Moderne Theoretische Physik II
(Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Daniel Stremmer

WS 25/26 – Blatt 13 Abgabe: 13.02.2026, 11:30 Uhr; Besprechung: 17.02.2026

Aufgabe 1: Ideales Bose Gas in zwei Dimensionen

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

solution

The grand canonical partition function is given by

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

where the energy of the two-dimensional Bose gas is

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

b) 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

We calculate first the grand canonical potential

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

The average number of particles reads then

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

We can write the sum over λ as

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

Finally we obtain for the average number of particle per volume

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

Note: in the lecture the notation "N" and not "$\langle N\rangle$" is used.

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

solution

In order to find whether we have Bose-Einstein condensation or not, we have to check if the expression

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

i.e.

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

diverges (no BEK) or converges (BEK). For the state density we have $\nu(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2} \propto p$ in three dimensions, $\nu(\epsilon) \propto \epsilon^0 \propto p^0$ in two dimensions and $\nu(\epsilon) \propto \epsilon^{-1/2} \propto p^{-1}$ in one dimension. For three dimensions the integral is convergent, but for two or one it is divergent.

Aufgabe 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 have

$$
\begin{aligned}
Z_N &= \left(\int \frac{d^3p\, d^3x}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta\left(\frac{\vec{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}+\gamma\vec{r}^4\right)}\right)^N \\
&= \left(\frac{1}{\lambda^3}\int d^3\vec{r}\, e^{-\beta\left(\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}+\gamma\vec{r}^4\right)}\right)^N \\
&= Z_0\left(1-\frac{\beta}{Z_0^{(1)}\lambda^3}\int d^3\vec{r}\, e^{-\beta\left(\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}\right)}\gamma\,\vec{r}^4+\mathcal{O}(\gamma^2)\right)^N = Z_0\left(1+\gamma\frac{Z_1^{(1)}}{Z_0^{(1)}}+\mathcal{O}(\gamma^2)\right)^N
\end{aligned}
$$

with $\lambda=\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m}}$. In the last line we have already expanded the integrand and introduced Z_0 which is the partition function with $\gamma=0$ and the superscript $^{(1)}$ denotes terms that are associated to single particle quantities. Now we proceed to calculate the partition function in the $\gamma=0$ case

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

The next expansion term is given by

$$
\begin{aligned}
\frac{Z_1^{(1)}}{Z_0^{(1)}} &= -\frac{\beta}{Z_0^{(1)}\lambda^3}\int d^3\vec{r}\, e^{-\beta\left(\frac{m\omega^2\vec{r}^2}{2}\right)}\vec{r}^4 = -\frac{4\pi\beta}{Z_0^{(1)}\lambda^3}\int_0^\infty dr e^{-\beta\left(\frac{m\omega^2 r^2}{2}\right)}r^4 \\
&= -\frac{4\pi\beta}{Z_0^{(1)}\lambda^3}\left(15\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(\frac{kT}{m\omega^2}\right)^{\frac{7}{2}}\right) = -15\beta\left(\frac{kT}{m\omega^2}\right)^2
\end{aligned}
$$

Then the corresponding thermodynamic quantities F_0, E_0, C_0 can be calculated by the standard formulas. We obtain

$$
\begin{aligned}
F_0 &= -kT\log Z_0 = -3NkT\log(kT/(\hbar\omega)) \\
E_0 &= F - T\frac{\partial F}{\partial T} = 3kTN \\
C_0 &= -T\frac{\partial^2 F}{\partial^2 T} = 3kN
\end{aligned}
$$

In the next step, we include the γ-induced part by perturbation

$$
\begin{aligned}
F &= -kT\log Z_N = -kT\log\left(Z_0(1+\gamma Z_1^{(1)}/Z_0^{(1)}+\dots)^N\right) = -kT\log Z_0 - NkT\gamma\frac{Z_1^{(0)}}{Z_0^{(1)}} \\
&= -kT\log Z_0 + 15N\gamma\left(\frac{kT}{m\omega^2}\right)^2
\end{aligned}
$$

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

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

Aufgabe 3: (*) Kanonische Verteilung für magnetische Spins (5 Punkte)
Ein magnetisches System habe Energieaustausch mit einem Wärmebad. Zusätzlich sei seine Magnetisierung an das Wärmebad gekoppelt, so dass 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.

a) Geben Sie die drei Zwangsbedingungen an, die man zum Aufstellen der verallgemeinerten Entropie benötigt.

Solution

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

$$\sum_n w(n) = 1$$
$$\sum_n E_r \, w(n) = \langle E \rangle$$
$$\sum_n M_s \, w(n) = \langle M \rangle$$

b) Zeigen Sie, dass die Besetzungswahrscheinlichkeit $n_{r,s}/N$ gegeben ist durch

$$\frac{n_{r,s}}{N} = C e^{\frac{1}{k}(\gamma E_r + \delta M_s)} .$$

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

Solution

Use the Lagrangian multiplier methods, we have

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

and

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{S}}{\partial w(n)} &= -k\log(w(n)) - k + \alpha + \gamma E_n + \delta M_s = 0\,, \\ \frac{\partial \bar{S}}{\partial \alpha} &= \sum_n w(n) - 1 = 0\,, \\ \frac{\partial \bar{S}}{\partial \gamma} &= \sum_n E_r w(n) - \langle E\rangle = 0\,, \\ \frac{\partial \bar{S}}{\partial \delta} &= \sum_n M_s w(n) - \langle M\rangle = 0\,.\end{aligned}$$

These lead to

$$\begin{aligned}\log(w(n)) &= -1 + \frac{\alpha}{k} + \frac{\gamma}{k}E_r + \frac{\delta}{k}M_s\,, \\ w(n) &= e^{-1+\frac{\alpha}{k}} e^{\frac{\gamma}{k}E_r + \frac{\delta}{k}M_s}\,,\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}w(n) &:= \frac{1}{Z_k} e^{\frac{1}{k}(\gamma E_r + \delta M_s)}\,, \\ Z_k &:= \sum_n e^{\frac{1}{k}(\gamma E_r + \delta M_s)}\end{aligned}$$

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

c) $\Omega(E, M)$ 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

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

d) 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 γ und δ zu bestimmen.

Solution

Use

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

and we obtain

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

We then have

$$S = k\log\Omega(E,M)\,,$$
$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{k}{\Omega}\frac{\partial \Omega}{\partial E}\,,$$
$$\frac{\partial S}{\partial M} = \frac{k}{\Omega}\frac{\partial \Omega}{\partial M}\,,$$

which amount to

$$\gamma = -\frac{\partial S}{\partial E}\,, \qquad \delta = -\frac{\partial S}{\partial M}$$

We then use

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

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

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

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

Solution

We use

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

and we obtain

$$Z_k = e^{-\frac{F}{kT}}\ .$$
