen Systems zu ermitteln werden wir die Summe über Besetzungszahlen als Integral approximieren und dann mit Hilfe der entsprechenden k-Raum Quantisierung sowie der Dispersionsrelation auf ein Integral über Energien umschreiben und die Zustandsdichte einfach "ablesen":

In allen Dimensionen gilt:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \vec{k}_n^2}{2m}$$
$$(\vec{k}_n)_i = \frac{n_i \pi}{L}$$

1D)

$$\sum_{n_i} \to \int dn_i = \int \frac{L}{\pi} dk = \int \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}} \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{m}{\hbar^2} dE = \int \underbrace{\frac{L\sqrt{m}}{\pi\sqrt{2}\hbar} \frac{1}{\sqrt{E}}}_{D(E)} dE$$

2D)

$$\sum_{n_i^{(x)}, n_i^{(y)}} \to \int d^2 n_i = \int \frac{L^2}{\pi^2} d^2 k_i = \int \frac{L^2}{\pi^2} \frac{2\pi}{4} \underline{\underline{k}} dk = \int \frac{L^2}{\pi^2} \frac{2\pi}{4} \frac{m}{\hbar^2} dE = \int \underbrace{\frac{L^2 m}{\pi 2 \hbar^2}}_{D(E)} dE$$

3D)

$$\sum_{n_i^{(x)}, n_i^{(y)}, n_i^{(z)}} \to \int d^3 n_i = \int \frac{L^3}{\pi^3} d^3 k_i = \int \frac{L^3}{\pi^3} \frac{4\pi}{8} \underline{\underline{k}}^2 dk = \int \frac{L^3}{\pi^3} \frac{4\pi}{8} \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sqrt{E} dE = \int \underbrace{\frac{L^3 m^{3/2}}{\pi^2 \sqrt{2} \hbar^3} \sqrt{E}}_{D(E)} dE$$

Die Faktoren $\frac{1}{2^d}$ schneiden jeweils nur den "positiven Bereich"aus der d-dimensionalen Kugel im k-Raum heraus (Darüber können wir gerne noch diskutieren aber ich finde negative k-Vektoren machen für gebundene Zustände keinen Sinn da sie nur die globale Phase ändern (Vgl. Vorzeichen von $\vec{k}$ bei periodischen Randbedingungen ändert Laufrichtung der Welle).

Zusammenhang zwischen Energie und Druck:

$$J = -PV = -\int_0^\infty \hat{D}(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

Mit $\hat{D}(E) = \int_0^E D(\epsilon) d\epsilon$ sieht man schnell:

$$D^{1D}(\epsilon) = \alpha_1 \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \qquad \to \qquad \hat{D}^{1D}(\epsilon) = \alpha_1 2\sqrt{\epsilon} \qquad \to \qquad 2\epsilon D^{1D}(\epsilon) = \hat{D}^{1D}(\epsilon)$$

$$D^{2D}(\epsilon) = \alpha_2 \qquad \to \qquad \hat{D}^{2D}(\epsilon) = \alpha_2 \epsilon \qquad \to \qquad \epsilon D^{2D}(\epsilon) = \hat{D}^{2D}(\epsilon)$$

$$D^{2D}(\epsilon) = \alpha_3 \sqrt{\epsilon} \qquad \to \qquad \hat{D}^{3D}(\epsilon) = \alpha_3 \frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \qquad \to \qquad \frac{2}{3} \epsilon D^{3D}(\epsilon) = \hat{D}^{3D}(\epsilon)$$

Damit ist auch schon das "dimensional scaling"gezeigt:

$$PV = \frac{2}{d} \langle E \rangle$$

T21. Betrachten Sie ein Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen im Magnetfeld $|s_z\rangle$, mit $s = +, -$ und $H|\pm_z\rangle = \pm\mu_B B |\pm_z\rangle$. Gegeben sei die Wellenfunktion

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+_z\rangle + e^{i\alpha} |-_z\rangle \Big)$$

(a) Berechnen Sie die Erwartungswerte der Energie für die folgenden Fälle:

- Das System ist im reinen Zustand ϕ_1.
- Das System ist in einem Gemisch zwischen $|+\rangle$ und $e^{i\alpha}|-\rangle$, mit klassischen Wahrscheinlichkeiten $p_\pm = \frac{1}{2}$.

Der Operator für eine Spin-Messung in x-Richtung S_x ist definiert über

$$S_x |+\rangle = |-\rangle \qquad S_x |-\rangle = |+\rangle$$

(b) Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle S_x \rangle$ für die folgenden Fälle:

- Das System ist im reinen Zustand ϕ_1.
- Das System ist in einem Gemisch zwischen $|+\rangle$ und $e^{i\alpha}|-\rangle$, mit klassischen Wahrscheinlichkeiten $p_\pm = \frac{1}{2}$.

Lösung:

$$|-_z\rangle = |\downarrow\rangle$$
$$|+_z\rangle = |\uparrow\rangle$$

a)

"pure"

$$\langle E\rangle = \langle\Phi_1|\hat{H}|\Phi_1\rangle = \frac{1}{2}\Big(\langle\uparrow| + e^{-i\alpha}\langle\downarrow|\Big)\Big(-\mu_B B|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + \mu_B B|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\Big)\Big(|\uparrow\rangle + e^{i\alpha}|\downarrow\rangle\Big) =$$
$$= -\mu_B B + \mu_B B = 0$$

"mixed"

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$
$$\hat{H} = -\mu_B B|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + \mu_B B|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$
$$\hat{\rho}\hat{H} = -\frac{\mu_B B}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{\mu_B B}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$

$$\langle E\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{H}] = \langle\downarrow|\hat{\rho}\hat{H}|\downarrow\rangle + \langle\uparrow|\hat{\rho}\hat{H}|\uparrow\rangle = -\mu_B B + \mu_B B = 0$$

b)

"pure"

$$\langle\hat{S}_x\rangle = \langle\Phi_1|\hat{S}_x|\Phi_1\rangle = \frac{1}{2}\Big(\underbrace{\langle\downarrow|\hat{S}_x|\downarrow\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle\uparrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle}_{=0} + e^{-i\alpha}\underbrace{\langle\downarrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle}_{=1} + e^{i\alpha}\underbrace{\langle\uparrow|\hat{S}_x|\downarrow\rangle}_{=1}\Big) =$$
$$= \frac{e^{i\alpha} + e^{i\alpha}}{2} = \cos(\alpha)$$

"mixed"

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$
$$\hat{S}_x = |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$$
$$\hat{\rho}\hat{S}_x = \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\downarrow|$$

$$\langle\hat{S}_x\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{S}_x] = \langle\downarrow|\hat{\rho}\hat{S}_x|\downarrow\rangle + \langle\uparrow|\hat{\rho}\hat{S}_x|\uparrow\rangle = 0$$

T22. Betrachten Sie ein ideales Bose-Gas in zwei Dimensionen ($\varepsilon = \hbar^2 k^2/(2m)$).

(a) Berechnen Sie das große Potential, den Druck und die Teilchenzahl. Verwenden Sie die Zustandsdichte aus Beispiel T21, und verwenden Sie geeignete $g_\nu(z)$.

(b) Berechnen Sie im Hochtemperaturlimes die Gasgleichung für das Quantengas bis zur Quantenkorrektur erster Ordnung.

(c) Gibt es für dieses System Bose-Einstein-Kondensation? Begründen Sie ihre Antwort.

(d) Berechnen Sie die Wärmekapazität des Gases bei konstantem Volumen mittels $C_V = (\partial_T E)_{N,V}$. Hinweis: Benutzen Sie die Formelsammlung für $\partial_z g_\nu(z)$. Geschicktes Auswerten von $(\partial_T N)_{N,V}$ liefert einen Ausdruck für $(z^{-1}\partial_T z)_{N,V}$.

(e) Leiten sie im Hochtemperaturlimes eine Quantenkorrektur erster Ordnung zum klassischen Resultat für C_V ab.

Lösung: Wenn wir die Zustandsdichte $D(E) = \frac{mL^2}{2\pi\hbar} = D$ aus dem ersten Beispiel übernehmen lässt sich J einfach mittels partieller Integration als $g_\nu(z)$ schreiben:

a)

"J"

$$J = \sum_i k_B T \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}) = \int k_B T D \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}) d\epsilon + \underbrace{J_{\epsilon=0}}_{k_B T \ln(1-e^{\beta\mu})} =$$

$$= \underbrace{k_B T D \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_i-\mu)})|_0^\infty}_{=0} - \int D\epsilon \frac{e^{-\beta(\epsilon-\mu)}}{1 - e^{-\beta(\epsilon-\mu)}} d\epsilon + k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu}) =$$

$$= -\frac{D}{\beta^2} \underbrace{\int \frac{(\epsilon\beta)}{e^{(\beta\epsilon)} z^{-1} - 1} d(\epsilon\beta)}_{g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1} - 1} dx} + k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu}) \underbrace{=}_{\Gamma(2)=1} -D k_B^2 T^2 g_2(z) + k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu})$$

"P"

$$J = -PV \qquad \rightarrow \qquad P = -\frac{D}{\beta^2 V} g_2(z) + \frac{1}{\beta V} \ln(1 - e^{\beta\mu})$$

"N"

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = -\frac{\partial}{\partial \mu}\left[-\frac{D}{\beta^2} g_2(z) + \frac{1}{\beta} \ln(1 - z)\right]$$

Die Ableitung nach μ schreiben wir in eine z-Ableitung um:

$$z = e^{\beta\mu} \quad \rightarrow \quad \frac{dz}{d\mu} = \beta z \quad \rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial \mu} = \beta z \frac{\partial}{\partial z}$$

Weiters nutzen wir die "Ableitungs Eigenschaft" von $g_\nu(z)$:

$$\frac{\partial}{\partial z} g_\nu(z) = \frac{1}{z} g_{\nu-1}(z)$$

Damit ergibt sich $\langle N \rangle$ zu:

$$\langle N \rangle = \frac{D}{\beta} g_1(z) + \frac{z}{1-z}$$

b)

$$\lim_{T\to\infty} \beta\mu = -\infty \qquad \to \qquad z = e^{\beta\mu} << 1$$

Da μ schneller divergiert als β verschwindet können wir im Hoch-Temperatur Limes $g_\nu(z)$ für kleine z entwickeln:

$$g_\nu(z) \approx \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu}$$

$$J \approx -\frac{D}{\beta^2}\left[z + \frac{z^2}{4}\right] + k_B T \underbrace{\ln(1-z)}_{=0} \tag{1}$$

$$\langle N \rangle \approx \frac{D}{\beta}\left[z + \frac{z^2}{2}\right] \qquad \to \qquad z = \frac{\beta}{D}\langle N \rangle \left[1 - \frac{\beta \langle N \rangle}{D^2}\right] + \mathcal{O}(z^4) \tag{2}$$

Aus (1) und (2) folgt:

$$PV = \frac{1}{\beta}\langle N \rangle \left[1 - \frac{\langle N \rangle}{4D}\right] = k_B T \langle N \rangle \left[1 - \frac{\langle N \rangle \beta}{4D}\right]$$

c)

Wenn wir die Beiträge zu $\langle N \rangle$ der angeregten Zustände als auch die des Grundzustands bei niedrigen Temperaturen ($T \to 0,\ \mu \to 0,\ z \to 1$) betrachten sehen wir das beide Terme divergieren und somit nicht nur der Grundzustand makroskopisch besetzt wird. In 2D kommt es also zu keiner BE-Kondensation:

$$g_1(z) = \int_0^\infty \frac{1}{e^x - 1} dx \to \infty$$

$$\lim_{z\to 1} \langle N \rangle = \underbrace{\frac{\beta}{D} g_1(1)}_{\to\infty} + \underbrace{\frac{1}{1-1}}_{\to\infty}$$

d)

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon D f_{BE}(\epsilon) d\epsilon = ... = D k_B^2 T^2 g_2(z)$$

$$c_V = (\partial_T E)_{N,V} = D k_B^2 \Big[2T g_2(z) + T^2 \partial_T g_2(z) \Big] = D k_B^2 * \Big[2T g_2(z) + T^2 \underbrace{\partial_z g_2(z)}_{z^{-1} g_1(z)} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,V} \Big]$$

Für $T > T_c$ kann der Grundzustands Beitrag zu $\langle N \rangle$ vernachlässigt werden und wir können einen Ausdruck für $(\frac{\partial z}{\partial T})_{N,V}$ wiefolgt finden:

$$(\partial_T N)_{N,V} = 0 = \partial_T \Big[D k_B T g_1(z) \Big] = D k_B g_1(z) + D k_B T z^{-1} g_0(z) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,V}$$

$$\to \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,V} = - \frac{g_1(z) z}{g_0(z) T}$$

$$c_V = D k_B^2 * \left[2T g_2(z) - T^2 z^{-1} g_1(z) \frac{g_1(z) z}{g_0(z) T} \right] = N k_B \left[2 \frac{g_2(z)}{g_1(z)} - \frac{g_1(z)}{g_0(z)} \right]$$

e) Für hohe Temperaturen entwickeln wir wieder:

$$g_\nu(z) \approx \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu}$$

$$\to c_V = N k_B \left[2 \frac{z + z^2/4 + ...}{z + z^2/2 + ...} - \frac{z + z^2/2 + ...}{z + z^2 + ...} \right] =$$

$$= N k_B \left[2 \frac{1 + z/4}{1 + z/2} - \frac{1 + z/2}{1 + z} \right] + \mathcal{O}(z^2) =$$

$$= N k_B \Big[2(1 + z/4)(1 - z/2) - (1 + z/2)(1 - z) \Big] + \mathcal{O}(z^2) =$$

$$= N k_B + \mathcal{O}(z^2)$$

Zu kreuzen: 20; 21a, 21b; 22a, 22b, 22c, 22d, 22e