Moderne Theoretische Physik II
(Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Hantian Zhang, Manuel Egner **WS 23/24 – Blatt 13**

Abgabe: Fr., 09.02.2024, 11:30 Uhr; Besprechung: Di., 13.02.2024

---

1 Ideales Bose Gas in zwei Dimensionen

(i) Geben Sie die großkanonische Zustandssumme $Z_G(\mu, V, T)$ für ein zweidimensionales Bose Gas an.

solution

Die großkanonische Zustandssumme ist gegeben über

$$Z_G = \sum_{N,n} e^{-\beta(E_n - \mu N)} = \sum_{n_\lambda} e^{-\beta \sum_\lambda n_\lambda(\epsilon_\lambda - \mu)} = \prod_\lambda \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta n_\lambda(\epsilon_\lambda - \mu)} = \prod_\lambda \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}},$$

wobei wir die Energie für das zweidimensionale Bose-Gas schreiben können als

$$\epsilon = \frac{1}{2m}\left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^2 \left(n_x^2 + n_y^2\right)$$

(ii) Bestimmen Sie die mittlere Anzahl der Teilchen pro Flächeneinheit als Funktion von μ und T. Hierbei können Sie für die Energie der einzelnen Bosonen

$$\epsilon_\lambda = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^2 \left(n_x^2 + n_y^2\right)$$

verwenden.

solution

Wir bestimmen zuerst das großkanonische Potential

$$\Omega = -kT \log Z_G = kT \sum_\lambda \log\left[1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right].$$

Daraus können wir die mittlere Anzahl der Teilchen bestimmen über

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\bigg|_{T,V} = \sum_\lambda \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} - 1} = \sum_\lambda \langle n_\lambda \rangle = \sum_\lambda n_B(\epsilon_\lambda)$$

Die Summe über λ könnnen wir umschreiben zu

$$\sum_\lambda = \sum_{n_x, n_y} = \int \mathrm{d}n_x \mathrm{d}n_y = 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}n \; n = 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}p \; p \frac{L^2}{(2\pi\hbar)^2}$$

Damit ergibt sich für die Anzahl der Teilchen pro Flächeneinheit

$$\begin{aligned}\frac{\langle N \rangle}{L^2} &= \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \mathrm{d}p \; p \frac{1}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)} - 1} \\ &= -\frac{mkT}{2\pi\hbar} \log\left[1 - e^{\beta\mu}\right]\end{aligned}$$

(iii) Zeigen Sie, dass in diesem Beispiel keine Bose-Einstein-Kondensation auftritt.

solution

Ob Bose-Einstein-Kondensation stattfindet oder nicht, hängt davon ab, ob der Ausdruck

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \nu(\epsilon) n_B(\epsilon, \mu = 0) = \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\nu(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1},$$

bzw

$$\int_0^\infty \mathrm{d}p \; p \nu(\epsilon(p)) n_B(\epsilon(p), \mu = 0) = \int_0^\infty \mathrm{d}p \; p \frac{\nu(\epsilon(p))}{e^{\beta \frac{p^2}{2m}} - 1},$$

divergiert (keine BEK) oder konvergiert (BEK). Für die Zustandsdichte gilt in 3 Dimensionen $\nu(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2} \propto p$, in 2 Dimensionen $\nu(\epsilon) \propto \epsilon^0 \propto p^0$ und in 1 Dimension $\nu(\epsilon) \propto \epsilon^{-1/2} \propto p{-}1$. Für 3 Dimensionen ist das Integral konvergent, für 2 bzw 1 Dimensionen divergent.

---

2 (*) N anharmonische Oszillatoren (5 Punkte)

Berechnen Sie mit Hilfe der klassischen Statistik die mittlere Energie und den Beitrag zur spezifischen Wärme im Grenzfall kleiner Temperaturen für ein System von N unabhängingen anharmonischen Oszillatoren mit der Hamilton-Funktion

$$H \;=\; \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{m\omega^2\vec{r}^{\,2}}{2} + \gamma\vec{r}^{\,4}\,, \quad \gamma > 0\ ,$$

wobei der letzte Term als kleine Störung aufgefasst werden kann.

Solution

For the partition function, we firstly have

$$Z_N = \left(\int \frac{d^3p\, d^3x}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta\left(\frac{\vec{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}+\gamma\vec{r}^4\right)} \right)^N$$
$$= \left(\frac{1}{\lambda^3} \int d^3\vec{r}\, e^{-\beta\left(\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}+\gamma\vec{r}^4\right)} \right)^N \tag{1}$$

with $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}}$. Now we proceed to calculate the partition function in the $\gamma = 0$ case

$$Z_0 = \left(\frac{1}{\lambda^3} \int d^3\vec{r}\, e^{-\beta\left(\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}\right)} \right)^N = \left(\frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}} \right)^{3N}$$
$$= \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^{3N}, \tag{2}$$

and $\omega_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0}$ with $H_0 = H|_{\gamma\to 0}$. Then the corresponding theormal dynamic quantities F_0, E_0, C_0 can be calculated by the standard formulas. We obtain

$$F_0 = -kT \log Z_0$$
$$E_0 = F - T\frac{\partial F}{\partial T} = 3kTN$$
$$C_0 = -T\frac{\partial^2 F}{\partial^2 T} = 3kN$$

In the next step, we include the γ-induced part, and compute the quantity for single particle

$$F_1^{(1)} = \mathrm{Tr}[w_0 \gamma \vec{r}^4] = \int \frac{d^3p\, d^3x}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{Z_0^{(1)}} e^{-\beta H_0} \gamma \vec{r}^4$$
$$= \frac{\gamma}{\lambda^3} \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^3 \int d^3\vec{r} e^{-\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2kT}} \vec{r}^4$$
$$= 4\pi\gamma \left(\frac{\hbar\omega}{kT\lambda} \right)^3 \int_0^\infty dr\, r^6 e^{-\frac{m\omega^2 r^2}{2kT}}$$
$$= 4\pi\gamma \left(\frac{\hbar\omega}{kT\lambda} \right)^3 \left(15\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{kT}{m\omega^2} \right)^{\frac{7}{2}} \right). \tag{3}$$

Then have $F_1 = N\, F_1^{(1)}$, and we can derive corresponding E_1 and C_1. The final results can be assembled by $E = E_0 + E_1$ and $C = C_0 + C_1$. We find

$$E_1 = -15\gamma \left(\frac{kT}{m\omega^2} \right)^2$$
$$C_1 = -30\gamma \left(\frac{k}{m\omega^2} \right)^2 T$$

3 (*) Kanonische Verteilung für magnetische Spins (5 Punkte)

Ein magnetisches System habe Energieaustausch mit einem Wärmebad. Zusätzlich sei seine Magnetisierung an die des Wärmebads gekoppelt, sodass die Mittelwerte von Energie, $\langle E \rangle$, und Magnetisierung, $\langle M \rangle$, des Systems vorgegeben sind. Es soll ein Ensemble mit N solchen Systemen betrachtet werden. E_r und M_s seien die mögliche Gesmatenergie bzw. Magnetisierung der einzelnen Systeme und $n_{r,s}$ ist die Zahl der Systeme in dem Ensemble, die Energie E_r und Magnetisierung M_s haben.

(i) Geben Sie die 3 Zwangsbedingungen an.

Solution

We denote $w(n) = \frac{n_{r,s}}{N}$ and the simplified summation notation $\sum_n := \sum_{r,s}$

$$\sum_n w(n) = 1 \tag{4}$$

$$\sum_n E_r\, w(n) = \langle E \rangle \tag{5}$$

$$\sum_n M_s\, w(n) = \langle M \rangle \tag{6}$$

(ii) Zeigen Sie, dass die Besetzungswahrscheinlichkeit $\langle n_{r,s} \rangle / N$ gegeben ist durch

$$\frac{\langle n_{r,s} \rangle}{N} = Ce^{\frac{1}{k}(\beta E_r + \gamma M_s)}\,.$$

Benutzen Sie hierfür die Methode der Lagrangemultiplikatoren um die Zwangsbedingungen aus der ersten Teilaufgabe einzubinden. Im zu zeigenden Ergebnis sind β und γ zwei der damit eingeführten Lagrangemultiplikatoren. Geben Sie die Konstante C an.

Solution

Use the Lagrangian multiplier methods, we have

$$\bar{S} = -k\sum_n w(n)\log(w(n)) + \alpha\left(\sum_n w(n) - 1\right) + \beta\left(\sum_n E_r w(n) - \langle E\rangle\right) + \gamma\left(\sum_n M_s w(n) - \langle M\rangle\right), \quad (7)$$

and

$$\frac{\partial\bar{S}}{\partial w(n)} = -k\log(w(n)) - k + \alpha + \beta E_n + \gamma M_s = 0\,, \quad (8)$$

$$\frac{\partial\bar{S}}{\partial\alpha} = \sum_n w(n) - 1 = 0\,, \quad (9)$$

$$\frac{\partial\bar{S}}{\partial\beta} = \sum_n E_r w(n) - \langle E\rangle = 0\,, \quad (10)$$

$$\frac{\partial\bar{S}}{\partial\gamma} = \sum_n M_s w(n) - \langle M\rangle = 0\,. \quad (11)$$

These lead to

$$\log(w(n)) = -1 + \frac{\alpha}{k} + \frac{\beta}{k}E_r + \frac{\gamma}{k}M_s\,, \quad (12)$$

$$w(n) = e^{-1+\frac{\alpha}{k}}e^{\frac{\beta}{k}E_r+\frac{\gamma}{k}M_s}\,, \quad (13)$$

and we have $C = e^{-1+\frac{\alpha}{k}}$.
We can also have

$$w(n) := \frac{1}{Z_k}e^{\frac{1}{k}(\beta E_r+\gamma M_s)}\,, \quad (14)$$

$$Z_k := \sum_n e^{\frac{1}{k}(\beta E_r+\gamma M_s)} \quad (15)$$

with $\sum_n w(n) = 1$ and $C = 1/Z_k$.

(iii) $\Omega(E, M)$ sei der mikrokanonische Entartungsgrad. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit $P(E, M)$, das System in einem Zustand der Energie E und der Magnetisierung M zu finden?

Solution

$$P(E, M) = \Omega(E, M)\, w(n) \quad (16)$$

(iv) Geben Sie die Bedingungsgleichungen für die wahrscheinlichste Energie ($\bar{E}$) bzw. Magnetisierung ($\bar{M}$) ($P(E, M)$ maximal!) an. Bestimmen Sie das Differential der inneren Energie $\mathrm{d}E = \mathrm{d}\langle E\rangle = \mathrm{d}\bar{E}$ für ein System mit Magnetisierung. Nutzen Sie nun die Beziehung zwischen der Entropie S und $\Omega(E, M)$ aus, um Ω zu eliminieren und so die Lagrange-Parameter β und γ zu bestimmen.

Solution

Use

$$\frac{\partial P}{\partial E} = Ce^{\frac{1}{k}(\beta E_r + \gamma M_s)} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial E} + \Omega(E, M) \frac{\beta}{k} \right) = 0 \,, \tag{17}$$

$$\frac{\partial P}{\partial M} = Ce^{\frac{1}{k}(\beta E_r + \gamma M_s)} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial M} + \Omega(E, M) \frac{\gamma}{k} \right) = 0 \,, \tag{18}$$

and we obtain

$$\frac{\beta}{k} = -\frac{\partial \Omega}{\partial E} / \Omega \,, \qquad \frac{\gamma}{k} = -\frac{\partial \Omega}{\partial M} / \Omega \,. \tag{19}$$

We then have

$$S = k \log \Omega(E, M) \,, \tag{20}$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{k}{\Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial E} \,, \tag{21}$$

$$\frac{\partial S}{\partial M} = \frac{k}{\Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial M} \,, \tag{22}$$

which amount to

$$\beta = -\frac{\partial S}{\partial E} \,, \qquad \gamma = -\frac{\partial S}{\partial M} \tag{23}$$

We then use

$$dU = TdS + HdM \Rightarrow dS = \frac{1}{T} dU - \frac{H}{T} dM \,, \tag{24}$$

we obtain $\beta = -\frac{1}{T}$ and $\gamma = \frac{H}{T}$ and

$$w(n) := \frac{1}{Z_k} e^{-\frac{E_r}{kT} + \frac{HM_s}{kT}} \,, \tag{25}$$

$$Z_k := \sum_n e^{-\frac{E_r}{kT} + \frac{HM_s}{kT}} \tag{26}$$

(v) Wie hängt in diesem Fall die freie Energie $F = E - TS - HM$ mit der kanonische Zustandssumme Z_K zusammen?

Solution

We use

$$
\begin{aligned}
F = E - TS - HM &= \sum_n E_r w(n) + Tk \sum_n w(n)\log(w(n)) - H \sum_n M_s w(n) \\
&= \sum_n \left[E_r w(n) + kTw(n) \left(-\log(Z_k) - \frac{E_r}{kT} + \frac{HM_s}{kT} \right) - HM_s w(n) \right] \\
&= -kT \log(Z_k)\,, \qquad (27)
\end{aligned}
$$

and we obtain

$$Z_k = e^{-\frac{F}{kT}}\,. \qquad (28)$$

---

4 Dichteoperator eines freien Teilchens

Berechnen Sie die Matrixelemente $\langle \vec{x}' | \rho | \vec{x} \rangle$ des Dichteoperators $\rho = e^{-\beta H}/\mathrm{Sp}(e^{-\beta H})$ für ein freies Teilchen ($H = \vec{p}^{\,2}/(2m)$).

Hinweis: Nehmen Sie bei der Berechnung der Spur an, dass sich das Teilchen in einem Kasten mit Volumen V befindet. Sie dürfen folgendes Integral verwenden:

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} e^{-\beta\hbar^2 \vec{k}^2/(2m) + i\vec{k}\vec{x}} = \frac{1}{\lambda^3} e^{-\frac{\pi x^2}{\lambda^2}}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}},$$

solution

Wir können den Dichteoperator schreiben als

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\right]}$$

Für das freie Teilchen gilt $H|\Psi_{\vec{k}}\rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}|\Psi_{\vec{k}}\rangle$. Das Teilchen befinde sich in einem Kasten mit der Seitenlänge L; für die Wellenfunktion erhalten wir also $|\Psi_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ mit $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\left(n_x, n_y, n_z\right)^T$. Die Wellenfunktionen $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$ sind orthonormiert

$$\langle \Psi_{\vec{k}} | \Psi_{\vec{k}} \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

und bilden ein vollständiges Set:

$$\sum_{\vec{k}} \Psi^*_{\vec{k}}(\vec{x}')\Psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta(\vec{x}' - \vec{x})$$

Die Zustandssumme erhalten wir über

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\right] \\ &= \sum_{\vec{k}} \langle \Psi_{\vec{k}} | e^{-\beta H} | \Psi_{\vec{k}} \rangle \\ &= \sum_{\vec{k}} e^{-\frac{\beta \hbar^2 \vec{k}^2}{2m}}. \end{aligned}$$

Wir schreiben die Summe um ein in Integral über $\vec{k}$ und erhalten

$$\begin{aligned} Z &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k \; e^{-\frac{\beta \hbar^2 \vec{k}^2}{2m}} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \\ &= \frac{V}{\lambda^3}, \end{aligned}$$

wobei wir $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}}$ definiert haben. Wir erhalten damit für den Dichtoperator im Impulsraum

$$\langle \Psi_{\vec{k}'} | \rho | \Psi_{\vec{k}} \rangle = \frac{\lambda^3}{V} e^{-\frac{\beta \hbar^2 \vec{k}^2}{2m}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}.$$

Wir suchen den Ausdruck im Ortsraum. Um diesen zu finden können wir die gerade gefundene Relation verwenden über

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | \rho | \vec{x} \rangle &= \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \langle \vec{x}' | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \rho | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{x} \rangle \\ &= \sum_{\vec{k}', \vec{k}} \Psi_{\vec{k}'}(\vec{x'}) \left(\frac{\lambda^3}{V} e^{-\frac{\beta \hbar^2 \vec{k}^2}{2m}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \right) \Psi^*_{\vec{k}}(\vec{x}) \\ &= \frac{\lambda^3}{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k e^{-\frac{\beta \hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + i\vec{k}(\vec{x}' - \vec{x})} \\ &= \frac{1}{V} e^{-\frac{\pi(\vec{x}' - \vec{x})}{\lambda^2}} \end{aligned}$$