7. Rechenübung aus Statistischer Physik (Lösung)

1. (a) Fockzustände

$$|\{N_{n_x,n_y,n_z}\}\rangle \equiv |N_{0,0,0}, N_{1,0,0}, N_{0,1,0}, N_{0,0,1}, \cdots\rangle$$

N_{n_x,n_y,n_z} : Anzahl der Teilchen im Zustand (n_x, n_y, n_z).
Die Energie des Zustands (n_x, n_y, n_z) ist gegeben durch

$$\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega_{xy}\left(n_x + n_y + 1\right) + \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right)$$

wobei $k_{n_z} = \pi n_z/L$. Der Hamiltonoperator ist diagonal in der Fockzustandbasis, d.h.

$$\langle\{N_{n'_x,n'_y,n'_z}\}|\hat{H}|\{N_{n_x,n_y,n_z}\}\rangle = \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_z=0}^{\infty} N_{n_x,n_y,n_z}\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}\delta_{n_x,n'_x}\delta_{n_y,n'_y}\delta_{n_z,n'_z}$$

Elemente des Dichteoperators :

$$\begin{aligned}
&\langle\{N_{n'_x,n'_y,n'_z}\}|e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}|\{N_{n_x,n_y,n_z}\}\rangle \\
&= \exp\left[-\beta\left(\sum_{n_x,n_y,n_z} N_{n_x,n_y,n_z}\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} - \mu\underbrace{\sum_{n_x,n_y,n_z} N_{n_x,n_y,n_z}}_{=N}\right)\right]\delta_{n_x,n'_x}\delta_{n_y,n'_y}\delta_{n_z,n'_z}
\end{aligned}$$

(b) Großkanonisches Potential ist $J = -k_B T \ln Z_{\text{GK}}$. Zuerst rechnen wir die Großkanonische Zustandssumme Z_{GK}.
Großkanonische Zustandssumme :

$$\begin{aligned}
Z_{\text{GK}} &= \sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{1,0,0}=0}^{\infty}\cdots\ \exp\left[-\beta\left(\sum_{n_x,n_y,n_z} N_{n_x,n_y,n_z}\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} - \mu\sum_{n_x,n_y,n_z} N_{n_x,n_y,n_z}\right)\right] \\
&= \sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{1,0,0}=0}^{\infty}\cdots\prod_{n_x,n_y,n_z}\exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} - \mu\right)N_{n_x,n_y,n_z}\right] \\
&= \prod_{n_x,n_y,n_z}\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty}\exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} - \mu\right)N_{n_x,n_y,n_z}\right] \\
&= \prod_{n_x,n_y,n_z}\frac{1}{1-\exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} - \mu\right)\right]}
\end{aligned}$$

Deshalb ist das großkanonische Potential

$$J = -k_B T \ln Z_{\text{GK}} = k_B T \sum_{n_x,n_y,n_z} \ln\left(1 - \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z} - \mu\right)\right]\right)$$

(c)

$$
\begin{aligned}
\langle N\rangle &= \frac{1}{Z_{\mathrm{GK}}}\sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{1,0,0}=0}^{\infty}\cdots\ N\exp\left[-\beta\left(\sum_{m_x,m_y,m_z}N_{m_x,m_y,m_z}\varepsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu N\right)\right]\\
&= \frac{1}{Z_{\mathrm{GK}}}\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{1,0,0}=0}^{\infty}\cdots\ \exp\left[-\beta\left(\sum_{m_x,m_y,m_z}N_{m_x,m_y,m_z}\varepsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu N\right)\right]\\
&= \frac{1}{Z_{\mathrm{GK}}}\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}Z_{\mathrm{GK}}\\
&= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z_{\mathrm{GK}}\left(=-\frac{\partial J}{\partial\mu}\right)\\
&= \sum_{n_x,n_y,n_z}\frac{1}{\exp\left[\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right)\right]-1}
\end{aligned}
$$

Weil $\langle N\rangle=\sum_{n_x,n_y,n_z}\langle N_{n_x,n_y,n_z}\rangle$,

$$\langle N_{n_x,n_y,n_z}\rangle=\frac{1}{\exp\left[\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right)\right]-1}$$

Anzahl der Teilchen im Grundzustand

$$\langle N_{0,0,0}\rangle=\frac{1}{\exp\left[\beta\left(\varepsilon_{0,0,0}-\mu\right)\right]-1}$$

Taylor-Entwicklung von $\mu(T)$ bei $T\simeq 0$

$$\mu(T)\simeq\mu(T=0)+\left.\frac{d\mu}{dT}\right|_{T=0}T=\varepsilon_{0,0,0}+\left.\frac{d\mu}{dT}\right|_{T=0}T$$

Wenn $T\simeq 0$,

$$\beta(\varepsilon_{0,0,0}-\mu)\simeq-\beta\left.\frac{d\mu}{dT}\right|_{T=0}T=-k_B^{-1}\left.\frac{d\mu}{dT}\right|_{T=0}\ll 1\,.$$

Deshalb $\exp[\beta(\varepsilon_{0,0,0}-\mu)]\simeq 1-k_B^{-1}d\mu/dT|_{T=0}$. Im Limes $T\to 0$,

$$\langle N_{0,0,0}\rangle\to-\frac{k_B}{d\mu/dT|_{T=0}}$$

Alternative (richtigere) Lösung :

$$
\begin{aligned}
\langle N_{n_x,n_y,n_z}\rangle &= \frac{1}{Z_{\mathrm{GK}}}\sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{1,0,0}=0}^{\infty}\cdots\\
&\quad N_{n_x,n_y,n_z}\exp\left[-\beta\left(\sum_{m_x,m_y,m_z}N_{m_x,m_y,m_z}\varepsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\sum_{m_x,m_y,m_z}N_{m_x,m_y,m_z}\right)\right]\\
&= \frac{1}{Z_{\mathrm{GK}}}\sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{1,0,0}=0}^{\infty}\cdots
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& N_{n_x,n_y,n_z} \prod_{m_x,m_y,m_z} \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N_{m_x,m_y,m_z}\right] \\
= \; & \frac{1}{Z_{\mathrm{GK}}} \left(\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} N_{n_x,n_y,n_z} \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \right) \\
& \times \left(\prod_{\substack{m_x,\,m_y,\,m_z \\ \neq n_x,\,n_y,\,n_z}} \sum_{N_{m_x,m_y,m_z}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N_{m_x,m_y,m_z}\right] \right) \\
= \; & \left(\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} N_{n_x,n_y,n_z} \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \right) \\
& \times \left(\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \right)^{-1} \\
= \; & \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \ln \left(\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \right) \\
= \; & \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \ln \frac{1}{1-\exp[-\beta(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu)]} \\
= \; & -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \ln\left(1-\exp[-\beta(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu)]\right) \\
= \; & \frac{\exp[-\beta(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu)]}{1-\exp[-\beta(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu)]} \\
= \; & \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu)]-1}
\end{aligned}
$$

(d) Anzahl der “entarteten” Zustände im Energieintervall $\varepsilon < \varepsilon'_{n_x,n_y,n_z} < \varepsilon + d\varepsilon$ (wobei $\varepsilon'_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega\left(10(n_x+n_y)+n_z\right)$) :

$$
\begin{gathered}
\varepsilon < \hbar\omega(10(n_x+n_y)+n_z) < \varepsilon + d\varepsilon \\
\frac{1}{\hbar\omega}\varepsilon < 10(n_x+n_y)+n_z < \frac{1}{\hbar\omega}\varepsilon + \frac{1}{\hbar\omega}d\varepsilon
\end{gathered}
$$

Das bedeutet, dass in diesem Intervall es $d\varepsilon/(\hbar\omega)$ Energieniveaus gibt. Wir zählen jetzt die Anzahl der entarteten Zustände für ein gegebenes Energieniveau (oder ein gegebenes $n = 10(n_x+n_y)+n_z$). Wir definieren m als den Rest der Division $n/10$, d.h. $n = 10l + m$. Die mögliche Werte von n_z sind $m, m+10, \cdots, m+10l$. Für ein gegebenes n_z gibt es $(n-n_z)/10+1$ mögliche Kombinationen von (n_x, n_y) (d.h, $((n-n_z)/10, 0)$, $((n-n_z)/10-1, 1)$, $\cdots$, $(0, (n-n_z)/10)$). Deshalb ist die Anzahl der Zustände für ein gegebenes n

$$
\begin{aligned}
\Omega(n) &= \sum_{i=0}^{l} \left[\frac{1}{10}\left(n-(m+10i)\right)+1\right] \qquad (n_z = m+10i) \\
&= \frac{1}{10}(n-m)(l+1) - \frac{1}{2}l(l+1) + (l+1) \\
&= \frac{l}{2}(l+1) + (l+1)
\end{aligned}
$$

$$= \frac{1}{2}(l+1)(l+2)$$

Die Anzahl im Intervall $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$:

$$\begin{aligned}
\Omega(\varepsilon) &\simeq \frac{1}{\hbar\omega}\frac{1}{2}(l+1)(l+2)d\varepsilon \\
&\simeq \frac{1}{2\hbar\omega}\left(\frac{n}{10}\right)^2 d\varepsilon \\
&= \frac{1}{200\hbar\omega} n^2 d\varepsilon \\
&= \frac{1}{200(\hbar\omega)^3}\varepsilon^2 d\varepsilon
\end{aligned}$$

Zustandsdichte

$$D_0(\varepsilon) = \frac{\Omega(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{1}{200(\hbar\omega)^3}\varepsilon^2$$

Zustandsdichte im μ-Raum

$$\Phi(\varepsilon) = \int_{p^2/(2m)+m\omega_{xy}^2(x^2+y^2)/2+m\omega_z^2 z^2/2<\varepsilon} d^3r d^3p = \frac{8}{\omega_{xy}^2\omega_z}\int_{\sum_{i=1}^6 x_i^2<\varepsilon} d^6x = \frac{4\pi^3\varepsilon^3}{3\omega_{xy}^2\omega_z}$$

$$D_0(\varepsilon) = \frac{1}{h^3}\frac{d\Phi}{d\varepsilon} = \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^3\omega_{xy}^2\omega_z} = \frac{\varepsilon^2}{200\hbar^3\omega^3}$$

(e) Anzahl der Teilchen im angeregten Zustand im Limes $\mu \to \mu_c \equiv \varepsilon_{0,0,0}$.

$$\begin{aligned}
\langle N_e\rangle &= \langle N\rangle - \langle N_{0,0,0}\rangle \\
&= \sum_{n_x,n_y,n_z>0}\frac{1}{\exp\left[\beta\left(\varepsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu_c\right)\right]-1} \\
&= \sum_{n_x,n_y,n_z>0}\frac{1}{\exp\left[\beta\hbar\left(\omega_x n_x+\omega_y n_y+\omega_z n_z\right)\right]-1} \\
&= \sum_{n_x,n_y,n_z>0}\frac{1}{\exp\left[\beta\hbar\omega\left(10(n_x+n_y)+n_z\right)\right]-1} \\
&\simeq \int_0^\infty \frac{1}{\exp(\beta\varepsilon)-1} D_0(\varepsilon)d\varepsilon \\
&= \frac{1}{200\hbar^3\omega^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{\exp(\beta\varepsilon)-1}d\varepsilon \\
&= \frac{k_B^3T^3}{200\hbar^3\omega^3}\int_0^\infty \frac{x^2}{e^x-1}dx < \infty
\end{aligned}$$

Zusätzliche Information : In Limes vom ein-dimensionalen Gas ($\omega_{xy} \gg \omega_z$)
Rechnung der Zustandsdichte :
Im Energieintervall $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$ gibt es $1/(\hbar\omega)$ Energienieveaus. Wenn ω_{xy} sehr gross ist, gibt es nur einen Zustand in jedem Energieniveau, (d.h. $n_x = n_y = 0$ und $n_z = \varepsilon/(\hbar\omega)$.) Deshalb $\Omega(n) = 1$ oder $\Omega(\varepsilon) = d\varepsilon/(\hbar\omega)$.

$$\begin{aligned}
\langle N_e\rangle &= \langle N\rangle - \langle N_{0,0,0}\rangle \\
&\simeq \frac{1}{\hbar\omega}\int_0^\infty \frac{1}{\exp(\beta\varepsilon)-1}d\varepsilon \\
&= \frac{k_BT}{\hbar\omega}\int_0^\infty \frac{1}{e^x-1} \to \infty \quad \text{keine BEC}
\end{aligned}$$

Kritische Temperatur für das 3D Gas

$$\langle N \rangle = \langle N_e \rangle = 2.4 \frac{(k_B T_c^{3D})^3}{2\hbar^3 \omega_{xy}^2 \omega_z} \quad \rightarrow \quad k_B T_c^{3D} = \hbar \left(\langle N \rangle \frac{\omega_{xy}^2 \omega_z}{1.2} \right)^{1/3}$$

Wenn $\hbar\omega_{xy} \gg k_B T_c^{3D}$, ist das Gas quasi-one-dimensional. $\rightarrow$ keine Bose-Einstein-Kondensation

Wenn $\hbar\omega_{xy} \ll k_B T_c^{3D}$, ist das Gas drei-dimensional. $\rightarrow$ Bose-Einstein-Kondensation (wenn $k_B T > \hbar\omega_{xy}$)