Theorie der Kondensierten Materie I WS 2012/2013

Prof. Dr. J. Schmalian
Dr. P. Orth

Blatt 1
Besprechung 19.10.2012

---

1. Ideales Fermi Gas: (10 + 15 + 5 + 10 = 40 Punkte)

In dieser Aufgabe wiederholen wir die statistische Mechanik des idealen Fermi Gases. Der Hamilton Operator des idealen Fermi Gases lautet $H = \sum_{\boldsymbol{k},s} \epsilon_{\boldsymbol{k},s} n_{\boldsymbol{k},s}$ mit Dispersionsrelation $\epsilon_{\boldsymbol{k},s} = \frac{\hbar^2}{2m}|\boldsymbol{k}|^2$ und $n_{\boldsymbol{k},s}$ ist die Besetzungszahl des Zustands mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$. In $d = 3$ gilt zum Beispiel $\boldsymbol{k}_{l_x,l_y,l_z} = \frac{2\pi}{L}(l_x, l_y, l_z)$ mit $l_\alpha \in \mathbb{Z}$. Wir bezeichnen mögliche weitere Quantenzahlen wie Spin mit s.

(a) Leiten Sie den Ausdruck für das *grosskanonische Potential* $\Omega = -k_B T \log Z_g$ beginnend von der grosskanonischen Zustandssumme $Z_g = \mathrm{Tr} e^{-\beta(H-\mu N)}$ her.

(b) Berechnen Sie die Entropie $S = -\partial\Omega/\partial T|_{V,\mu}$ und drücken Sie diese allein durch die Fermi-Funktion $f(\epsilon - \mu) = 1/\{\exp[\beta(\epsilon - \mu)] + 1\}$ aus.

Interpretieren Sie das Ergebnis im Sinne der von-Neumann Entropie $S = -\mathrm{Tr}\big(\rho \log \rho\big)$ mit Dichtematrix ρ.

(c) Berechnen Sie die Teilchenzahl $N = -\partial\Omega/\partial\mu|_{T,V}$.

(d) Berechnen Sie die innere Energie aus der Relation $E = TS + \mu N - pV$. Das Ergebnis sollte Ihnen bekannt vorkommen.

2. Temperaturverhalten des chemischen Potentials $\mu(T)$ und klassischer Limes (15 + 15 + 15 + 15 = 60 Punkte)

In dieser Aufgabe zeigen Sie, dass die Fermi-Verteilung in die Boltzmann-Verteilung übergeht im Limes hoher Temperaturen. Da wir Summen über $\sum_{\boldsymbol{k}} \rightarrow \frac{L^d}{(2\pi)^d}\int d^d k$ üblicherweise ausdrücken als Energie-Integrale über $\int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon)$ wiederholen wir auch die Definition der Zustandsdichte $\rho(\epsilon)$.

(a) Berechnen Sie die Zustandsdichte

$$\rho(\epsilon_0) = \frac{L^d}{(2\pi)^d} \int d^d k \delta(\epsilon_0 - \epsilon(\boldsymbol{k})) \tag{1}$$

eines klassischen Gases mit Dispersionsrelation $\epsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}|\boldsymbol{k}|^2$ in $d = 1, 2, 3$ Dimensionen.

In den nächsten beiden Teilaufgaben (b) und (c) wollen wir zeigen, dass die Fermi-Verteilung $f(\epsilon, \mu, T) = 1/\{\exp[\beta(\epsilon - \mu)] + 1\}$ im Limes hoher Temperaturesn in die Boltzmann-Verteilung $n_{cl} = \exp\big[-\beta(\epsilon - \mu)\big]$ übergeht. In Aufgabe (d) berechnen wir dann die erste Ordnung der Quanten-Korrektur zum klassischen Ergebnis.

(b) Leiten Sie dazu zuerst einmal die funktionale Form des chemischen Potentials $\mu(T)$ für hohe Temperaturen her. Benutzen Sie die klassische Verteilung $n_{\boldsymbol{k},s} = n_{cl}(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)$, und nehmen Sie an das Gas sei in $d = 3$ Dimensionen (wobei die Rechnung analog für allgemeines d funktioniert). Verwenden Sie, dass $\mu(T)$ definiert ist über die Normierung

$$N = \sum_{\boldsymbol{k},s} n_{\boldsymbol{k},s} \tag{2}$$

wobei N die (hier festgehaltenen) Gesamtteilchenzahl des Systems ist.

Intepretieren Sie Ihr Ergebnis: was bedeutet es physikalisch, dass $\mu(T)$ negativ ist. Wir wissen ja dass $\mu(T)$ die Änderung der freien Energie unter Hinzufügung eines Teilchens in das System bei fester Temperatur T und Volumen V ist.

(c) Zeigen Sie nun, dass die Fermi-Verteilung im Limes hoher Temperaturen in die Boltzmann-Verteilung übergeht. Starten Sie wiederum von der Beziehung $N = \sum_{\boldsymbol{k},s} n_{\boldsymbol{k},s}$, wobei Sie nun die Fermi-Verteilung $n_{\boldsymbol{k},s} = f(\epsilon_{\boldsymbol{k}}, s)$ benutzen und entwickeln Sie die Fermi-Funktion f in eine geometrische Reihe.

Vergleichen Sie mit dem vorherigen Aufgabenteil. Hinweis: Sie können das Integral auch direkt ausrechnen (z.B. mit *Mathematica*) um Ihre Antwort zu überprüfen.

(d) Wir wollen nun die erste Quanten-Korrektur zum klassischen Boltzmann Ergebnis herleiten. Die meiste Arbeit dafür haben Sie bereits in den vorherigen Teilaufgaben geleistet. Wir interessieren uns hier für die Zustandsgleichung eines Fermi Gases, und wollen daher den Druck $p(T, V, N)$ berechnen.

Starten Sie wieder vom grosskanonischen Potential $\Omega(T, V, \mu)$, verwenden Sie die Zustandsdichte $\rho(\epsilon)$ in $d = 3$ Dimensionen und integrieren Sie partiell. Wir haben bereits gelernt, dass wir für hohe Temperaturen in der Fugazität $e^{\beta\mu}$ entwickeln können (siehe Form von $\mu(T)$ die Sie in den letzten Teilaufgaben berechnet haben). Für die Zustandsgleichung benötigen wir den Druck als Funktion der Variablen $\{T, V, N\}$ (und nicht $\{T, V, \mu\}$) und müssen daher noch eine Legendre-Transformation zur freien Energie vornehmen $F = \Omega + \mu N$.

Bestimmen Sie nun aus $p(T, V, N) = -\partial F(T, V, N)/\partial V|_{T,N}$ die erste Ordnung Quantenkorrektur zur idealen Gasgleichung. Sie ben ötigen dafür die genaue Form von $\mu(T, V, N)$ für hohe Temperaturen aus der letzten Aufgabe. Nimmt der Druck zu oder ab und was bedeutet das physikalisch ?