

5. Plenum - Lösungen

06.05.2011

P5.1 Dichteoperator

a)

$$\langle E_{n'}, N_{n'} | \hat{A} | E_n, N_n \rangle = (E_n - \mu N_n) \langle E_{n'}, N_{n'} | E_n, N_n \rangle = (E_n - \mu N_n) \delta_{n,n'}$$

$$\rightarrow H - \mu N = \begin{pmatrix} E_1 - \mu N_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 - \mu N_2 & 0 & \\ 0 & 0 & E_3 - \mu N_3 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (\text{Diagonalmatrix})$$

b)

$$\begin{aligned} \langle E_{n'}, N_{n'} | e^{-\beta \hat{A}} | E_n, N_n \rangle &= \langle E_{n'}, N_{n'} | \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-\beta \hat{A})^i}{i!} | E_n, N_n \rangle \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-\beta (E_n - \mu N_n))^i}{i!} \langle E_{n'}, N_{n'} | E_n, N_n \rangle \\ &= e^{-\beta (E_n - \mu N_n)} \delta_{n,n'}. \end{aligned}$$

$$\rightarrow e^{-\beta (H - \mu N)} = \begin{pmatrix} e^{-\beta (E_1 - \mu N_1)} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & e^{-\beta (E_2 - \mu N_2)} & 0 & \\ 0 & 0 & e^{-\beta (E_3 - \mu N_3)} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

c) Dichteoperator:

$$\hat{\rho} = C e^{-\beta (\hat{H} - \mu \hat{N})}.$$

Normierung von Normierungskonstante C :

$$\begin{aligned} \text{tr}(\hat{\rho}) &= 1 \\ &= C \text{tr} e^{-\beta (\hat{H} - \mu \hat{N})} \\ &= C \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta (E_n - \mu N_n)}. \\ \rightarrow C &= \left[\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta (E_n - \mu N_n)} \right]^{-1} = \frac{1}{Z_{GK}}. \end{aligned}$$

P5.2 Quantengas

a) Der Fockzustand $|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ umfasst verschiedene Produkte von Einteilchenzuständen

$$|\phi_{a_1}\rangle_1 \otimes |\phi_{a_2}\rangle_2 \otimes \dots \otimes |\phi_{a_N}\rangle_N,$$

mit $H_i |\phi_{a_i}\rangle_i = \epsilon_{a_i} |\phi_{a_i}\rangle_i$ für das i -te Teilchen. Mit der Abkürzung $|\phi_{a_i}\rangle_i = |a_i\rangle_i$ entspricht beispielsweise für ein $M = 5$ Niveau-System der Fockzustand $\Psi = |2, 1, 0, 1, 0\rangle$ z.B. dem Einteilchen-Produktzustand $|1\rangle_1 \otimes |4\rangle_2 \otimes |2\rangle_3 \otimes |1\rangle_4$, d.h. Teilchen 1 und Teilchen 4 sind im Energiezustand ϵ_1 (also $n_1 = 2$), Teilchen 2 ist im Energiezustand ϵ_4 (also $n_4 = 1$), etc. Aber auch der Einteilchen-Produktzustand $|4\rangle_1 \otimes |2\rangle_2 \otimes |1\rangle_3 \otimes |1\rangle_4$ ist

Teil des gleichen Fockzustandes. Die Zahl der möglichen Einteilchen-Produktzustände für einen gegebenen Fockzustand erhält man durch

$$\frac{\left(\sum_{a=1}^M n_a\right)!}{\prod_{a=1}^M n_a!} = \frac{N!}{\prod_{a=1}^M n_a!},$$

da N Teilchen verteilt werden (Faktor $N!$ im Zähler), aber Einteilchen-Produktzustände, in denen mehrere Teilchen auf dem gleichen Energie-Niveau sitzen, nicht mehrfach gezählt werden sollen, daher Division durch $n_a!$ für alle a .

b) Im Fockraum gilt:

$$\begin{aligned}\hat{H} |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle &= (\epsilon_1 n_1 + \epsilon_2 n_2 + \dots + \epsilon_M n_M) |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \\ &= \sum_{i=1}^M \epsilon_i n_i |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{N} |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle &= (n_1 + n_2 + \dots + n_M) |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle \\ &= \sum_{i=1}^M n_i |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle = N |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle.\end{aligned}$$

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_M | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \delta_{n_M, n'_M}.$$

Großkanonische Zustandssumme für Bosonen im Fockraum:

$$\begin{aligned}Z_{GK} &= \text{tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right) \\ &= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_M} \langle n_1, n_2, \dots, n_M | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle \quad (\text{Spur über Diagonalmatrix}) \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_M=0}^{\infty} \langle n_1, n_2, \dots, n_M | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_M=0}^{\infty} e^{-\beta \sum_{i=1}^M (\epsilon_i n_i - \mu n_i)} \underbrace{\langle n_1, n_2, \dots, n_M | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle}_{=1} \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_M=0}^{\infty} \prod_{i=1}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i} \\ &= \prod_{i=1}^M \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n}.\end{aligned}$$

Der letzte Schritt wird einmal ausführlicher gebracht:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \\
&\stackrel{\text{KG}}{=} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \\
&= \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \left\{ \sum_{n_1=0}^{\infty} \left[e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \prod_{i=2}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \right\} \\
&\stackrel{\text{DG}}{=} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \left\{ \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \right] \left[\prod_{i=2}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \right\} \\
&\stackrel{\text{DG}}{=} \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \right] \left\{ \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \left[\prod_{i=2}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \right\} \\
&\stackrel{\text{Wh}}{=} \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \right] \left[\sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_2 - \mu)n_2} \right] \cdots \left[\sum_{n_M=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_M - \mu)n_M} \right] \\
&= \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n} \right] \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_2 - \mu)n} \right] \cdots \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_M - \mu)n} \right] \\
&= \prod_{i=1}^M \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n} \right]
\end{aligned}$$

mit KG = Kommutativgesetz ($a + b = b + a$; $\sum_{n_1=0}^{\infty}$ mit anderen Summen vertauschen), DG = Distributivgesetz ($ac + bc = (a + b)c$; gemeinsamen Faktor $\prod_{i=2}^M \cdots$ herausziehen; dann gemeinsamen Faktor $\sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots$ herausziehen), und Wh = Wiederholung (das gleiche für n_2, n_3 , etc. wiederholen). Mit

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad (\text{für } |x| < 1)$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \prod_{i=1}^M \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n} = \prod_{i=1}^M \sum_{n=0}^{\infty} \left[e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right]^n \\
&= \prod_{i=1}^M \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}}.
\end{aligned}$$

(Die Bedingung für die Gültigkeit lautet $|x| < 1$, also $|e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}| < 1$, oder $-\beta(\epsilon_i - \mu) < 0$, oder $\epsilon_i > \mu$).
Großkanonisches Potential:

$$J = -k_B T \ln Z_{GK} = -k_B T \sum_{i=1}^M \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}} = k_B T \sum_{i=1}^M \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right).$$

Mittlere Teilchenzahl ($1/(k_B T) =: \beta$):

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle &= -\frac{\partial J}{\partial \mu} = -k_B T \sum_{i=1}^M \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}} \left(-e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \beta \right) \\
&= \sum_{i=1}^M \frac{e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}} \Big| \times e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} = \sum_{i=1}^M \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1}
\end{aligned}$$

für $\epsilon_i > \mu$. (Für $\epsilon_i \rightarrow 0$ divergiert der Ausdruck.)

Großkanonische Zustandssumme für Fermionen (n_i nehmen nur Werte 0 oder 1 an):

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \text{tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right) \\
&= \sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \cdots \sum_{n_M=0}^1 \langle n_1, n_2, \dots, n_M | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle \\
&= \sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \cdots \sum_{n_M=0}^1 e^{-\beta \sum_{i=1}^M (\epsilon_i n_i - \mu n_i)} \underbrace{\langle n_1, n_2, \dots, n_M | n_1, n_2, \dots, n_M \rangle}_{=1} \\
&= \sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \cdots \sum_{n_M=0}^1 \left[\prod_{i=1}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i} \right] = \dots (\text{siehe oben}) \dots = \\
&= \prod_{i=1}^M \left[\sum_{n=0}^1 e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n} \right] \\
&= \prod_{i=1}^M \left[e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) 0} + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) 1} \right] \\
&= \prod_{i=1}^M \left[1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right].
\end{aligned}$$

$$J = -k_B T \ln Z_{GK} = -k_B T \sum_{i=1}^M \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right).$$

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^M \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1}.$$

Hier gibt es keine Einschränkungen an ϵ_i .

Großkanonische Zustandssumme für Teilchen, die der Maxwell-Boltzmann-Statistik folgen:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \text{tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right) \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{N!}}_{\text{Gibbsfaktor}} \underbrace{\left[\sum_{a_1=1}^M \sum_{a_2=1}^M \cdots \sum_{a_N=1}^M \langle \phi_{a_1} |_1 \otimes \langle \phi_{a_2} |_2 \otimes \cdots \otimes \langle \phi_{a_N} |_N e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi_{a_1} \rangle_1 \otimes | \phi_{a_2} \rangle_2 \otimes \cdots \otimes | \phi_{a_N} \rangle_N \right]}_{\text{unterscheidbare Teilchen}} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\sum_{a_1=1}^M \langle \phi_{a_1} |_1 e^{-\beta(\hat{H}_1 - \mu \hat{N}_1)} | \phi_{a_1} \rangle_1 \right] \cdots \left[\sum_{a_N=1}^M \langle \phi_{a_N} |_N e^{-\beta(\hat{H}_N - \mu \hat{N}_N)} | \phi_{a_N} \rangle_N \right] \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\sum_{a_1=1}^M e^{-\beta(\epsilon_{a_1} - \mu)} \right] \left[\sum_{a_2=1}^M e^{-\beta(\epsilon_{a_2} - \mu)} \right] \cdots \left[\sum_{a_N=1}^M e^{-\beta(\epsilon_{a_N} - \mu)} \right] \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left[\sum_{a=1}^M e^{-\beta(\epsilon_a - \mu)} \right]^N \\
&= \exp \left(\sum_{a=1}^M e^{-\beta(\epsilon_a - \mu)} \right) \\
&= \prod_{a=1}^M \exp \left(e^{-\beta(\epsilon_a - \mu)} \right).
\end{aligned}$$

$$J = -k_B T \ln Z_{GK} = -k_B T \sum_{i=1}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}.$$

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^M \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}.$$

Alternative Rechnung für die großkanonische Zustandssumme für Maxwell-Boltzmann-Statistik mit Hilfe der Zahl der entarteten Zustände aus Beispiel P5.2a:

$$\begin{aligned}
Z_{GK} &= \text{tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right) \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{N!}}_{\text{Gibbsfaktor}} \underbrace{\frac{N!}{\prod_{a=1}^M n_a!}}_{\text{Anzahl der entarteten Zustände}} \left[\prod_{i=1}^M e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_M=0}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^M \frac{1}{n_i!} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \right] \\
&= \prod_{i=1}^M \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right)^n \right] \\
&= \prod_{i=1}^M \exp \left(e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right).
\end{aligned}$$