
Gerhard Kahl & Florian Libisch
STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)
6. Tutoriumstermin (3.6.2022)

T17. Berechnen Sie die Zustandsdichte eines idealen Quantengases in einer Box mit harten Wänden und Kantenlänge L in D Dimensionen, mit $D = 1, 2, 3$. Geben Sie in allen drei Fällen auch den Zusammenhang zwischen Energie und Druck an.

Lösung:

Um die Zustandsdichte zu berechnen, benötigen wir zunächst die Energieeigenzustände des Systems. Die Randbedingung der harten Wände bedeutet, dass wir es mit einem unendlich tiefen Potentialtopf zu tun haben, dessen Wände wir o.B.d.A. bei $r_i = 0$ und $r_i = L$ annehmen, mit $i = 1, \dots, d$, und d der Dimension ($d = 1, \dots, 3$). Die Schrödingergleichung lautet dann

$$-\sum_{i=1}^d \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r_i^2} = E\psi \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi_i}{\partial r_i^2} = -\frac{2mE_i}{\hbar^2} \psi_i = -k_i^2 \psi_i,$$
$$\text{mit } k_i := \sqrt{\frac{2mE_i}{\hbar^2}}, \quad E = \sum_i E_i$$

für die die Lösung bekanntermaßen

$$\psi = \prod_i \psi_i, \quad \psi_i = A e^{ik_i r_i} + B e^{-ik_i r_i}$$

lautet. Wir müssen nun noch die Randbedingungen berücksichtigen. Da es sich um ein unendlich hohes Potential handelt, muss die Wellenfunktion stetig, jedoch nicht stetig differenzierbar sein. Wir erhalten:

$$\psi_i(0) = A + B \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \psi_i(r_i) = C \sin(k_i r_i)$$
$$\psi_i(L) = C \sin(k_i L) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow k_{n_i} = \frac{n_i \pi}{L}, \quad n_i \in \mathbb{N}$$

Somit sind unsere Zustände quantisiert. Im k -Raum sind diese entlang der positiven k -Achse äquidistant verteilt und das "Volumen" eines Zustandes beträgt

$$V_d = \left(\frac{\pi}{L}\right)^d$$

Betrachten wir nun alle Zustände innerhalb einer k -Schale mit Dicke dk , so ergibt sich die Zustandsdichte in dieser Schale als Quotient aus der Dicke der Schale und dem Volumen pro Zustand:

$$\mathcal{D}(k) dk = \frac{2s+1}{2^d} V_d \Omega_d k^{d-1} dk$$

Der Faktor $2s + 1$ kommt hierbei von der inneren Entartung aufgrund des Spins, während wir den Faktor $1/2^d$ einführen mussten, da die Kugelschale sowohl Beiträge aus der positiven als auch aus der negativen k -Achsen einsammelt, wobei nur die positive Achsen auch mit (linear unabhängigen) Zuständen besetzt ist. Ω_d steht für die Winkelintegrale, mit $\Omega_1 = 1$, $\Omega_2 = 2\pi$ und $\Omega_3 = 4\pi$. Dies ist die Zustandsdichte im Wellenzahlraum. Dieses können wir auch auf die Einteilchenenergie ε umschreiben, wofür wir die Transformation

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow dk = \frac{m}{\hbar^2 k} d\varepsilon$$

verwenden. Somit finden wir für die Zustandsdichte abhängig von der Energie:

$$\mathcal{D}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2s + 1}{2^d} \frac{V_d}{\Omega_d} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{d-2}{2}} \frac{m}{\hbar^2} d\varepsilon$$

Für die Berechnung des Drucks verwenden wir das große Potential J . Hierbei wollen wir den Vorfaktor A_d nennen,

$$\mathcal{D}(\varepsilon) d\varepsilon = A\varepsilon^{\frac{d}{2}-1} d\varepsilon, \quad \hat{\mathcal{D}}(\varepsilon) = \int D(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2}{d} A\varepsilon^{\frac{d}{2}}.$$

Dann gilt :

$$J = \int \hat{\mathcal{D}}(\varepsilon) f_{BE}(\varepsilon) d\varepsilon + k_B T \ln(1 - z)$$

Nun wissen wir aber auch, dass für den Erwartungswert der Energie gilt:

$$\langle E \rangle = \int \varepsilon \mathcal{D}(\varepsilon) f_{BE}(\varepsilon) d\varepsilon$$

was in die Gleichung für J eingesetzt ergibt:

$$J = -PV = -\frac{2E}{d} + k_B T \ln(1 - z) \Rightarrow P = \frac{2E}{dV} - \frac{k_B T}{V} \ln(1 - z)$$

In unserem Fall gilt also:

$$P = \frac{2E}{dV} - \frac{k_B T}{V} \ln(1 - z), \quad d = 1, \dots, 3$$

T18. Betrachten Sie das Integral

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1} - 1}, \quad z \in \mathbb{C}, \nu \in \mathbb{R}$$

(a) Zeigen Sie: für $z < 1$ gilt

$$g_\nu(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu}$$

Hinweis: die Umformung $e^x z^{-1} - 1 = e^x z^{-1} (1 - e^{-x} z)$, mit $e^{-x} z < 1 \quad \forall x \in [0, \infty)$, ist hilfreich.

(b) Zeigen Sie: für $z < 1$ gilt

$$\frac{d}{dz}g_\nu(z) = \frac{1}{z}g_{\nu-1}(z)$$

Hinweis: Verwenden Sie ihr Resultat aus (a).

(c) Für $z \ll 1$ kann man die Reihe früher abbrechen. Nehmen Sie an

$$PV = ag_2(z), \quad N = \beta ag_1(z)$$

mit $a \in \mathbb{R}$, $\beta = 1/(k_B T)$ und vernachlässigen Sie in Folge Terme $O(z^3)$. Drücken Sie PV durch N , T und Konstanten aus.

Lösung.

(a) Es ergibt sich unter Verwendung des Hinweises

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1} - 1} dx = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1}} \cdot \frac{1}{1 - e^{-x} z} dx.$$

Den zweiten Bruch im Integral kann man entweder direkt als geometrische Reihe interpretieren [$1/(1-q) = \sum_n q^n$ mit $q = e^{-x}z$], oder durch Einfügen des Terms $1 = 1 + e^{-x}z - e^{-x}z$ in den Zähler umformen auf

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}(1 - e^{-x}z + e^{-x}z)}{e^x z^{-1}(1 - e^{-x}z)} dx \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \left[\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1}} + e^{-x}z \cdot \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1}(1 - e^{-x}z)} dx \right]. \end{aligned}$$

Das rechte Integral ist bis auf den Faktor $e^{-x}z$ ident zu jenem vor der Umformung, welche sich unendlich oft wiederholen lässt und zu folgender Summe und schließlich auch zum Ergebnis führt:

$$= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=1}^\infty z^k \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^{kx}} dx = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^\nu} \underbrace{\int_0^\infty \frac{s^{\nu-1}}{e^s} ds}_{=\Gamma(\nu)} = \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^\nu}$$

(b)

$$\frac{d}{dz}g_\nu(z) = \frac{d}{dz} \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^\nu} = \sum_{k=1}^\infty \frac{kz^{k-1}}{k^\nu} = \frac{1}{z} \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^{\nu-1}} = \frac{1}{z}g_{\nu-1}(z)$$

(c) Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} PV &= ag_2(z) = a \left(z + \frac{z^2}{4} \right) + \mathcal{O}(z^3), \\ N &= \beta ag_1(z) = \beta a \left(z + \frac{z^2}{2} \right) + \mathcal{O}(z^3), \end{aligned}$$

sowie

$$N^2 = \beta^2 a^2 z^2 + \mathcal{O}(z^3)$$

und führt damit zu

$$PV = Nk_B T - \frac{(Nk_B T)^2}{4a} + \mathcal{O}(z^3)$$

T19. Betrachten Sie ein ideales Bose-Gas in zwei Dimensionen ($\varepsilon = \hbar^2 k^2 / (2m)$).

- Berechnen Sie das große Potential, den Druck und die Teilchenzahl. Verwenden Sie die Zustandsdichte aus Beispiel T17, und verwenden Sie geeignete $g_\nu(z)$.
- Berechnen Sie im Hochtemperaturlimes die Gasgleichung für das Quantengas bis zur Quantenkorrektur erster Ordnung.
- Gibt es für dieses System Bose-Einstein-Kondensation? Begründen Sie ihre Antwort.
- Berechnen Sie die Wärmekapazität des Gases bei konstantem Volumen mittels $C_V = (\partial_T E)_{N,V}$. Hinweis: Benutzen Sie die Formelsammlung für $\partial_z g_\nu(z)$. Geschicktes Auswerten von $(\partial_T N)_{N,V}$ liefert einen Ausdruck für $(z^{-1} \partial_T z)_{N,V}$.
- Leiten sie im Hochtemperaturlimes eine Quantenkorrektur erster Ordnung zum klassischen Resultat für C_V ab.

Lösung: (a) Wir verwenden die konstante Zustandsdichte in zwei Dimensionen aus dem ersten Beispiel $D(E) = \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2} = \text{const}$. Nun berechnen wir J mittels partieller Integration:

$$\begin{aligned} J &= \sum_i k_B T \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}) \approx \int k_B T D \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) d\varepsilon + \underbrace{J_{\varepsilon=0}}_{k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu})} = \\ &= \underbrace{k_B T D \varepsilon \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) \Big|_0^\infty}_{=0} - \int D \varepsilon \frac{e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon + k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu}) = \\ &= -\frac{D}{\beta^2} \underbrace{\int \frac{(\varepsilon\beta)}{e^{(\beta\varepsilon)} z^{-1} - 1} d(\varepsilon\beta)}_{g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^x z^{-1} - 1} dx} + k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu}) \stackrel{\Gamma(2)=1}{=} -Dk_B^2 T^2 g_2(z) + k_B T \ln(1 - e^{\beta\mu}) \end{aligned}$$

$$J = -PV \quad \Rightarrow \quad P = -\frac{J}{V} = \frac{D}{\beta^2 V} g_2(z) - \frac{1}{\beta V} \ln(1 - e^{\beta\mu})$$

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = -\frac{\partial J}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \mu}$$

Wir verwenden die Beziehungen:

$$z = e^{\beta\mu} \Rightarrow \frac{\partial z}{\partial \mu} = \beta z \quad , \quad \frac{\partial}{\partial z} g_\nu(z) = \frac{1}{z} g_{\nu-1}(z)$$

Es ergibt sich nun:

$$\langle N \rangle = \frac{D}{\beta} g_1(z) + \frac{z}{1-z}$$

(b) Im Hochtemperaturlimes gilt : $\lim_{T \rightarrow \infty} \beta\mu = -\infty \Rightarrow z = e^{\beta\mu} \ll 1$ und für kleine z gilt:

$$g_\nu(z) \approx \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu}$$

$$J \approx -\frac{D}{\beta^2} \left(z + \frac{z^2}{4} \right) + k_B T \underbrace{\ln(1-z)}_0$$

$$N := \langle N \rangle \approx \frac{D}{\beta} \left(z + \frac{z^2}{2} \right) \Rightarrow z = +\sqrt{1 + \frac{2\beta N}{D}} - 1 \quad \text{weil } z > 0$$

$$\text{Taylor-Entwicklung} \Rightarrow z = \frac{\beta N}{D} - \frac{\beta^2 N^2}{2D^2} + \dots \approx \frac{\beta N}{D} \left(1 - \frac{\beta N}{2D} \right)$$

$$\text{wir setzen nun } z \text{ in } J \text{ ein: } PV = -J \approx \frac{N}{\beta} \left(1 - \frac{\beta N}{4D} \right) = Nk_B T \left(1 - \frac{\beta N}{4D} \right)$$

(c) Wenn wir den Niedrigtemperaturlimes betrachten, geht $T \rightarrow 0, z \rightarrow 1$. Wenn wir uns nun unseren Erwartungswert für die Besetzungszahl ansehen, sehen wir, dass sowohl der Term für die Besetzung des Grundzustandes, als auch der Term für die Besetzung der angeregten Zustände divergiert. Es kommt also zu keiner BE-Kondensation.

$$\lim_{z \rightarrow 1} \langle N \rangle = \lim_{z \rightarrow 1} \left(\underbrace{\frac{D}{\beta} g_1(z)}_{\rightarrow \infty} + \underbrace{\frac{z}{1-z}}_{\rightarrow \infty} \right)$$

(d) Nun zur Berechnung der Wärmekapazität:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \epsilon D f_{BE}(\epsilon) d\epsilon = \dots = Dk_B^2 T^2 g_2(z)$$

$$c_V = (\partial_T E)_{N,V} = Dk_B^2 [2T g_2(z) + T^2 \partial_T g_2(z)] = Dk_B^2 [2T g_2(z) + T^2 \underbrace{\partial_z g_2(z)}_{z^{-1} g_1(z)} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,V}]$$

Für hohe Temperaturen kann der Grundzustandsbeitrag zu $\langle N \rangle$ vernachlässigt werden und wir können einen Ausdruck für $(\frac{\partial z}{\partial T})_{N,V}$ wie folgt finden:

$$\begin{aligned}
(\partial_T N)_{N,V} = 0 &= \partial_T [Dk_B T g_1(z)] = Dk_B g_1(z) + Dk_B T z^{-1} g_0(z) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,V} \\
&\Rightarrow \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{N,V} = - \frac{g_1(z) z}{g_0(z) T} \\
c_V &= Dk_B^2 \left[2T g_2(z) - T^2 z^{-1} g_1(z) \frac{g_1(z) z}{g_0(z) T} \right] = Nk_B \left[2 \frac{g_2(z)}{g_1(z)} - \frac{g_1(z)}{g_0(z)} \right]
\end{aligned}$$

(d) Für hohe Temperaturen (kleine z) erhalten wir:

$$\begin{aligned}
g_\nu(z) &\approx \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\nu} \\
\Rightarrow c_V &= Nk_B \left[2 \frac{z + z^2/4 + \dots}{z + z^2/2 + \dots} - \frac{z + z^2/2 + \dots}{z + z^2 + \dots} \right] = \\
&= Nk_B \left[2 \frac{1 + z/4}{1 + z/2} - \frac{1 + z/2}{1 + z} \right] + \mathcal{O}(z^2) = \\
&= Nk_B [2(1 + z/4)(1 - z/2) - (1 + z/2)(1 - z)] + \mathcal{O}(z^2) = \\
&= Nk_B + \mathcal{O}(z^2)
\end{aligned}$$

Zu kreuzen: 17; 18ab, 18c; 19a, 19b, 19c, 19d, 19e