

Statistische Physik I (SS 2020): Tutorium 7

19. Zwei-Moden-Verschrankung

Gegeben sei ein System aus zwei harmonischen Oszillatoren mit Frequenzen ω_A und ω_B und mit jeweiligen Basiszuständen $|n\rangle_A$ und $|n\rangle_B$. Der Dichteoperator des Gesamtsystems sei

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad |\Psi\rangle = \sqrt{1-\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{\frac{n}{2}} |n\rangle_A \otimes |n\rangle_B, \quad 0 < \lambda < 1. \quad (1)$$

- (a) Berechnen Sie den reduzierten Dichteoperator $\hat{\rho}_A$ des Subsystems A. Vergleichen Sie $\hat{\rho}_A$ mit dem kanonischen Dichteoperator eines einzelnen harmonischen Oszillators aus der Vorlesung. Welche "Temperatur" kann $\hat{\rho}_A$ zugeordnet werden?

$$\hat{\rho}_A = \text{Sp}_B\{\hat{\rho}\} = (1-\lambda) \sum_{n,m} \lambda^{\frac{n+m}{2}} \text{Sp}_B\{|n\rangle_A\langle m| \otimes |n\rangle_B\langle m|\} = (1-\lambda) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |n\rangle_A\langle n| \quad (2)$$

Der in der VO hergeleitete kanonische Dichteoperator eines einzelnen harmonischen Oszillators lautet $\sum_{n=0}^{\infty} p_n |n\rangle\langle n|$, mit $p_n = e^{-\beta n \hbar \omega} (1 - e^{-\beta \hbar \omega})^{-1}$, wobei $\beta = (k_B T)^{-1}$.

Eine "effektive" Temperatur kann dann durch die Gleichung

$$(1-\lambda)\lambda^n = e^{-\beta_{\text{eff}} n \hbar \omega} (1 - e^{-\beta_{\text{eff}} \hbar \omega}) \implies \lambda = e^{-\beta_{\text{eff}} \hbar \omega} \implies \beta_{\text{eff}} = -(\hbar \omega)^{-1} \ln \lambda$$

definiert werden.

Daher findet man: $T_{\text{eff}} = -\frac{\hbar \omega}{k_B \ln \lambda}$.

- (b) Sind $\hat{\rho}$ und $\hat{\rho}_A$ rein oder gemischt? Berechnen Sie die Entropie von $\hat{\rho}$ und von $\hat{\rho}_A$. $\hat{\rho}$ entspricht -per Konstruktion- einem reinen Zustand (d.h., dem Zustand $|\Psi\rangle$). Daher: $S[\hat{\rho}] = 0$. **Häufiger Fehler:** In den am 17.05 abgegebenen Lösungen wurde es manchmal nicht sofort erkannt, dass $\hat{\rho}$ einem reinen Zustand entspricht. Dass das der Fall ist, ist es eigentlich direkt aus der Definition $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, wobei $|\Psi\rangle$ ein spezifischer Zustand des Systems ist, ersichtlich.

Die Entropie von $\hat{\rho}_A$ lautet:

$$\begin{aligned} S[\hat{\rho}_A]/k_B &= -\text{Sp}\{\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A\} = -(1-\lambda) \sum_n \lambda^n [n \ln \lambda + \ln(1-\lambda)] \\ &= -\ln(1-\lambda) - \frac{\lambda \ln \lambda}{(1-\lambda)} \end{aligned} \quad (3)$$

wobei die folgenden Summen benutzt wurden

$$\sum_n \lambda^n = \frac{1}{1-\lambda}, \quad \sum_n \lambda^n n = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\sum_n \lambda^n \right] = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\frac{1}{1-\lambda} \right] = \frac{\lambda}{(1-\lambda)^2} \quad (4)$$

20. Variationsrechnung: quartisches Potential

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

$$H(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \Lambda q_i^4 \right) \quad (5)$$

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

$$H^*(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_*^2 q_i^2 \right), \quad (6)$$

und einer variablen Fallenfrequenz ω_* .

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

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

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

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

$$F < F^* + \langle H - H^* \rangle_{\rho^*} \quad (7)$$

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

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

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

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

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

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

$$F_{\text{ap}} = -N k_B T \left\{ \frac{5}{4} + \ln \left[\frac{\sqrt{m} (k_B T)^{3/4}}{N \hbar (12 \Lambda)^{1/4}} \right] \right\}. \quad (8)$$

- (c) Berechnen Sie nun auch die exakte kanonische Zustandssumme Z_K und die freie Energie F für das Gas im quartischen Potential [Gleichung (5)] und vergleichen Sie das Ergebnis für F mit dem Resultat der Variationsrechnung.

$$\begin{aligned}
Z_K &= \int \frac{d^N p d^N x}{N! h^N} \exp\left(-\frac{H(q, p)}{k_B T}\right) = \frac{1}{N!} \left[\frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{\Lambda x^4}{k_B T}\right) \right]^N = \\
&= \frac{1}{N!} \left[\frac{\sqrt{m k_B T} \Gamma(\frac{1}{4})}{2\sqrt{2\pi} \hbar} \left(\frac{k_B T}{\Lambda}\right)^{1/4} \right]^N. \\
F &= -N k_B T \left\{ 1 + \ln \left[\frac{\Gamma(\frac{1}{4})}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{m} (k_B T)^{3/4}}{N \hbar \Lambda^{1/4}} \right] \right\} \approx -N k_B T \left\{ 0.68 + \ln \left[\frac{\sqrt{m} (k_B T)^{3/4}}{N \hbar \Lambda^{1/4}} \right] \right\}. \quad (9)
\end{aligned}$$

Die Variationsrechnung (8) ergibt ihrerseits

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

Hinweis:

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

21. Fermi-Gas in verschiedenen Dimensionen

Betrachten Sie ein nicht-wechselwirkendes und nicht-relativistisches Fermi Gas in einer d -dimensionalen Box mit Volumen $V = L^d$ und Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^d \frac{\hat{p}_{\alpha,i}^2}{2m}.$$

- (a) Berechnen Sie explizit die Zustandsdichte $D(E)$ des Gases als Funktion der Dimension d und vergleichen Sie das Resultat mit dem in der Vorlesung hergeleiteten Ausdruck für $d = 3$. Skizzieren den Verlauf von $D(E)$ für kleine Energien für $d = 1, 2, 3, 4$. Gibt es qualitative Unterschiede?

In der Notation der VO hat man:

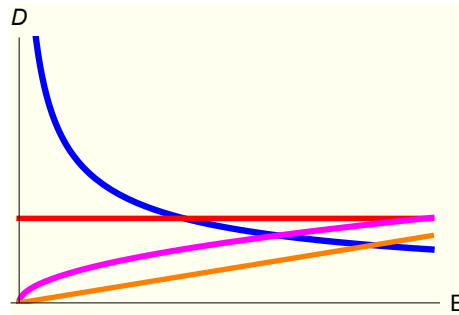
$$\int d^d k F(E_{|\vec{k}|}) = \Omega_d \int dk k^{d-1} F(E_k) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int dk k^{d-1} F(E_k) = \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} \int dE E^{\frac{d-2}{2}} F(E),$$

wo Ω_d die Kugeloberfläche in d -Dimensionen bezeichnet, und beim letzten Schritt die folgende Variabletransformation $k = |\vec{k}| = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ verwendet wurde. Daher berechnen wir, wie in der VO:

$$\begin{aligned}
\sum_n F(E_n) &= \frac{g_S V}{(2\pi)^d} \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} \int dE E^{\frac{d-2}{2}} F(E) = \int dE D(E) F(E) \quad (10) \\
\Rightarrow D(E) &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{d}{2}} \frac{g_S V}{2^d \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(\frac{d}{2})} E^{\frac{d-2}{2}}
\end{aligned}$$

Für $d = 3$ hat man $\Gamma[\frac{3}{2}] = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ und daher: $D(E) = \frac{g_S V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}$, d.h. das in der VO hergeleitete Resultat.

Der Verlauf in den Fällen von $d = 1, 2, 3, 4$ wird in der folgenden Skizze zusammengefasst:



mit $d = 1$ in blau, $d = 2$ in rot, $d = 3$ in pink/magenta, und $d = 4$ in orange. Man merkt dass, wenn $d > 2$, $D(E)$ für $E \rightarrow 0$ verschwindet.

Für $d \leq 2$ findet man stattdessen $D(E \rightarrow 0) = C > 0$, wobei $C = +\infty$ für $d < 2$.

Zusätzliche Anmerkung: Dieser Unterschied hat verschiedenen Folgen. Eine der bekannteste ist die Stabilisation eines gebundenen Zustands für ein System zweier Elektronen im Vakuum (das sogenannten "Cooper Problem", relevant für die Theorie der Supraleitung). Der gebundene Zustand (das "Cooper Paar") tritt in $d \leq 2$ wegen des endlichen Wertes von $D(0)$ sogar für *infinitesimal-kleine* Werte einer effektiven attraktiven Wechselwirkung auf. In $d > 2$, wo $D(0) = 0$, benötigt man stattdessen einen *endlichen* Wert der attraktive WW, um das Cooper Paar im Vakuum zu stabilisieren.

- (b) Bestimmen Sie die Fermi-Energie E_F des Systems als Funktion von N und d und berechnen Sie danach die innere Energie des nicht-relativistischen Fermi Systems in d Dimensionen bei $T = 0$. Die Fermi Energie (E_F) ist von der folgenden ($T = 0$) Bedingung definiert:

$$N = \int_0^{E_F} dE D(E) = \frac{g_S V}{2^d \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} \int_0^{E_F} dE E^{\frac{d-2}{2}} = \frac{g_S V}{2^{d-1} d \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} E_F^{\frac{d}{2}}.$$

Daher

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2}{2m} \left(\frac{2^{d-1} d \Gamma(\frac{d}{2}) N}{g_S V} \right)^{\frac{2}{d}}.$$

Die Energie bei $T = 0$ lautet

$$U = \int_0^{E_F} dE E D(E) = \frac{g_S V}{2^{d-1} \pi^{\frac{d}{2}} (d+2) \Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} \int_0^{E_F} dE E^{\frac{d}{2}} = \frac{g_S V}{2^{d-1} \pi^{\frac{d}{2}} (d+2) \Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} E_F^{\frac{d+2}{2}}$$

- (c) Betrachten Sie nun den Fall eines ultrarelativistischen Fermi-Gases in d Dimensionen mit Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N c \sqrt{\sum_{\alpha=1}^d \hat{p}_{\alpha,i}^2}.$$

Berechnen Sie auch für dieses System die Zustandsdichte $D(E)$ und die Fermi-Energie E_F als Funktion von N und d . Berechnen Sie auch die innere Energie des ultrarelativistischen Fermi-Gases in d Dimensionen bei $T = 0$.

Ähnlich wie oben, findet man hier:

$$\int d^d k F(E_{|\vec{k}|}) = \Omega_d \int dk k^{d-1} F(E_k) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int dk k^{d-1} F(E_k) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{1}{c\hbar}\right)^d \int dE E^{d-1} F(E),$$

wobei wir beim letzten Schritt die folgende Variablentransformation $|k| = k = \frac{E}{\hbar c}$ verwendet haben und, dann

$$\sum_n F(E_n) = \frac{g_S V}{(2\pi)^d} \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{1}{c\hbar}\right)^d \int dE E^{d-1} F(E) = \int dE D(E) F(E) \Rightarrow D(E) = \frac{g_S V}{2^{d-1} c^d \hbar^d \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(\frac{d}{2})} E^{d-1}$$

Mit derselben Prozedur berechnen wir:

$$N = \int_0^{E_F} dE D(E) = \frac{g_S V}{2^{d-1} c^d \hbar^d d \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(\frac{d}{2})} E_F^d,$$

und, letztlich,

$$U = \int_0^{E_F} dE E D(E) = \frac{g_S V}{2^{d-1} c^d \hbar^d (d+1) \pi^{\frac{d}{2}} \Gamma(\frac{d}{2})} E_F^{d+1}$$

Kreuze für: 19a)+b); 20a)+b); 20c); 21a); 21b); 21c)