Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) **SS 17**

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Musterlösung: Blatt 7
Besprechung: 09.06.2017

---

1. Besetsungszahlen in einem Fermi-Gas: (9+5=14 Punkte)

Betrachten Sie ein Fermi-Gas im großkanonischen Ensemble. Die Teilchen sind ununterscheidbar und unabhängig. Wir bezeichnen mit n_λ die Zahl der Teilchen, die sich im Quantenzustand λ befinden.

Bemerkung (Grundlagen aus der Vorlesung):

In einem Fermi-Gas

$$n_\lambda = \begin{cases} 1, & \text{wenn } \lambda \text{ besetzt ist} \\ 0, & \text{wenn } \lambda \text{ leer ist} \end{cases} \Rightarrow \; n_\lambda = n_\lambda^2.$$

Für die Einteilchen-Zustände gilt:

$$H_1|\lambda\rangle \;=\; \epsilon_\lambda|\lambda\rangle$$

wobei H_1 der Hamiltonoperator eines Teilchens ist. Die Vielteilchen-Zustände geben wir in der Besetzungszahldarstellung an:

$$|\Psi\rangle \;=\; |n_1, n_2, ..., n_\lambda, ...\rangle$$

wobei n_λ angibt, wie viele Teilchen sich im Einteilchen-Zustand $|\lambda\rangle$ befinden.
Damit ist dann sowohl die Gesamtenergie und als auch die Gesamtteilchenzahl eindeutig durch die n_λ charakterisiert:

$$E(\{n_\lambda\}) \;=\; \sum_\lambda \epsilon_\lambda n_\lambda \qquad N(\{n_\lambda\}) \;=\; \sum_\lambda n_\lambda.$$

Man kann dann die Zustandssumme im großkanonischen Ensemble wie folgt berechnen:

$$Z_G = \sum_{\{n_\lambda\}} e^{-\beta[E(\{n_\lambda\}) - \mu N(\{n_\lambda\})]} = \sum_{\{n_\lambda\}} e^{-\beta \sum_\lambda n_\lambda(\epsilon_\lambda - \mu)} = \sum_{n_1, n_2, \ldots} e^{-\beta n_1(\epsilon_1 - \mu)} e^{-\beta n_2(\epsilon_2 - \mu)} \ldots$$

$$\Rightarrow \quad Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda \qquad \text{mit } Z_\lambda \;=\; \sum_{n_\lambda} e^{-\beta n_\lambda(\epsilon_\lambda - \mu)}.$$

Für Fermionen kann n_λ nur die Werte 0 oder 1 annehmen (Pauli-Prinzip), dann kann man Z_λ einfach berechnen:

$$Z_\lambda = \underbrace{1}_{n_\lambda = 0} + \underbrace{e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}_{n_\lambda = 1}.$$

Die großkanonische Zustandsfunktion lautet:

$$W(\{n_\lambda\}) \;=\; \frac{1}{Z_G} e^{-\beta(E(\{n_\lambda\}) - \mu N(\{n_\lambda\}))}$$

und gibt die Wahrscheinlichkeit an, das System in einem Zustand $\{n_\lambda\}$ zu finden. Weil Zustandsoperator und Zustandssumme faktorisieren, ist die Wahrscheinlichkeit, dass $|\lambda\rangle$ mit n_λ Teilchen besetzt ist, gegeben durch:

$$W(n_\lambda) \; = \; \frac{1}{Z_\lambda} e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda \, - \, \mu)}$$

(a) Beweisen Sie, dass $\langle n_\lambda^2 \rangle = \langle n_\lambda \rangle$ und $\langle n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} \rangle = \langle n_{\lambda_1} \rangle \langle n_{\lambda_2} \rangle$.

Lösung:

Die mittlere Besetzungszahl eines Zustands ist durch

$$\langle n_\lambda \rangle \; = \; \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda} n_\lambda e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda \, - \, \mu)} \; = \; \frac{e^{-\beta(\epsilon_\lambda \, - \, \mu)}}{Z_\lambda} \; = \; \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda \, - \, \mu)} \; + \; 1}$$

gegeben. Wegen $n_\lambda = \{0, 1\}$ gilt bei Fermionen $n_\lambda^2 \; = \; n_\lambda$ und deswegen offensichtlich $W(n_\lambda^2) \; = \; W(n_\lambda)$. Damit folgt:

$$\langle n_\lambda^2 \rangle \; = \; \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda} n_\lambda^2 e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda \, - \, \mu)} \; = \; \frac{e^{-\beta(\epsilon_\lambda \, - \, \mu)}}{Z_\lambda} \; = \; \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda \, - \, \mu)} \; + \; 1},$$

womit $\langle n_\lambda \rangle \; = \; \langle n_\lambda^2 \rangle$ gezeigt ist:

$$\langle n_\lambda^2 \rangle = \sum_{n_\lambda} n_\lambda^2 W_\lambda(n_\lambda) = \sum_{n_\lambda} n_\lambda W_\lambda(n_\lambda) = \langle n_\lambda \rangle$$

Nun untersuchen wir die Korrelation zweier Besetzungszahlen. Für $\lambda_1 \neq \lambda_2$ gilt:

$$W_{\lambda_1 \lambda_2}(n_{\lambda_1 \lambda_2}) = W_{\lambda_1}(n_{\lambda_1}) W_{\lambda_2}(n_{\lambda_2}),$$

Wie oben berechnen wir wieder:

$$\begin{aligned}
\langle n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} \rangle &= \frac{1}{Z_{\lambda_1}} \frac{1}{Z_{\lambda_2}} \sum_{n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}} n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} e^{-\beta n_{\lambda_1} (\epsilon_{\lambda_1} \, - \, \mu)} e^{-\beta n_{\lambda_2} (\epsilon_{\lambda_2} \, - \, \mu)} \\
&= \frac{1}{Z_{\lambda_1} Z_{\lambda_2}} e^{-\beta(\epsilon_{\lambda_1} \, + \, \epsilon_{\lambda_2} \, - \, 2\mu)} \; = \; \frac{1}{(e^{\beta(\epsilon_{\lambda_1} \, - \, \mu)} \; + \; 1)(e^{\beta(\epsilon_{\lambda_2} \, - \, \mu)} \; + \; 1)}
\end{aligned}$$

Dann benutzen wir das Ergebnis für $\langle n_\lambda \rangle$:

$$\langle n_{\lambda_1} \rangle \langle n_{\lambda_2} \rangle \; = \; \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\lambda_1} \, - \, \mu)} \; + \; 1} \cdot \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\lambda_2} \, - \, \mu)} \; + \; 1}$$

womit die Relation $\langle n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} \rangle \; = \; \langle n_{\lambda_1} \rangle \langle n_{\lambda_2} \rangle$ gezeigt ist.

$$\begin{aligned}
\langle n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} \rangle &= \sum_{n_{\lambda_1} n_{\lambda_2}} n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} W_{\lambda_1 \lambda_2}(n_{\lambda_1 \lambda_2}) = \sum_{n_{\lambda_1} n_{\lambda_2}} n_{\lambda_1} n_{\lambda_2} W_{\lambda_1}(n_{\lambda_1}) W_{\lambda_2}(n_{\lambda_2}) \\
&= \sum_{n_{\lambda_1}} n_{\lambda_1} W_{\lambda_1}(n_{\lambda_1}) \sum_{n_{\lambda_2}} n_{\lambda_2} W_{\lambda_2}(n_{\lambda_2}) = \langle n_{\lambda_1} \rangle \langle n_{\lambda_2} \rangle.
\end{aligned}$$

Die Besetzungszahlen der Einteilchen-Niveaus in einem idealen Fermi-Gas sind also nicht korreliert.

(b) Zeigen Sie, dass für die Schwankung der Gesamtteilchenzahl $(\Delta N)^2 = \langle N^2\rangle - \langle N\rangle^2$

$$\text{(i)}\quad \frac{\Delta N}{\langle N\rangle} \leqslant \frac{1}{\sqrt{\langle N\rangle}};\qquad \text{(ii)}\quad \frac{\Delta N}{\langle N\rangle} \to 0 \quad \text{für } T \to 0 \text{ und } \langle N\rangle = \text{konst.}$$

Lösung: Für die Gesamtteilchenzahl gilt

$$\langle N\rangle = \sum_\lambda \langle n_\lambda\rangle,$$

$$\langle N\rangle^2 = \left(\sum_\lambda \langle n_\lambda\rangle\right)^2 = \sum_\lambda \langle n_\lambda\rangle^2 + \sum_{\lambda_1\neq\lambda_2} \langle n_{\lambda_1}\rangle\langle n_{\lambda_2}\rangle,$$

$$\langle N^2\rangle = \left\langle \left(\sum_\lambda n_\lambda\right)^2 \right\rangle = \sum_\lambda \langle n_\lambda^2\rangle + \sum_{\lambda_1\neq\lambda_2} \langle n_{\lambda_1} n_{\lambda_2}\rangle.$$

Mit den oben berechneten Relationen erhalten wir

$$(\Delta N)^2 \equiv \langle N^2\rangle - \langle N\rangle^2 = \sum_\lambda \left[\langle n_\lambda^2\rangle - \langle n_\lambda\rangle^2\right] = \sum_\lambda \langle n_\lambda\rangle \left[1 - \langle n_\lambda\rangle\right],$$

deswegen

$$(\Delta N)^2 = \langle N\rangle - \sum_\lambda \langle n_\lambda\rangle^2 \leqslant \langle N\rangle.$$

Letztendlich

$$\Delta N \leqslant \sqrt{\langle N\rangle} \ \Rightarrow\ \frac{\Delta N}{\langle N\rangle} \leqslant \frac{1}{\sqrt{\langle N\rangle}}.$$

Wenn $T = 0$, dann $\langle n_\lambda\rangle = 0, 1$, deswegen

$$\Delta N(T = 0) = 0$$

und

$$\frac{\Delta N}{\langle N\rangle} \to 0 \quad \text{für } T \to 0 \text{ und } \langle N\rangle = \text{konst.}$$

2. Prinzip der maximalen Entropie in einem Quantengas: (5+5+6=16 Punkte)

In dieser Aufgabe wird die Entropie eines idealen Quantengas in einem beliebigen Zustand des Systems (der im Allgemeinen kein Gleichgewichtszustand ist) diskutiert. Dabei soll gezeigt werden, dass die Bose- und Fermi-Verteilungsfunktionen aus dem Prinzip der maximalen Entropie abgeleitet werden können.

Wir betrachten ein Quantengas aus $N \gg 1$ nichtwechselwirkenden Bosonen oder Fermionen. Wir wählen ein Energie-Fenster ΔE, so dass ΔE klein im Vergleich zur Gesamtenergie E des Systems ist. Dann kann man Einteilchen-Zustände λ mit Energien $j\Delta E < \epsilon_\lambda < (j+1)\Delta E$ zur Gruppe j zusammenfassen. Jede Gruppe enthält $\nu_j \gg 1$ Einteilchen-Zustände, die von $N_j \gg 1$ Teilchen besetzt werden. Die Entropie des makroskopischen Zustands ist dann durch die Verteilung auf die einzelnen Gruppen gegeben:

$$S = k_B \sum_j \ln\left[\Gamma_j(N_j)\right]$$

Hier ist $\Gamma_j(N_j)$ die Anzahl der Möglichkeiten N_j Teilchen auf die ν_j Zustände in Gruppe j zu verteilen.

(a) Berechnen Sie $\Gamma_j(N_j)$ und die Entropie für Fermionen. Drücken Sie Ihr Ergebnis in Abhängigkeit von ν_j und der mittleren Teilchenzahl der Gruppe j, $n_j = N_j/\nu_j$, aus.

Lösung:

Wir betrachten die j-te Gruppe von Zuständen. Das heißt, dass wir N_j Fermionen in ν_j Zustände platzieren müssen. Jeder Zustand kann nur durch ein Fermion besetzt werden. Deshalb ist die Anzahl der Möglichkeiten die Fermionen zu platzieren gleich der Anzahl an Möglichkeiten N_j Zustände aus den ν_j verfügbaren Zuständen auszuwählen:

$$\Gamma_j(N_j) = \frac{\nu_j!}{N_j!(\nu_j - N_j)!}. \tag{1}$$

Wir können daher die Entropie mit der asymtotischen Näherung

$$\ln n! \approx n \ln n - n, \qquad n \gg 1. \tag{2}$$

schreiben als

$$\begin{aligned}
S = k_B \sum_j \ln\left[\Gamma_j(N_j)\right] \\
= k_B \sum_j \left[\nu_j \ln \nu_j - N_j \ln N_j - (\nu_j - N_j)\ln(\nu_j - N_j) - \nu_j + N_j + (\nu_j - N_j)\right] \\
= k_B \sum_j \left[(\nu_j - N_j + N_j)\ln \nu_j - N_j \ln N_j - (\nu_j - N_j)\ln(\nu_j - N_j)\right] = \\
= -k_B \sum_j \left[N_j \ln \frac{N_j}{\nu_j} + (\nu_j - N_j)\ln \frac{\nu_j - N_j}{\nu_j}\right] \\
= -k_B \sum_j \nu_j \left[n_j \ln n_j + (1 - n_j)\ln(1 - n_j)\right].
\end{aligned} \tag{3}$$

(b) Wiederholen Sie die Rechnung aus der Aufgabe (a) für Bosonen.

Lösung:

Im Fall von Bosonen kann jeder Zustand maximal N_j-fach besetzt sein. Die Anzahl der Möglichkeiten, N_j Bosonen in ν_j Zustände zu verteilen ist identisch zur Anzahl der Möglichkeiten, N_j identische Bälle in ν_j Boxen zu verteilen.

Das erste Element muss eine Box (Zustand) sein. Dann bleiben $N_j + \nu_j - 1$ Elemente, die in irgendeiner Weise angeordnet werden müssen. Allerdings sind die Anordnungen identisch, die durch Permutation von Boxen oder durch Permutation von Bällen ineinander überführt werden können, wir müssen deshalb durch die Anzahl möglicher Permutationen $N_j!$ und $(\nu_j - 1)!$ teilen. Damit

$$\Gamma_j(N_j) = \frac{(N_j + \nu_j - 1)!}{N_j!(\nu_j - 1)!} \tag{4}$$

Wir berechnen die Entropie analog zur vorherigen Teilaufgabe. Das Ergebnis lautet

$$S = \sum_j \nu_j \left[(1 + n_j)\ln(1 + n_j) - n_j \ln n_j\right]. \tag{5}$$

(c) Bei festgehaltenen E und N benutzen Sie das Prinzip der maximalen Entropie im Gleichgewicht um die Fermi- und Bose-Verteilungsfunktionen zu erhalten.

Lösung:
Um die Fermi-und Bose-Statistik aus der Prinzip der maximalen Entropie herzuleiten, beginnen wir mit

$$S = -k_B \sum_j \nu_j \left[n_j \ln n_j + (1-n_j)\ln(1-n_j) \right] \tag{6}$$

Wir halten die Gesamtteilchenzahl $\sum_j N_j = \nu_j n_j$ und die Gesamtenergie $\sum_j E_j \nu_j n_j$ in unserem System fest und benutzen Lagrangemultipikatoren um diese Randbedingungen in Betracht zu ziehen, insbesondere müssen wir

$$-k_B \sum_j \nu_j \left[n_j \ln n_j + (1-n_j)\ln(1-n_j) \right] - \lambda_N \sum_j \nu_j n_j - \lambda_E \sum_j \nu_j E_j n_j. \tag{7}$$

maximieren. Ableiten nach n_j führt zu

$$-\ln n_j + \ln(1-n_j) - \lambda_N - E_j \lambda_E = 0. \tag{8}$$

Die Lösung

$$n_j = \frac{1}{1+\exp\left(\lambda_N + E_j\lambda_E\right)} \tag{9}$$

ist die Fermi-Verteilung mit der Temperatur $T = 1/k_B\lambda_E$ und chemischen Potential $\mu = -k_B T \lambda_N$.
Die Betrachtung der Bose-Verteilung ist komplett analog.

3. **Wärmekapazität des idealen Bose-Gases:** (10 Punkte + 10 Bonuspunkte)

Betrachten Sie ein ideales Bose-Gas aus spinlosen Teilchen in D Dimensionen mit chemischem Potential $\mu = 0$.

(a) Bestimmen Sie das Temperaturverhalten der Wärmekapazität c_V für die Dispersionsrelation des Teilchens

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon_0 \cdot \left(\frac{p}{p_0}\right)^\alpha, \qquad \alpha > 0$$

mit ε_0, p_0 Konstanten und $p = |\vec{p}|$. Die explizite Berechnung des T-unabhängigen Koeffizienten ist nicht gefordert.

Lösung

Innere Energie:

$$\frac{U}{V} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D}\int d^D p \frac{\varepsilon_{\vec{p}}}{e^{\beta\varepsilon_{\vec{p}}}-1} = \frac{\varepsilon_0 p_0^D}{(2\pi\hbar)^D}\sigma_D \int dq \frac{q^{D-1+\alpha}}{\exp\left(\beta\varepsilon_0 q^\alpha\right)-1} \tag{10}$$

wobei $q = p/p_0$ und σ_D die Oberfläche einer D-dimensionalen Einheitskugel ist.
Wir substituieren:

$$z = (\beta\varepsilon_0)^{1/\alpha} q, \qquad q = z\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_0}\right)^{1/\alpha}$$

$$\frac{U}{V} = \frac{\varepsilon_0 p_0^D}{(2\pi\hbar)^D}\sigma_D \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_0}\right)^{\frac{D+\alpha}{\alpha}} \underbrace{\int dz \frac{z^{D+\alpha-1}}{e^{z^\alpha}-1}}_{A_{D,\alpha}} \tag{11}$$

wobei $A_{D,\alpha}$ ein T-unabhängigen Koeffizient ist. Damit folgt:

$$c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{D+\alpha}{\alpha}\sigma_D A_{D,\alpha}\frac{\varepsilon_0 p_0^D}{(2\pi\hbar)^D}\frac{1}{T}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_0}\right)^{\frac{D+\alpha}{\alpha}} \propto T^{\frac{D}{\alpha}}. \tag{12}$$

(b) **10 Bonuspunkte:**
Betrachten Sie nun die Dispersionsrelation

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \Delta + \frac{A}{2p_0^2}\left(p^2 - p_0^2\right)^2,$$

wobei p_0, A und $\Delta \ll Ap_0^2$ Konstanten seien. Bestimmen Sie das führende Temperaturverhalten der Wärmekapazität c_V sowohl für $k_B T \ll \Delta$ und $\Delta \ll k_B T \ll Ap_0^2$.
Lösung:
Für $k_B T \ll \Delta$ ist die Energie im Prinzip unabhängig vom Impuls und daher können wir näherungsweise schreiben

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \Delta \tag{13}$$

Die innere Energie vereinfacht sich zu

$$U \sim \frac{\Delta}{e^{\beta\Delta} - 1} \simeq \Delta e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \tag{14}$$

und die Wärmekapazität ist ebenfalls exponentiell klein.
Die Lösung ist interessanter für $k_B T \gg \Delta$. Zur Vereinfachung in diesem Bereich setzen wir $\Delta = 0$. Die niedrigste Energie ist nicht (wie im vorherigen Problem) bei $p = 0$, sondern für Impulse auf der Kugel $|\vec{p}| = p_0$. Wir entwickeln die Impulse um diese Kugel und schreiben mit $\vec{q} = \vec{p} - p_0\vec{p}/p$:

$$\begin{aligned} \frac{U}{V} &\sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^D}\int dq\ (q - p_0)^{D-1}\ \frac{Aq^2}{\exp(\beta A q^2) - 1} \\ &\simeq \frac{p_0^{D-1}}{(2\pi\hbar)^D}\int dq\, \frac{Aq^2}{\exp(\beta A q^2) - 1}. \end{aligned} \tag{15}$$

Im letzten Schritt haben wir benutzt, dass $k_B T \ll Ap_0^2$. Dies impliziert, dass die relevanten Impulse des Integrals $q \ll p_0$ befolgen. Das erhaltene Ergebnis ist (für alle Dimensionen) gleich dem Ergebnis aus 3(a) mit $D = 1$ und $\alpha = 2$. Wir können daher einfach dieses Resultat benutzen, welches lautet

$$U \propto T^{3/2} \tag{16}$$

und

$$c_V \propto T^{1/2}. \tag{17}$$

Systeme mit einer erweiterten $(D-1)$-dimensionalen Manifaltigkeit der niederenergetischen Anregungen verhalten sich effektiv wie ein ein-dimensionales System.