Lösungen zum 7. Tutorium VU Statistische Physik I, 15.06.2018

1. **Quantenmechanische mikrokanonische Zustandssumme**

   Betrachten Sie drei nicht wechselwirkende Teilchen in einer **eindimensionalen** harmonischen Falle. Welche Energien ε_i kann ein quantenmechanisches Teilchen in der Falle annehmen? Berechnen Sie die ersten drei möglichen Werte der Gesamtenergie E_0, E_1, E_2, sowie die zugehörige mikrokanonische Zustandssumme für

   Lösung: Die möglichen Energien eines Teilchens sind $\varepsilon_i \in \{\frac{1}{2}\hbar\omega, \frac{3}{2}\hbar\omega, \frac{5}{2}\hbar\omega, ...\}$.

   a) drei Bosonen mit Spin $s = 0$.

      Lösung: Die ersten drei möglichen Werte der Gesamtenergie sind

      $$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$$

      und die mikrokanonische Zustandssumme ergibt sich durch Abzählen

      $$\Omega(E_0) = 1, \quad \Omega(E_1) = 1, \quad \Omega(E_2) = 2.$$

   b) drei Fermionen mit Spin $s = 1/2$.

      Lösung: Die ersten drei möglichen Werte der Gesamtenergie sind

      $$E_0 = \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \frac{7}{2}\hbar\omega, \quad E_2 = \frac{9}{2}\hbar\omega$$

      und die mikrokanonische Zustandssumme ergibt sich durch Abzählen

      $$\Omega(E_0) = 2, \quad \Omega(E_1) = 4, \quad \Omega(E_2) = 10.$$

2. **Quantenmechanische kanonische Zustandssumme**

   Zwei nicht wechselwirkende Teilchen der Masse m seien gefangen in einer **eindimensionalen** harmonischen Falle und in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T. Ermitteln Sie die zugehörige innere Energie für

   a) zwei fiktive Fermionen mit Spin $s = 0$.

      Lösung: Die quantenmechanische kanonische Zustandssumme ist gegeben durch $Z_\mathrm{K} = \mathrm{Spur}(e^{-\beta\hat{H}})$. In der Eigenbasis $|n_1, n_2\rangle$ (mit $n_1 < n_2$) des Hamiltonian

      $$\hat{H}|n_1, n_2\rangle = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1)|n_1, n_2\rangle$$

lässt sich die Spur auswerten als

$$
\begin{aligned}
Z_{\mathrm{K}} &= \sum_{0\le n_1<n_2} \langle n_1, n_2|e^{-\beta\hat{H}}|n_1, n_2\rangle \\
&= \sum_{0\le n_1<n_2} e^{-\beta\hbar\omega(n_1+n_2+1)} \\
&= e^{-\beta\hbar\omega} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2-n_1=1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(2n_1)} e^{-\beta\hbar\omega(n_2-n_1)} \\
&= e^{-\beta\hbar\omega} \sum_{n_1=0}^{\infty} \left(e^{-2\beta\hbar\omega}\right)^{n_1} \sum_{n_2-n_1=1}^{\infty} \left(e^{-\beta\hbar\omega}\right)^{n_2-n_1} \\
&= e^{-\beta\hbar\omega} \frac{1}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}} \left(\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} - 1\right) = \frac{e^{-2\beta\hbar\omega}}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}} \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}.
\end{aligned}
$$

Für die mittlere innere Energie der Fermionen folgt daraus

$$
\begin{aligned}
\langle E\rangle = -\frac{\partial \ln Z_{\mathrm{K}}}{\partial\beta} &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\Big[-2\beta\hbar\omega - \ln(1-e^{-2\beta\hbar\omega}) - \ln(1-e^{-\beta\hbar\omega})\Big] \\
&= 2\hbar\omega + \frac{2\hbar\omega}{e^{2\beta\hbar\omega}-1} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}
\end{aligned}
$$

b) zwei Bosonen mit Spin $s = 0$.

Lösung: Bosonen können sich zusätzlich im gleichen Zustand befinden. Die analoge Rechnung zu (a) liefert

$$
\begin{aligned}
Z_{\mathrm{K}} &= \sum_{0\le n_1\le n_2} \langle n_1, n_2|e^{-\beta\hat{H}}|n_1, n_2\rangle \\
&= \sum_{0\le n_1\le n_2} e^{-\beta\hbar\omega(n_1+n_2+1)} \\
&= e^{-\beta\hbar\omega} \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2-n_1=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(2n_1)} e^{-\beta\hbar\omega(n_2-n_1)} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}} \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}.
\end{aligned}
$$

Für die mittlere innere Energie der Bosonen folgt daraus

$$
\begin{aligned}
\langle E\rangle = -\frac{\partial \ln Z_{\mathrm{K}}}{\partial\beta} &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\Big[-\beta\hbar\omega - \ln(1-e^{-2\beta\hbar\omega}) - \ln(1-e^{-\beta\hbar\omega})\Big] \\
&= \hbar\omega + \frac{2\hbar\omega}{e^{2\beta\hbar\omega}-1} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}
\end{aligned}
$$

Zwischen der mittlere innere Energie der Bosonen $\langle E\rangle^{\mathrm{B}}$ und der Fermionen $\langle E\rangle^{\mathrm{F}}$ besteht der Zusammenhang $\langle E\rangle^{\mathrm{F}} = \langle E\rangle^{\mathrm{B}} + \hbar\omega$. Obwohl die Teilchen nicht wechselwirken, wirkt das Pauli-Prinzip für die Fermionen wie eine Abstoßung und erhöht die Energie der Fermionen um $+\hbar\omega$.

3. **Ideales Fermigas**

Betrachten Sie ein Fermigas ($s = 1/2$) in einer **zweidimensionalen** harmonischen Falle mit Kreisfrequenz ω. Das System befinde sich in Kontakt mit einer Umgebung der Temperatur T und dem chemischen Potential μ.

a) Bestimmen Sie die möglichen Energiewerte ε_i die ein quantenmechanisches Teilchen in der Falle annehmen kann. Wie groß ist die mittlere Besetzungszahl $\langle n_i \rangle$ dieser Zustände?

Lösung: Der Index i soll jeden Einteilchenzustand eindeutig festlegen. Für ein Fermion ($s = 1/2$) in einer **zweidimensionalen** harmonischen Falle wird der Einteilchenzustand mit Energie $\varepsilon = \hbar\omega(i_x + i_y + 1)$ eindeutig durch die beiden Quantenzahlen i_x, i_y sowie dem Spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ festgelegt. Der Index i nummeriert jeden Einteilchenzustand eindeutig. [1] Die möglichen Energiewerte eines Teilchens sind $\varepsilon_i \in \{\hbar\omega, 2\hbar\omega, 3\hbar\omega, ...\}$. Beachten Sie, dass die Einteilchenzustände im allgemeinen entartet sind, z.b. gibt es unter Berücksichtigung des Spins vier Einteilchenzustände zur Energie $2\hbar\omega$. Jeder einzelne Zustand mit Energie ε_i hat laut Fermi-Dirac-Statistik eine mittlere Besetzungszahl von

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}.$$

b) Berechnen Sie das großkanonische Potential

$$J = -k_B T \sum_{i=0}^{\infty} \ln\left(1 + z e^{-\beta\varepsilon_i}\right)$$

indem Sie die Summe über die Einteilchenzustände durch das Integral

$$\sum_{i=0}^{\infty} \to \int_0^{\infty} (2s+1)\Omega_1(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

ersetzen, wobei $\Omega_1(\varepsilon)$ die klassische mikrokanonische Zustandssumme eines Teilchens ist.

Lösung: Mit der mikrokanonischen Zustandsdichte eines Teilchens

$$\Omega_1(\varepsilon) = \frac{\partial \Phi_1}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{h^2} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int\limits_{H_1 < \varepsilon} d^2q d^2p = \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\left(\frac{\varepsilon^2}{2\hbar^2\omega^2}\right) = \frac{\varepsilon}{\hbar^2\omega^2}$$

erhält man durch partielle Integration (siehe 4. Plenum)

$$J = -\int_0^{\infty} \frac{(2s+1)\Phi_1(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon = -\frac{1}{\hbar^2\omega^2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^2}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon$$

[1] Alternativ kann man auch einen Multiindex $i = (i_x, i_y, \sigma)$ verwenden.

c) Berechnen Sie die mittlere Energie $\langle E\rangle$ als Funktion von ω, z und T. Zeigen Sie, dass im Grenzfall $T \to \infty$ die klassische kalorische Zustandsgleichung $\langle E\rangle = 2\langle N\rangle k_B T$ folgt.

Lösung: Die mittlere innere Energie ist gegeben durch

$$\langle E\rangle = \int_0^\infty \frac{\varepsilon\,(2s+1)\Omega_1(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon = \frac{2}{\hbar^2\omega^2}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon.$$

Im Grenzfall $T \to \infty$ folgt

$$\langle E\rangle \approx \frac{2z}{\hbar^2\omega^2}\int_0^\infty \varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon}d\varepsilon = \frac{2z}{\hbar^2\omega^2\beta^3}\int_0^\infty \tilde{\varepsilon}^2 e^{-\tilde{\varepsilon}}d\tilde{\varepsilon} = \frac{4z}{\hbar^2\omega^2\beta^3}.$$

Für die mittlere Teilchenzahl

$$\langle N\rangle = \int_0^\infty \frac{(2s+1)\Omega_1(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon = \frac{2}{\hbar^2\omega^2}\int_0^\infty \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon$$

erhält man im Grenzfall $T \to \infty$:

$$\langle N\rangle \approx \frac{2z}{\hbar^2\omega^2}\int_0^\infty \varepsilon e^{-\beta\varepsilon}d\varepsilon = \frac{2z}{\hbar^2\omega^2\beta^2}\int_0^\infty \tilde{\varepsilon} e^{-\tilde{\varepsilon}}d\tilde{\varepsilon} = \frac{2z}{\hbar^2\omega^2\beta^2}.$$

Daher gilt insgesamt im Grenzfall $T \to \infty$ die klassische Form der kalorischen Zustandsgleichung $\langle E\rangle = 2\langle N\rangle k_B T$.

4. **Ideales Bosegas**

Betrachten Sie ein ideales Bosegas ($s = 0$) der Masse m in einer **zweidimensionalen** Box mit Seitenlänge L, welches sich in Kontakt mit einer Umgebung der Temperatur T und dem chemischen Potential μ befindet.

a) Berechnen Sie das großkanonische Potential

$$J = k_B T \sum_{i=0}^{\infty} \ln\left(1 - z e^{-\beta\varepsilon_i}\right)$$

analog zu Beispiel 3b indem Sie die Summe durch das Integral ersetzen.

Lösung: Mit der mikrokanonischen Zustandsdichte eines Teilchens

$$\Omega_1(\varepsilon) = \frac{\partial\Phi_1}{\partial\varepsilon} = \frac{1}{h^2}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\int\limits_{H_1<\varepsilon} d^2q d^2p = \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\Big(\frac{2m\pi L^2\varepsilon}{h^2}\Big) = \frac{2m\pi L^2}{h^2}$$

erhält man analog zu Beispiel 3b

$$J = -\int_0^\infty \frac{(2s+1)\Phi_1(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon = -\frac{2m\pi L^2}{h^2}\int_0^\infty \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon$$

b) Zeigen Sie, dass die mittlere Energie gegeben ist durch $\langle E \rangle = pL^2$.

Lösung: Die mittlere innere Energie ist gegeben durch

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \frac{\varepsilon\,(2s+1)\Omega_1(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} d\varepsilon = \frac{2m\pi L^2}{h^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} d\varepsilon$$

und der Druck berechnet sich mit der Fläche $A = L^2$ zu

$$p = -\left(\frac{\partial J}{\partial A}\right)_{T,\mu} = \frac{2m\pi}{h^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} d\varepsilon.$$

Insgesamt gilt also $\langle E \rangle = pA = pL^2$.