6. Tutorium - Lösungen **27.05.2011**

6.1 Harmonische Falle

a) großkanonische Zustandssumme:

$$\begin{aligned}
Z_{GK}(T,V,\mu) &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\frac{1}{h^{3N}N!}\int e^{-\beta H(p,q)}\mathrm{d}^{3N}p\,\mathrm{d}^{3N}q \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\frac{1}{h^{3N}N!}\int e^{-\beta\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{p_i^2}{2m}+\frac{m\omega^2 q_i^2}{2}\right)}\mathrm{d}^{3N}p\,\mathrm{d}^{3N}q \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\frac{1}{h^{3N}N!}\int \prod_{i=1}^{3N} e^{-\beta\left(\frac{p_i^2}{2m}+\frac{m\omega^2 q_i^2}{2}\right)}\mathrm{d}p_i\,\mathrm{d}q_i \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\frac{1}{h^{3N}N!}\left(\prod_{i=1}^{3N}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_i e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}}\right)\left(\prod_{i=1}^{3N}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q_i e^{-\beta\frac{m\omega^2 q_i^2}{2}}\right) \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\frac{1}{h^{3N}N!}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}\right)^{3N}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q e^{-\beta\frac{m\omega^2 q^2}{2}}\right)^{3N} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\frac{1}{h^{3N}N!}\left(\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}}\right)^{3N}\left(\sqrt{\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}}\right)^{3N} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\left[e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi}{h\omega\beta}\right)^3\right]^N = \exp\left(e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi}{h\omega\beta}\right)^3\right) = \exp\left(e^{\frac{\mu}{k_BT}}\left(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\right)^3\right),
\end{aligned} \tag{1}$$

mit $\beta = 1/(k_BT)$ und $\hbar = h/(2\pi)$, wobei das Gaußsche Integral[1] und die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion $e^x = \sum_{N=0}^{\infty}\frac{x^N}{N!}$ verwendet wurden.

b) Ableitung von $\ln Z_{GK}$ nach β ergibt:

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{GK} &= -\frac{1}{Z_{GK}}\frac{\partial Z_{GK}}{\partial\beta} \\
&= -\frac{1}{Z_{GK}}\sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{h^{3N}N!}\int\left(-H(p,q)+\mu N\right)e^{-\beta H(p,q)+\beta\mu N}\mathrm{d}^{3N}p\,\mathrm{d}^{3N}q \\
&= \langle H-\mu N\rangle = \langle H\rangle - \mu\langle N\rangle\,.
\end{aligned} \tag{2}$$

Somit folgt für die Teilchen in der harmonischen Falle:

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle_{GK} &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{GK} + \mu\langle N\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{GK} + \frac{\mu}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z_{GK} \\
&= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[e^{\beta\mu}\left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^3\right] + \frac{\mu}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\left[e^{\beta\mu}\left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^3\right] \\
&= -\mu e^{\beta\mu}\left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^3 - e^{\beta\mu}\left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^3\frac{-3}{\beta^4} + \frac{\mu}{\beta}\beta e^{\beta\mu}\left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^3 \\
&= 3e^{\beta\mu}\left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^3\frac{1}{\beta} = 3\langle N\rangle k_BT,
\end{aligned} \tag{3}$$

[1] Siehe 4. Plenum für die Berechnung des Gaußschen Integrals $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2}\mathrm{d}u = \sqrt{\pi}$.

mit $\langle N\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z_{GK}$
c) Phasenraumvolumen (siehe 4. Tutorium), für D Dimensionen und $N = 1$ Teilchen:

$$\Phi(E) = \int_{H<E} \mathrm{d}^D p \mathrm{d}^D q = (\sqrt{2m})^D \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m\omega}}\right)^D \int_{r_1^2+r_2^2+..+r_{2D}^2<E} \mathrm{d}^{2D} r = \left(\frac{2}{\omega}\right)^D \tilde{\Phi} \tag{4}$$

$$\text{mit}\, r_i := \frac{p_i}{\sqrt{2m}} \text{ und } r_{i+D} := \sqrt{\frac{m}{2}}\omega q_i, \quad (i = 1, 2, ..., D) \tag{5}$$

$\tilde{\Phi}$ ist das Volumen einer $2D$-dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{E}$. Daher:

$$\Phi(E) = \left(\frac{2}{\omega}\right)^D \frac{\pi^D E^D}{D!}. \tag{6}$$

$$D(E) = \frac{1}{h^3}\frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E} = \left(\frac{2\pi}{\hbar\omega}\right)^D D E^{D-1}\frac{1}{D!} = \left(\frac{E}{\hbar\omega}\right)^D \frac{1}{E(D-1)!}. \tag{7}$$

$$D(E) = \begin{cases} \frac{1}{\hbar\omega} & \text{für}\, D = 1, \\ \frac{E}{(\hbar\omega)^2} & \text{für}\, D = 2, \\ \frac{E^2}{2(\hbar\omega)^3} & \text{für}\, D = 3. \end{cases} \tag{8}$$

6.2 Bose-Einstein Kondensation

Die Energieeigenwerte und -funktionen sowie grundlegende Überlegungen zum entsprechenden Fockraum finden sich im 6. Plenum. Die Eigenenergie ist demnach gegeben durch:

$$\epsilon_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \tag{9}$$

für $n_x, n_y, n_z \geq 0$. Hamiltonoperator und Teilchenzahloperator wirken auf einen Fockzustand

$$|\Phi\rangle = \left|N_{0,0,0}, N_{0,0,1}, N_{0,1,0}, N_{1,0,0}, N_{0,1,1}, \ldots, N_{0,0,2}, \ldots, N_{n_x,n_y,n_z}, \ldots\right\rangle \tag{10}$$

wie folgt:

$$\hat{H}\,|\Phi\rangle = \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_z=0}^{\infty} \epsilon_{n_x,n_y,n_z} N_{n_x,n_y,n_z}\,|\Phi\rangle\,, \tag{11}$$

$$\hat{N}\,|\Phi\rangle = \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_z=0}^{\infty} N_{n_x,n_y,n_z}\,|\Phi\rangle\,. \tag{12}$$

Im Folgenden werden diese Abkürzungen verwendet:

$$\begin{aligned} \sum_{\{N_{n_x,n_y,n_z}\}} &\equiv \sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty}\sum_{N_{0,0,1}=0}^{\infty}\sum_{N_{0,1,0}=0}^{\infty}\cdots\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty}\cdots \\ \sum_{n_x,n_y,n_z} &\equiv \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_z=0}^{\infty} \\ \prod_{n_x,n_y,n_z} &\equiv \prod_{n_x=0}^{\infty}\prod_{n_y=0}^{\infty}\prod_{n_z=0}^{\infty} \end{aligned} \tag{13}$$

a) Großkanonische Zustandssumme:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \operatorname{tr}\left(e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\right) \\
&= \sum_{N_{0,0,0}=0}^{\infty} \sum_{N_{0,0,1}=0}^{\infty} \sum_{N_{0,1,0}=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} \cdots \langle\Phi| \, e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)} \, |\Phi\rangle \\
&= \sum_{\{N_{n_x,n_y,n_z}\}} \exp\left[-\beta \sum_{n_x,n_y,n_z} \left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \\
&= \prod_{n_x,n_y,n_z} \left[\sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} e^{-\beta\left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right)N_{n_x,n_y,n_z}}\right] \\
&= \prod_{n_x,n_y,n_z} \frac{1}{1-\exp\left[-\beta\left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right)\right]}.
\end{aligned} \tag{14}$$

b) Erwartungswert[2] der Anzahl der Bosonen in einem bestimmten Zustand (n_x, n_y, n_z)

$$\hat{N}_{n_x,n_y,n_z} |\Phi\rangle = N_{n_x,n_y,n_z} |\Phi\rangle \,. \tag{15}$$

(zur besseren Kennzeichnung wird im Erwartungswert auf der linken Seite $n \to m$ gesetzt):

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{N}_{m_x,m_y,m_z} \right\rangle &= \frac{1}{Z_{GK}} \operatorname{tr}\left(\hat{N}_{m_x,m_y,m_z} e^{-\beta\left(\hat{H}-\mu\hat{N}\right)}\right) \\
&= \frac{1}{Z_{GK}} \sum_{\{N_{n_x,n_y,n_z}\}} N_{m_x,m_y,m_z} \exp\left[-\beta \sum_{n_x,n_y,n_z} \left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \\
&= \frac{1}{Z_{GK}} \sum_{\{N_{n_x,n_y,n_z}\}} N_{m_x,m_y,m_z} \prod_{n_x,n_y,n_z} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \\
&= \frac{1}{Z_{GK}} \left\{ \sum_{N_{m_x,m_y,m_z}=0}^{\infty} N_{m_x,m_y,m_z} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N_{m_x,m_y,m_z}\right] \right. \\
&\qquad \left. \times \prod_{(n_x,n_y,n_z)\neq(m_x,m_y,m_z)} \sum_{N_{n_x,n_y,n_z}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right) N_{n_x,n_y,n_z}\right] \right\} \\
&= \frac{\sum_{N_{m_x,m_y,m_z}=0}^{\infty} N_{m_x,m_y,m_z} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N_{m_x,m_y,m_z}\right]}{\sum_{N_{m_x,m_y,m_z}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N_{m_x,m_y,m_z}\right]} \\
&= \frac{\sum_{N=0}^{\infty} N \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N\right]}{\sum_{N=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N\right]} \\
&= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \ln\left\{\sum_{N=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right) N\right]\right\} \\
&= -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu} \ln\left\{1-\exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right)\right]\right\} \\
&= \frac{\exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right)\right]}{1-\exp\left[-\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right)\right]} = \frac{1}{e^{\beta\left(\epsilon_{m_x,m_y,m_z}-\mu\right)}-1}.
\end{aligned}$$

Hierbei wurde ausgenutzt, dass sich die meisten Terme im Zähler und im Nenner (Z_{GK}) gegenseitig wegheben. Es bleiben also nur die relevanten Terme für N_{n_x,n_y,n_z} übrig. Weiters wurde verwendet $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1/(1-x)$ für $|x| < 1$.

[2] Anmerkung: Die im Skriptum auf S84 in Gl (4.37) und (4.38) vorgeführte „Lösung“ macht zwar das Ergebnis plausibel, ist aber keine richtige Herleitung.

c) Anzahl der Teilchen im Grundzustand:

$$\langle N_{0,0,0}\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{0,0,0}-\mu)}-1} = \frac{1}{e^{\beta(3\hbar\omega/2-\mu)}-1}, \tag{16}$$

divergiert wenn $\mu \to 3\hbar\omega/2 \equiv \mu_c$.
Anzahl der Teilchen in angeregten Zuständen:

$$\begin{aligned}
\langle N_{\epsilon>0}\rangle &= \sum_{(n_x,n_y,n_z)\neq(0,0,0)} \left\langle N_{n_x,n_y,n_z}\right\rangle \\
&= \sum_{(n_x,n_y,n_z)\neq(0,0,0)} \frac{1}{e^{\beta\left(\epsilon_{n_x,n_y,n_z}-\mu\right)}-1} \\
&\approx \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)\frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \frac{1}{2(\beta\hbar\omega)^3}\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^2}{e^{x+\beta(\mu_c-\mu)}-1}.
\end{aligned} \tag{17}$$

mit $D(\epsilon) = \epsilon^2/(2(\hbar\omega)^3)$ in drei Dimensionen und $x = \beta\epsilon$, $\mathrm{d}\epsilon = \mathrm{d}x/\beta$. Im Limes $\mu_c \to \mu$ folgt

$$\langle N_{\epsilon>0}\rangle \to \frac{1}{2}\left(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\right)^3 \int_0^\infty \mathrm{d}x\frac{x^2}{e^x-1} = \zeta(3)\left(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\right)^3 \approx 1.20\times\left(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\right)^3 < \infty. \tag{18}$$

Somit kann es in 3 Dimensionen in der harmonischen Falle eine Bose-Einstein-Kondensation geben.
d) In zwei Dimensionen ist das ebenfalls möglich:

$$\begin{aligned}
\langle N_{\epsilon>0}\rangle &\approx \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)\frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{\epsilon}{(\hbar\omega)^2}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \frac{1}{(\beta\hbar\omega)^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\frac{x}{e^{x+\beta(\mu_c-\mu)}-1} \\
&\xrightarrow{\mu\to\mu_c} \left(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\right)^2\int_0^\infty \mathrm{d}x\frac{x}{e^x-1} = \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{k_BT}{\hbar\omega}\right)^2 < \infty.
\end{aligned} \tag{19}$$

Lediglich in einer Dimension kann keine endgültige Aussage getroffen werden, da das Integral divergiert:

$$\begin{aligned}
\langle N_{\epsilon>0}\rangle &\approx \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)\frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \frac{1}{\hbar\omega}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \frac{1}{\beta\hbar\omega}\int_0^\infty \mathrm{d}x\frac{1}{e^{x+\beta(\mu_c-\mu)}-1} \\
&\xrightarrow{\mu\to\mu_c} \frac{k_BT}{\hbar\omega}\int_0^\infty \mathrm{d}x\frac{1}{e^x-1} \to \infty.
\end{aligned} \tag{20}$$

Die Ursache für die Divergenz könnte aber auch eine unpassende Näherung sein. Daher folgt eine:
*) Genauere Betrachtung von c) und d): Berechnet werden soll:

$$\begin{aligned}
\langle N_{\epsilon>0}\rangle &= \sum_{(n_x,n_y,n_z)\neq(0,0,0)} \left\langle N_{n_x,n_y,n_z}\right\rangle \\
&= \sum_{(n_x,n_y,n_z)\neq(0,0,0)} \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega(n_x+n_y+n_z)+\mu_c-\mu)}-1} \\
&= \sum_{N=1}^\infty f(N,D)\frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega N+\mu_c-\mu)}-1},
\end{aligned} \tag{21}$$

wobei $f(N,D)$ die Zahl der Möglichkeiten bezeichnet, ein gegebenes N als Summe $N = n_x + n_y + n_z$ zu bilden, mit $0 \leq n_i \leq N$ (in D Dimensionen ist entsprechend $N = n_1 + n_2 + \ldots + n_D$). Das Ergebnis ist gegeben durch „Kombination mit Wiederholung“ um N Energieeinheiten auf D Dimensionen aufzuteilen[3]:

$$f(N,D) = \left(\begin{array}{c} N+D-1 \\ N \end{array} \right). \tag{22}$$

Also gilt:

$$\langle N_{\epsilon>0} \rangle = \sum_{N=1}^{\infty} \left(\begin{array}{c} N+D-1 \\ N \end{array} \right) \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega N + \mu_c - \mu)} - 1}. \tag{23}$$

Bislang ist noch keine Näherung durchgeführt worden. Man kann diese Summe numerisch durchführen, und sie ist für $\mu \to \mu_c$ für alle endlichen $\beta\hbar\omega$ endlich, da die einzelnen Terme für große N exponentiell unterdrückt sind (also die Summe für große N konvergiert), und für kleine N kein einziger Summand für sich divergiert. „Gefährlich“ kann es nur im Limes $\beta\hbar\omega \to 0$ werden. Im eindimensionalen Fall $D = 1$ gilt $\left(\begin{array}{c} N+D-1 \\ N \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} N \\ N \end{array} \right) = 1$. Für $\mu = \mu_c$ kann man eine untere Schranke für die Summe in Form eines Integrals angeben: Für $D = 1$ ist der Integrand $1/\left(e^{\beta\hbar\omega N} - 1\right)$ streng monoton fallend ($1/\left(e^{\beta\hbar\omega N} - 1\right) > 1/\left(e^{\beta\hbar\omega M} - 1\right)$ genau dann wenn $M > N$). Daher ist die Summe eine obere Riemannsumme (gegeben durch Rechtecke zwischen N und $N+1$) für das Integral:

$$\begin{aligned}
\langle N_{\epsilon>0} \rangle &= \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega N} - 1} \\
&= \sum_{N=1}^{\infty} \int_N^{N+1} \mathrm{d}M \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega N} - 1} && (24) \\
&> \sum_{N=1}^{\infty} \int_N^{N+1} \mathrm{d}M \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega M} - 1} \\
&= \int_1^{\infty} \mathrm{d}M \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega M} - 1} && (25) \\
&= \frac{1}{\beta\hbar\omega} \int_{\beta\hbar\omega}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{e^x - 1}. && (26)
\end{aligned}$$

Im Limes $\beta\hbar\omega \to 0$ divergiert das Integral wie $\int_{\beta\hbar\omega}^{A} \mathrm{d}x/x \sim \ln(\beta\hbar\omega)$, daher divergiert in diesem Limes auch die Summe. Dies entspricht aber hohen Temperaturen $T \to \infty$ oder kleiner Eigenfrequenz des harmonischen Oszillators $\omega \to 0$. Falls $\beta\hbar\omega$ nicht klein ist, dürfte auch $\langle N_{\epsilon>0} \rangle$ endlich bleiben.
Es lässt sich wohl in ähnlicher Weise zeigen, dass die oben angegebenen Näherungen für $D = 2$ und $D = 3$ im Limes $\beta\hbar\omega \to 0$ exakt werden (und nicht divergieren), obwohl die Argumentation wohl etwas schwieriger wird, da die Integranden nicht mehr streng monoton fallen.

[3]Die Fragestellung ist die gleiche wie „Wieviele Möglichkeiten gibt es, N Äpfel auf D Studenten zu verteilen?“. Die Formel kann man wie folgt herleiten: z.B. 5 Äpfel auf 3 Studenten können verteilt werden (5,0,0) oder (3,2,0) oder (1,3,1). Für jeden Apfel setze man „A“ und für den Beistrich dazwischen „B“, so wird (5,0,0)⇔(AAAAA„)⇔“AAAAABB“; entsprechend wird (3,2,0) ⇔(AAA,AA,)⇔“AAABAAB“; oder (1,3,1)⇔“ABAAABA“. Also entspricht das der Anzahl der Möglichkeiten, $N\times$A und $(D-1)\times$B anzuordnen, also $(N+D-1)!/(N!(D-1)!) = \left(\begin{array}{c} N+D-1 \\ N \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} N+D-1 \\ D-1 \end{array} \right)$.