Sommer-Semester 2011

Moderne Theoretische Physik III

Statistische Physik

Dozent: Alexander Shnirman
Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Di 09:45-11:15, Lehmann HS 022, Geb 30.22
Do 09:45-11:15, Lehmann HS 022, Geb 30.22

http://www.tkm.kit.edu/lehre/ss2011_1017.php

Ideale Gase

1) Maxwell-Boltzmann-Gas

das ideale klassische Gas

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}$$

kanonisches Ensemble

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\{\mathbf{p}_i\}} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}}$$

$\frac{1}{N!}$ Ununterscheidbarkeit

Kasten L_x, L_y, L_z

Zustände $(p_x, p_y, p_z) = \left(\frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_y, \frac{2\pi\hbar}{L_z} n_z \right)$

Maxwell-Boltzmann-Gas

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}$$

$$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = \left(\frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_y, \frac{2\pi\hbar}{L_z} n_z \right)$$

Kombinatorik

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\{\mathbf{p}_i\}} e^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}} = \frac{1}{N!} \left(\sum_{\mathbf{p}} e^{-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} \right)^N = \frac{1}{N!} (Z_1)^N$$

$$Z_1 \equiv \sum_{\mathbf{p}} e^{-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} = V \int \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} = \frac{V}{\lambda_{\mathrm{T}}^3}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Ein-Teilchen-Zustandssumme

$$\frac{1}{\lambda_{\mathrm{T}}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \quad \Rightarrow \quad \lambda_{\mathrm{T}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_{\mathrm{B}} T}}$$

thermische de Broglie-Wellenlänge

Maxwell-Boltzmann-Gas

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \qquad Z = \frac{1}{N!}\left(Z_1\right)^N \qquad Z_1 = \frac{V}{\lambda_{\mathrm{T}}^3} \qquad \lambda_{\mathrm{T}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_{\mathrm{B}} T}}$$

$$F(T,V,N) = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z$$ freie Energie, kanonisches Ensemble

Stirling-Formel $$N! \approx 2\pi\sqrt{N}\left(\frac{N}{e}\right)^N \sim \left(\frac{N}{e}\right)^N$$

$$F = -k_{\mathrm{B}} T N \ln\left[Z_1 N^{-1} e\right] = -k_{\mathrm{B}} T N \ln\left[\frac{V}{N}\,\frac{e}{\lambda_{\mathrm{T}}^3}\right]$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}\bigg|_{V,N} \qquad P = -\frac{\partial F}{\partial V}\bigg|_{T,N} \qquad \mu = \frac{\partial F}{\partial N}\bigg|_{T,V}$$

Maxwell-Boltzmann-Gas

$$F = -k_\mathrm{B} T N \ln\left[\frac{V}{N}\,\frac{e}{\lambda_\mathrm{T}^3}\right]$$ freie Energie, kanonisches Ensemble

$$\lambda_\mathrm{T} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_\mathrm{B} T}}$$ thermische de Broglie-Wellenlänge

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}\Big|_{V,N} = -\frac{F}{T} + \frac{3}{2}\,k_\mathrm{B} N \;\Rightarrow\; U = \frac{3}{2}\,N k_\mathrm{B} T$$

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V}\Big|_{T,N} \;\Rightarrow\; PV = N k_\mathrm{B} T$$

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}\Big|_{T,V} \;\Rightarrow\; \mu = -k_\mathrm{B} T \ln\left[\frac{V}{N}\,\frac{1}{\lambda_\mathrm{T}^3}\right] = -k_\mathrm{B} T \ln\left[\frac{V}{N}\left(\frac{m k_\mathrm{B} T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right]$$

Maxwell-Boltzmann-Gas

$$F = -k_\mathrm{B} T N \ln\left[\frac{V}{N}\,\frac{e}{\lambda_\mathrm{T}^3}\right]$$ freie Energie, kanonisches Ensemble

$$\lambda_\mathrm{T} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_\mathrm{B} T}}$$ thermische de Broglie-Wellenlänge

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}\Big|_{V,N} = k_\mathrm{B} N \ln\left[\frac{V}{N}\,\frac{e}{\lambda_\mathrm{T}^3}\right] + \frac{3}{2}\,k_\mathrm{B} N$$

$$\frac{V}{N} \sim a^3$$ a - Abstand zwischen den Teilchen

für $a \ll \lambda_\mathrm{T}$ gilt $S < 0$ Versagen der klassischen Physik

Versagen der klassischen Physik

$$\lambda_{\mathrm{T}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_{\mathrm{B}} T}}$$ thermische de Broglie-Wellenlänge

$$S = k_{\mathrm{B}} N \ln\left[\frac{V}{N}\,\frac{e}{\lambda_{\mathrm{T}}^3}\right] + \frac{3}{2}\,k_{\mathrm{B}} N$$

$$\frac{V}{N} \sim a^3$$

a - Abstand zwischen den Teilchen

für $a \ll \lambda_{\mathrm{T}}$ gilt $S < 0$

z.B. : $T = 100\mathrm{K}$

1) H_2 Moleküle $\lambda_{\mathrm{T}} \approx 1\mathring{A} \ll a$ Maxwell-Boltzmann OK

2) Elektronen im Metal $\lambda_{\mathrm{T}} \approx 70\mathring{A} \gg a$ Maxwell-Boltzmann nicht OK

Maxwell-Boltzmann-Gas großkanonisch

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \qquad Z = \frac{1}{N!}\left(Z_1\right)^N \qquad Z_1 = \frac{V}{\lambda_{\mathrm{T}}^3} \qquad \lambda_{\mathrm{T}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T}}$$

$$Z_G(T,V,\mu) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} = \sum_N e^{\beta\mu N} \sum_j e^{-\beta E_j(N)} = \sum_N e^{\beta\mu N} Z(N)$$

$$Z_G(T,V,\mu) = \sum_N \frac{1}{N!}\left(e^{\beta\mu} Z_1\right)^N = \exp\left(e^{\beta\mu} Z_1\right)$$

Maxwell-Boltzmann-Gas
großkanonisch

$$Z_1 = \frac{V}{\lambda_{\mathrm{T}}^3} \qquad \lambda_{\mathrm{T}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_{\mathrm{B}} T}} \qquad Z_G(T,V,\mu) = \exp\left(e^{\beta\mu} Z_1\right)$$

$$\Omega(T,V,\mu) = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z_G = -k_{\mathrm{B}} T e^{\beta\mu} Z_1$$

$$N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\Big|_{T,V} \Rightarrow N = e^{\beta\mu} Z_1 \Rightarrow \Omega = -k_{\mathrm{B}} T N$$

$$S = -\frac{\partial\Omega}{\partial T}\Big|_{V,\mu} \Rightarrow S = -\frac{\Omega}{T} - \frac{\mu N}{T} - \frac{3}{2}\frac{\Omega}{T} \Rightarrow U = -\frac{3}{2}\Omega = \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} T N$$

$$P = -\frac{\partial\Omega}{\partial V}\Big|_{T,\mu} \Rightarrow P = -\frac{\Omega}{V} \Rightarrow PV = k_{\mathrm{B}} T N$$

Quantenzustände

z.B. $x_j \to (\vec{r}_j, \sigma_j)$

$\lambda_j \to \vec{p}_j$

Produkt-Zustand von N Teilchen

$$\Psi = \phi_{\lambda_1}(x_1)\phi_{\lambda_2}(x_2)\ldots\phi_{\lambda_N}(x_N)$$

Hamilton-Operator von nicht wechselwirkenden Teilchen

$$\hat{H}(x_1,\ldots,x_N) = \sum_j \hat{h}(x_j)$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Ein-Teilchen-Hamilton-Operator

$$\hat{h}(x_j)\phi_{\lambda_j}(x_j) = \epsilon_{\lambda_j}\phi_{\lambda_j}(x_j)$$

$$E = \sum_j \epsilon_j$$

Noch mal M.-B.-Gas

kanonisch

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\lambda_1,\ldots,\lambda_N} e^{-\beta \sum_j \epsilon_{\lambda_j}} = \frac{1}{N!} \left(\sum_\lambda e^{-\beta \epsilon_\lambda} \right)^N = \frac{1}{N!} Z_1^N$$

großkanonisch

$$Z_G = \sum_N \frac{1}{N!} e^{\beta \mu N} Z_1^N = \exp\left(e^{\beta\mu} Z_1\right)$$

Noch mal M.-B.-Gas

$$Z_G = \sum_N \frac{1}{N!} e^{\beta\mu N} Z_1^N = \exp\left(e^{\beta\mu} Z_1\right)$$

$$Z_1 = \sum_\lambda e^{-\beta\epsilon_\lambda}$$

anderseits mit $Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda} \frac{1}{n_\lambda!} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}$

$$Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda = \prod_\lambda \left(\sum_{n_\lambda} \frac{1}{n_\lambda!} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} \right) = \prod_\lambda \exp\left(e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right) = \exp\left(e^{\beta\mu} Z_1\right)$$

also

$$Z_G = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \sum_{n_\lambda} \frac{1}{n_1! n_2! \ldots n_\lambda!} e^{-\beta \sum_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}$$

$$N = \sum_\lambda n_\lambda$$

$$E = \sum_\lambda n_\lambda \epsilon_\lambda$$

n_λ - Zahl der Teilchen im Zustand λ

Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$N = \sum_\lambda n_\lambda \qquad\qquad E = \sum_\lambda n_\lambda \epsilon_\lambda$$

$$Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda} \frac{1}{n_\lambda!} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \exp\left[e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right]$$

Wahrscheinlichkeit, dass Zustand λ mit n_λ Teilchen besetzt ist

$$W_\lambda(n_\lambda) = \frac{1}{Z_\lambda} \frac{1}{n_\lambda!} e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)}$$

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

$$\langle n_\lambda \rangle = e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}$$

Warum versagt M.-B.

Produkt-Zustand von N Teilchen $\Psi = \phi_{\lambda_1}(x_1)\phi_{\lambda_2}(x_2)\ldots\phi_{\lambda_N}(x_N)$

Zustand λ besetzt 3 mal $n_\lambda = 3$

$$\Psi = \ldots\phi_\lambda(x_j)\phi_\lambda(x_{j+1})\phi_\lambda(x_{j+2})\ldots$$

Permutationen zwischen x_j, x_{j+1}, x_{j+2} nicht nötig

$$Z_G = \sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_\lambda}\frac{1}{n_1!n_2!\ldots n_\lambda!}e^{-\beta\sum_\lambda(\epsilon_\lambda-\mu)n_\lambda} \rightarrow \sum_{n_1}\sum_{n_1}\cdots\sum_{n_\lambda}e^{-\beta\sum_\lambda(\epsilon_\lambda-\mu)n_\lambda}$$

$$Z_G = \sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots\sum_{n_\lambda}e^{-\beta\sum_\lambda(\epsilon_\lambda-\mu)n_\lambda} = \prod_\lambda Z_\lambda$$

$$Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda}e^{-\beta(\epsilon_\lambda-\mu)n_\lambda}$$

Das ideale Bose-Gas

Produkt-Zustand von N Teilchen Symmetrisch

$$\Psi = \frac{1}{Norm.} \sum_{\{P\}} \phi_{\lambda_1}(x_{P_1})\phi_{\lambda_2}(x_{P_2}) \ldots \phi_{\lambda_N}(x_{P_N})$$

Der Zustand ist charakterisiert lediglich durch n_λ

$n_\lambda = 0, 1, 2, \ldots, \infty$ Bosonen

$$Z_G = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta \sum_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \prod_\lambda Z_\lambda$$

$$Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}$$

Das ideale Bose-Gas

Unabhängige Herleitung

Der Zustand ist charakterisiert lediglich durch n_λ

$$N = \sum_\lambda n_\lambda \qquad E = \sum_\lambda n_\lambda \epsilon_\lambda \qquad n_\lambda = 0, 1, 2, \ldots, \infty$$

Bosonen

$$Z_G(T, V, \mu) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} = \sum_{\{n_\lambda\}} e^{-\beta \sum_\lambda n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} \Rightarrow Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda$$

$$Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda = 0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}$$

Das ideale Bose-Gas

$$Z_G = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta \sum_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \prod_\lambda Z_\lambda$$

$$Z_\lambda = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}$$

Wahrscheinlichkeit, dass Zustand λ mit n_λ Teilchen besetzt ist

$$W_\lambda(n_\lambda) = \frac{1}{Z_\lambda} e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} \left(1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right)$$

$$\langle n_\lambda \rangle = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} W_\lambda(n_\lambda) n_\lambda = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} n_\lambda e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} - 1}$$

$$n_B(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}$$

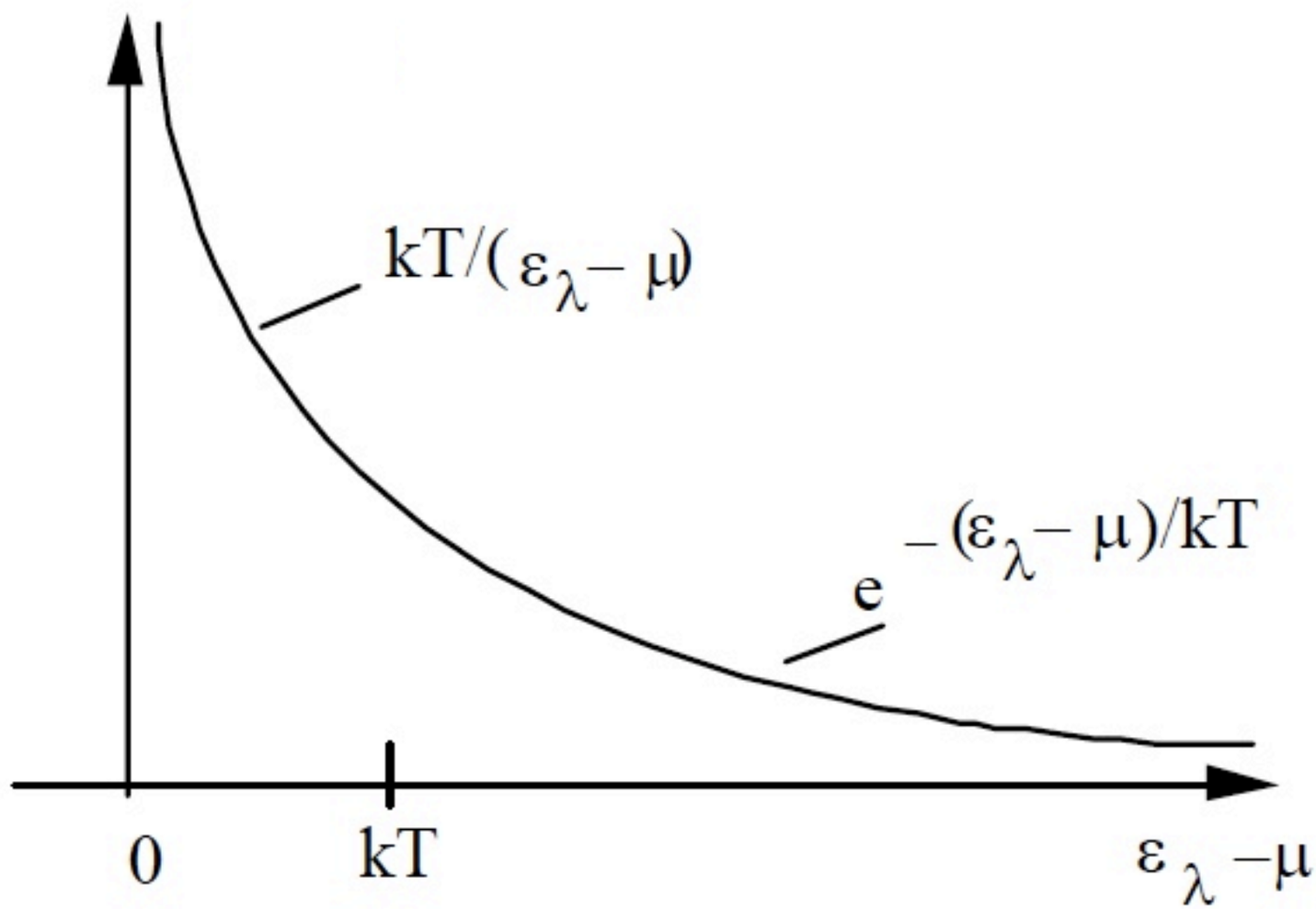
Bose-Funktion

Bose-Funktion

$$n_B(\epsilon_\lambda) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} - 1}$$

Bose-Funktion

$$\mu \leq 0$$



Das ideale Fermi-Gas

Produkt-Zustand von N Teilchen Antisymmetrisch

$$\Psi = \frac{1}{Norm.} \sum_{\{P\}} (-1)^P \phi_{\lambda_1}(x_{P_1}) \phi_{\lambda_2}(x_{P_2}) \ldots \phi_{\lambda_N}(x_{P_N})$$

Der Zustand ist charakterisiert lediglich durch n_λ

$n_\lambda = 0, 1$ Fermionen

$$Z_G = \sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_2=0}^{1} \cdots \sum_{n_\lambda=0}^{1} e^{-\beta \sum_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \prod_\lambda Z_\lambda$$

$$Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda=0}^{1} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = 1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}$$

Das ideale Fermi-Gas

Unabhängige Herleitung

Der Zustand ist charakterisiert lediglich durch n_λ

$$N = \sum_\lambda n_\lambda \qquad E = \sum_\lambda n_\lambda \epsilon_\lambda \qquad n_\lambda = 0, 1$$

Fermionen

$$Z_G(T, V, \mu) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} = \sum_{\{n_\lambda\}} e^{-\beta \sum_\lambda n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} \Rightarrow Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda$$

$$Z_\lambda \equiv \sum_{n_\lambda = 0}^{1} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}$$

Das ideale Fermi-Gas

$$Z_G = \sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_1=0}^{1} \cdots \sum_{n_\lambda=0}^{1} e^{-\beta \sum_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \prod_\lambda Z_\lambda$$

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

Wahrscheinlichkeit, dass Zustand λ mit n_λ Teilchen besetzt ist

$$W_\lambda(n_\lambda) = \frac{1}{Z_\lambda} e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \frac{e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}$$

$$\langle n_\lambda \rangle = \sum_{n_\lambda=0}^{1} W_\lambda(n_\lambda) n_\lambda = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{1} n_\lambda e^{-\beta n_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} + 1}$$

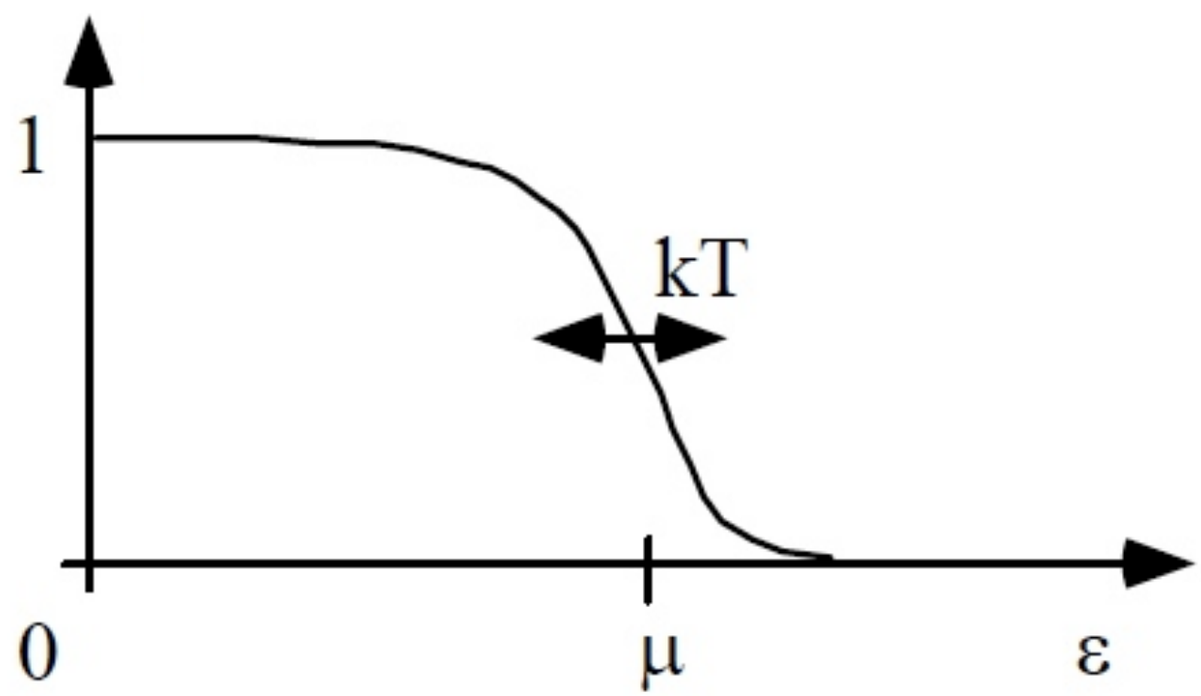
$$n_F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

Fermi-Funktion

Fermi-Funktion

$$n_F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$$

Fermi-Funktion



Zusammenfassung

$$Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda$$

M.-B. $\quad Z_\lambda = \exp\left[e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right]$

Bose $\quad Z_\lambda = \dfrac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}$

Fermi $\quad Z_\lambda = 1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}$

$$\langle n_\lambda \rangle = \left|\begin{array}{ll} n_{MB}(\epsilon_\lambda) = e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} & \text{M.-B.} \\ n_B(\epsilon_\lambda) = \dfrac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} - 1} & \text{Bose-Funktion} \\ n_F(\epsilon_\lambda) = \dfrac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} + 1} & \text{Fermi-Funktion} \end{array}\right.$$