Statistische Physik I (SS 2017): Tutorium 6, Aufgabe Nr. 19. Variationsrechnung: quartisches Potential

Gegeben Sei ein 1D *klassisches* Gas mit $N \gg 1$ Teilchen in einem quartischen Potential. Die Hamiltonfunktion ist durch

$$H(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \Lambda q_i^4 \right) \tag{1}$$

gegeben. Für dieses Problem soll die freie Energie F durch Variationsrechnung approximativ bestimmt werden. Betrachten Sie dazu das einfachere Testsystem mit Hamiltonfunktion

$$H^*(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_*^2 q_i^2 \right), \tag{2}$$

und einer variablen Fallenfrequenz ω_*.

(a) Berechnen Sie zuerst die kanonische Zustandssumme Z_{K}^* und die freie Energie F^* für das einfache harmonische System $H^*(\underline{q}, \underline{p})$.

$$Z_{\mathrm{K}}^* = \int \frac{d^N p d^N x}{N! h^N} \exp\left(-\frac{H^*(\underline{q}, \underline{p})}{k_B T} \right) = \frac{1}{N!} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_*} \right)^N .$$

$$F^* = -k_B T \ln Z_{\mathrm{K}}^* = -k_B T N \ln \left(\frac{e}{N} \frac{k_B T}{\hbar \omega_*} \right)$$

(b) Bestimmen Sie aus der Ungleichung (siehe Vorlesung)

$$F < F^* + \langle H - H^* \rangle_{\rho^*} \tag{3}$$

einen approximativen Ausdruck für die freie Energie F, indem Sie die rechte Seite als Funktion von ω_* minimieren, d.h. $F \approx F_{\mathrm{ap}} = \min\{F^* + \langle H - H^* \rangle_{\rho^*} | \omega_* > 0\}$.

$$F^* = -N k_B T \ln \left(\frac{e k_B T}{N \hbar \omega_*} \right),$$

$$\langle H^* \rangle_{\rho^*} = \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}^*} \int \frac{d^N p d^N x}{N! h^N} H^*(\underline{q}, \underline{p}) \exp\left(-\frac{H^*(\underline{q}, \underline{p})}{k_B T} \right) = N k_B T,$$

$$\langle H \rangle_{\rho^*} = \frac{1}{Z_{\mathrm{K}}^*} \int \frac{d^N p d^N x}{N! h^N} H(\underline{q}, \underline{p}) \exp\left(-\frac{H^*(\underline{q}, \underline{p})}{k_B T} \right) = N \left[\frac{k_B T}{2} + \frac{3\Lambda (k_B T)^2}{m^2 \omega_*^4} \right].$$

Wir suchen das Minimum von $F^* + \langle H - H^* \rangle$:

$$\frac{\partial}{\partial \omega_*} (F^* + \langle H - H^* \rangle) = \frac{N k_B T}{\omega_*} - \frac{12 N \Lambda (k_B T)^2}{m^2 \omega_*^5} = 0.$$

Daraus folgt

$$\omega_* = \left(\frac{12 \Lambda k_B T}{m^2} \right)^{1/4},$$

$$F_{\mathrm{ap}} = -N k_B T \left\{ \frac{5}{4} + \ln \left[\frac{\sqrt{m} (k_B T)^{3/4}}{N \hbar (12\Lambda)^{1/4}} \right] \right\}. \tag{4}$$

(c) Berechnen Sie nun auch die exakte kanonische Zustandssumme Z_K und die freie Energie F für das Gas im quartischen Potential [Gleichung (1)] und vergleichen Sie das Ergebnis für F mit dem Resultat der Variationsrechnung.

$$\begin{aligned} Z_\mathrm{K} &= \int \frac{d^N p d^N x}{N! h^N} \exp\left(-\frac{H(\underline{q},\underline{p})}{k_B T}\right) = \frac{1}{N!}\left[\frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{h}\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{U x^4}{k_B T}\right)\right]^N = \\ &= \frac{1}{N!}\left[\frac{\sqrt{m k_B T}\,\Gamma(\frac{1}{4})}{2\sqrt{2\pi}\hbar}\left(\frac{k_B T}{U}\right)^{1/4}\right]^N . \end{aligned}$$

$$F = -N k_B T\left\{1 + \ln\left[\frac{\Gamma(\frac{1}{4})}{2\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{m}(k_B T)^{3/4}}{N\hbar U^{1/4}}\right]\right\} \approx -N k_B T\left\{0.68 + \ln\left[\frac{\sqrt{m}(k_B T)^{3/4}}{N\hbar U^{1/4}}\right]\right\}. \tag{5}$$

Die Variationsrechnung (4) ergibt ihrerseits

$$F < -N k_B T\left\{0.63 + \ln\left[\frac{\sqrt{m}(k_B T)^{3/4}}{N\hbar U^{1/4}}\right]\right\}.$$

Bemerken Sie, dass wir die "neue" Planck-Konstante $\hbar = h/(2\pi)$ statt der "alten" h in dieser Lösung verwenden.

Hinweis:
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^4 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = 3\sigma^4, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^4} = \frac{1}{2}\Gamma(\tfrac{1}{4}) \approx 1.81.$$