5. Tutorium - Lösungen **13.05.2011**

5.1 Fockraum

Vorbemerkung: Da es um zwei unabhängige harmonische Oszillatoren geht, können beide auch im gleichen Energiezustand sein (bei Fermionen wäre das nicht möglich). Daher verhält sich dieses System bosonisch.
Beispiel: Der Fock-Zustand $|\Psi(2,5)\rangle = |0,0,1,0,0,1,0,0,\ldots\rangle$ bedeutet, dass sich einer der beiden Oszillatoren im zweiten, und einer der Oszillatoren im fünften Energiezustand befindet. Welcher von beiden in welchem Zustand ist, kann nicht gesagt werden. Es gibt zwei Möglichkeiten:

$$|\Psi(2,5)\rangle = c\left(|\phi_2\rangle_1 \otimes |\phi_5\rangle_2 + |\phi_5\rangle_1 \otimes |\phi_2\rangle_2\right) = c\left(|\phi_2,\phi_5\rangle + |\phi_5,\phi_2\rangle\right),$$

wobei die Normierungskonstante aus der Normierung der Fock-Zustände $\langle\Psi(2,5)|\,\Psi(2,5)\rangle = 1$ berechnet wird, und $c = 1/\sqrt{2}$ ergibt.
a) Für $i < j$ gilt:

$$|\Psi(i,j)\rangle = c\left(|\phi_i,\phi_j\rangle + |\phi_j,\phi_i\rangle\right).$$

Normierung:

$$\begin{aligned}
\langle\Psi(i,j)|\,\Psi(i,j)\rangle &= 1\\
&= c^2\left(\langle\phi_i,\phi_j| + \langle\phi_j,\phi_i|\right)\left(|\phi_i,\phi_j\rangle + |\phi_j,\phi_i\rangle\right)\\
&= c^2\left(1+0+0+1\right) = 2c^2.
\end{aligned}$$

Für $i = j$ gilt $|\Psi(i,j)\rangle = |\phi_i,\phi_i\rangle$. Daher

$$|\Psi(i,j)\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_i,\phi_j\rangle + |\phi_j,\phi_i\rangle\right) & \text{für } i < j,\\ |\phi_i,\phi_i\rangle & \text{für } i = j.\end{cases}$$

*) Für den harmonischen Oszillator gilt

$$\begin{aligned}
b^\dagger|\phi_i\rangle &= \sqrt{i+1}\,|\phi_{i+1}\rangle,\\
b\,|\phi_i\rangle &= \sqrt{i}\,|\phi_{i-1}\rangle,\\
b^\dagger b\,|\phi_i\rangle &= b^\dagger\left(\sqrt{i}\,|\phi_{i-1}\rangle\right) = i\,|\phi_i\rangle.
\end{aligned}$$

Für zwei harmonische Oszillatoren gilt entsprechend (Faktor i falls $s = 1$, und Faktor j falls $s = 2$):

$$b_s^\dagger b_s\,|\phi_i,\phi_j\rangle = \left(i\delta_{s,1} + j\delta_{s,2}\right)|\phi_i,\phi_j\rangle.$$

b) Für $k < l$ gilt auch $i < j$ (für $i = j$ würde das Matrixelement verschwinden) und man erhält:

$$\begin{aligned}
\langle\Psi(i,j)|\,b_s^\dagger b_s\,|\Psi(k,l)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\phi_i,\phi_j| + \langle\phi_j,\phi_i|\right)b_s^\dagger b_s\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_k,\phi_l\rangle + |\phi_l,\phi_k\rangle\right)\\
&= \frac{1}{2}\left[\left(k\delta_{s,1} + l\delta_{s,2}\right)\langle\phi_i,\phi_j|\,\phi_k,\phi_l\rangle + \left(l\delta_{s,1} + k\delta_{s,2}\right)\langle\phi_i,\phi_j|\,\phi_l,\phi_k\rangle\right.\\
&\quad\left. + \left(k\delta_{s,1} + l\delta_{s,2}\right)\langle\phi_j,\phi_i|\,\phi_k,\phi_l\rangle + \left(l\delta_{s,1} + k\delta_{s,2}\right)\langle\phi_j,\phi_i|\,\phi_l,\phi_k\rangle\right]\\
&= \frac{1}{2}\left[\left(k\delta_{s,1} + l\delta_{s,2} + l\delta_{s,1} + k\delta_{s,2}\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l} + \left(l\delta_{s,1} + k\delta_{s,2} + k\delta_{s,1} + l\delta_{s,2}\right)\underbrace{\delta_{i,l}\delta_{j,k}}_{=0}\right]\\
&= \frac{1}{2}\left(k+l\right)\left(\delta_{s,1} + \delta_{s,2}\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l}\\
&= \frac{1}{2}\left(k+l\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l}.
\end{aligned}$$

Der Term $\delta_{i.l}\delta_{j,k}$ verschwindet, da dieser nicht für $k < l$ und $i < j$ erfüllt werden kann ($k < l = i < j = k$, also $k < l < k$, was ein Widerspruch ist).
Für $k = l$ muss auch $i = j$ sein, um nicht-verschwindende Matrixelemente zu erhalten, und man erhält:

$$\begin{aligned}\langle\Psi(i,i)|\, b_s^\dagger b_s \,|\Psi(k,k)\rangle &= \langle\phi_i,\phi_i|\, b_s^\dagger b_s \,|\phi_k,\phi_k\rangle \\ &= \left(k\delta_{s1} + k\delta_{s2}\right)\delta_{i,k} \\ &= k\delta_{i,k}.\end{aligned}$$

D.h. die Formel für $k < l$ gilt offenbar auch für den Fall $k = l$:

$$\langle\Psi(i,j)|\, b_s^\dagger b_s \,|\Psi(k,l)\rangle = \frac{1}{2}\left(k+l\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l} \quad \text{für alle}\, i \leq j \,\text{und}\, k \leq l.$$

c) Für $k < l$ und daher $i < j$ gilt

$$\begin{aligned}\langle\Psi(i,j)|\, a_t^\dagger a_t \,|\Psi(k,l)\rangle &= \left(1\delta_{t,k} + 1\delta_{t,l}\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l} \\ &= \left(\delta_{t,k} + \delta_{t,l}\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l}.\end{aligned}$$

Für $k = l$ und daher $i = j$ gilt

$$\langle\Psi(i,i)|\, a_t^\dagger a_t \,|\Psi(k,k)\rangle = 2\delta_{t,k}\delta_{i,k}.$$

Auch hier gilt die Formel für $k < l$ offenbar auch für $k = l$:

$$\langle\Psi(i,j)|\, a_t^\dagger a_t \,|\Psi(k,l)\rangle = \left(\delta_{t,k} + \delta_{t,l}\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l} \quad \forall i \leq j, k \leq l.$$

d) Wir zeigen das Resultat in der Basis der Fock-Zustände:

$$\begin{aligned}l.h.s. &= \langle\Psi(i,j)|\, \hbar\omega\left(b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 + 1\right) |\Psi(k,l)\rangle \\ &= \hbar\omega\,\langle\Psi(i,j)|\, b_1^\dagger b_1 \,|\Psi(k,l)\rangle + \hbar\omega\,\langle\Psi(i,j)|\, b_2^\dagger b_2 \,|\Psi(k,l)\rangle + \hbar\omega\,\langle\Psi(i,j)|\Psi(k,l)\rangle \\ &= \hbar\omega\left(\frac{1}{2}\left(k+l\right) + \frac{1}{2}\left(k+l\right) + 1\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l} \\ &= \hbar\omega\left(k+l+1\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}r.h.s &= \langle\Psi(i,j)| \sum_t \hbar\omega\left(t + \frac{1}{2}\right) a_t^\dagger a_t \,|\Psi(k,l)\rangle \\ &= \sum_t \hbar\omega\left(t + \frac{1}{2}\right)\langle\Psi(i,j)|\, a_t^\dagger a_t \,|\Psi(k,l)\rangle \\ &= \sum_t \hbar\omega\left(t + \frac{1}{2}\right)\left(\delta_{t,k} + \delta_{t,l}\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l} \\ &= \left\{\left[\sum_t \hbar\omega\left(t + \frac{1}{2}\right)\delta_{t,k}\right] + \left[\sum_t \hbar\omega\left(t + \frac{1}{2}\right)\delta_{t,l}\right]\right\}\delta_{i,k}\delta_{j,l} \\ &= \left\{\left[\hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right)\right] + \left[\hbar\omega\left(l + \frac{1}{2}\right)\right]\right\}\delta_{i,k}\delta_{j,l} \\ &= \hbar\omega\left(k+l+1\right)\delta_{i,k}\delta_{j,l}.\end{aligned}$$

Linke und rechte Seite der angegebenen Gleichung stimmen also für alle Matrixelemente der vollständigen Basis überein, und somit stimmt die Gleichung auch für die allgemeinen Operatoren:

$$\hbar\omega\left(b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 + 1\right) = \sum_t \hbar\omega\left(t + \frac{1}{2}\right) a_t^\dagger a_t.$$

5.2 Zweizustandssystem

Das ist ein Spezialfall des 5. Plenums mit nur 2 Zuständen, $\epsilon_1 = E_0$ und $\epsilon_2 = -E_0$. n_1 ist die Anzahl der Teilchen im Zustand $|1\rangle$ und n_2 die Anzahl der Teilchen im Zustand $|2\rangle$. Daher könnte man die Lösung gleich hinschreiben. Trotzdem wird der Lösungsweg kurz skizziert: Im Fockraum gilt:

$$\hat{H}\,|n_1, n_2\rangle = (E_0 n_1 - E_0 n_2)\,|n_1, n_2\rangle\,,$$

$$\hat{N}\,|n_1, n_2\rangle = (n_1 + n_2)\,|n_1, n_2\rangle = N\,|n_1, n_2\rangle\,,$$

$$\langle n_1', n_2'|\, n_1, n_2\rangle = \delta_{n_1,n_1'}\delta_{n_2,n_2'}.$$

a) Großkanonische Zustandssumme für Bosonen im Fockraum:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \operatorname{tr}\left(e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\right) \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty} \langle n_1, n_2|\, e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\,|n_1, n_2\rangle \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\beta(E_0 n_1 - \mu n_1 - E_0 n_2 - \mu n_2)} \\
&= \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(E_0-\mu)n}\right]\left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(-E_0-\mu)n}\right] \\
&= \frac{1}{1-e^{-\beta(E_0-\mu)}}\,\frac{1}{1-e^{-\beta(-E_0-\mu)}}.
\end{aligned}$$

(Wobei gelten muss $E_0 > \mu$ und $-E_0 > \mu$, also $\mu < -|E_0|$. Das chemische Potential für Bosonen muss somit negativ sein.)
Großkanonisches Potential:

$$J = -k_B T \ln Z_{GK} = k_B T\left[\ln\left(1-e^{-\beta(E_0-\mu)}\right) + \ln\left(1-e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right)\right].$$

Mittlere Teilchenzahl:

$$\langle N\rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(E_0-\mu)}-1} + \frac{1}{e^{\beta(-E_0-\mu)}-1}.$$

Teilchenfluktuation wird wie folgt berechnet ($1/(k_B T) =: \beta$):

$$\begin{aligned}
(\Delta N)^2 &= -\frac{1}{\beta}\frac{\partial^2 J}{\partial \mu^2} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \mu}\langle N\rangle \\
&= \frac{e^{\beta(E_0-\mu)}}{\left(e^{\beta(E_0-\mu)}-1\right)^2} + \frac{e^{\beta(-E_0-\mu)}}{\left(e^{\beta(-E_0-\mu)}-1\right)^2} \geq 0.
\end{aligned}$$

b) Großkanonische Zustandssumme für Fermionen (n_i nehmen nur Werte 0 oder 1 an):

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \operatorname{tr}\left(e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\right) \\
&= \sum_{n_1=0}^{1}\sum_{n_2=0}^{1} \langle n_1, n_2|\, e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\,|n_1, n_2\rangle \\
&= \sum_{n_1=0}^{1}\sum_{n_2=0}^{1} e^{-\beta(E_0 n_1 - \mu n_1 - E_0 n_2 - \mu n_2)} \\
&= \left[\sum_{n=0}^{1} e^{-\beta(E_0-\mu)n}\right]\left[\sum_{n=0}^{1} e^{-\beta(-E_0-\mu)n}\right] \\
&= \left[1+e^{-\beta(E_0-\mu)}\right]\left[1+e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right].
\end{aligned}$$

(Für Fermionen gibt es keine Einschränkungen an das chemische Potential.)

$$J = -k_B T \ln Z_{GK} = -k_B T \left[\ln\left(1 + e^{-\beta(E_0-\mu)}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right)\right].$$

$$\langle N\rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(E_0-\mu)}+1} + \frac{1}{e^{\beta(-E_0-\mu)}+1}.$$

$$(\Delta N)^2 = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\langle N\rangle = \frac{e^{\beta(E_0-\mu)}}{\left(e^{\beta(E_0-\mu)}+1\right)^2} + \frac{e^{\beta(-E_0-\mu)}}{\left(e^{\beta(-E_0-\mu)}+1\right)^2} \geq 0.$$

c) Großkanonische Zustandssumme für Teilchen, die der Maxwell-Boltzmann-Statistik folgen:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \operatorname{tr}\left(\frac{1}{\hat{N}!}e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\right) \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{N!}}_{\text{Gibbsfaktor}} \underbrace{\left[\sum_{a_1=1}^{2}\sum_{a_2=1}^{2}\cdots\sum_{a_N=1}^{2} \langle\phi_{a_1}|_1 \otimes \langle\phi_{a_2}|_2 \otimes\cdots\otimes \langle\phi_{a_N}|_N \, e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)} \, |\phi_{a_1}\rangle_1 \otimes |\phi_{a_2}\rangle_2 \otimes\cdots\otimes |\phi_{a_N}\rangle_N\right]}_{\text{unterscheidbare Teilchen}} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\left[\sum_{a_1=1}^{2}\langle\phi_{a_1}|_1 \, e^{-\beta\left(\hat{H}_1-\mu\hat{N}_1\right)}\,|\phi_{a_1}\rangle_1\right]\cdots\left[\sum_{a_N=1}^{2}\langle\phi_{a_N}|_N \, e^{-\beta\left(\hat{H}_N-\mu\hat{N}_N\right)}\,|\phi_{a_N}\rangle_N\right] \\
&= \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\left[e^{-\beta(E_0-\mu)} + e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right]^N \\
&= \exp\left(e^{-\beta(E_0-\mu)} + e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right) \\
&= \exp\left(e^{-\beta(E_0-\mu)}\right)\exp\left(e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right).
\end{aligned}$$

$$J = -k_B T \ln Z_{GK} = -k_B T\left[e^{-\beta(E_0-\mu)} + e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right].$$

$$\langle N\rangle = -\frac{\partial J}{\partial\mu} = \frac{1}{e^{\beta(E_0-\mu)}} + \frac{1}{e^{\beta(-E_0-\mu)}}.$$

$$(\Delta N)^2 = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\langle N\rangle = \frac{e^{\beta(E_0-\mu)}}{\left(e^{\beta(E_0-\mu)}\right)^2} + \frac{e^{\beta(-E_0-\mu)}}{\left(e^{\beta(-E_0-\mu)}\right)^2} = \frac{1}{e^{\beta(E_0-\mu)}} + \frac{1}{e^{\beta(-E_0-\mu)}} = \langle N\rangle \geq 0.$$

Alternative Rechnung für die großkanonische Zustandssumme für Maxwell-Boltzmann-Statistik: Mit dem „Entartungsgradoperator“ $\hat{F}$:

$$\hat{F}\,|n_1,n_2\rangle = \frac{N!}{n_1!n_2!}\,|n_1,n_2\rangle$$

kann man schreiben:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \operatorname{tr}\left(\frac{1}{\hat{N}!}\hat{F}e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\right) \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{N!}}_{\text{Gibbsfaktor}} \underbrace{\frac{N!}{n_1!n_2!}}_{\text{Anzahl der entarteten Zustände}} \left[e^{-\beta(E_0-\mu)n_1} e^{-\beta(-E_0-\mu)n_2}\right] \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n_1!}e^{-\beta(E_0-\mu)n_1}\,\frac{1}{n_2!}e^{-\beta(E_0-\mu)n_2}\right] \\
&= \left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(e^{-\beta(E_0-\mu)}\right)^n\right]\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right)^n\right] \\
&= \exp\left(e^{-\beta(E_0-\mu)}\right)\exp\left(e^{-\beta(-E_0-\mu)}\right).
\end{aligned}$$