5. Plenum - Lösungen **06.05.2011**

P5.1 Dichteoperator

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

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

b)

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

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

c) Dichteoperator:

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

Normierung von Normierungskonstante C:

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}\right) &= 1 \\ &= C \mathrm{tr} e^{-\beta\left(\hat{H} - \mu \hat{N}\right)} \\ &= C \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}. \end{aligned}$$

$$\to C = \left[\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}\right]^{-1} = \frac{1}{Z_{GK}}.$$

P5.2 Quantengas

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

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

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:

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

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

$$\langle n_1', n_2', \ldots, n_M' | n_1, n_2, \ldots, n_M\rangle = \delta_{n_1,n_1'}\delta_{n_2,n_2'}\ldots\delta_{n_M,n_M'}\,.$$

Großkanonische Zustandssumme für Bosonen im Fockraum:

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

Der letzte Schritt wird einmal ausführlicher gebracht:

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

mit DG = Distributivgesetz ($ac + bc = (a + b)c$; gemeinsamen Faktor $e^{-\beta(\epsilon_1-\mu)n_1}$ wiederholt herausziehen; dann gemeinsamen Faktor $\left[\sum_{n_2=0}^{\infty}\cdots\right]$ 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:

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

Mittlere Teilchenzahl ($1/(k_BT) =: \beta$):

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

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

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

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

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

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

Hier gibt es keine Einschränkungen an ϵ_i.

Großkanonische Zustandssumme für Teilchen, die der Maxwell-Boltzmann-Statistik folgen (die Spur wird hierbei über unterscheidbare Teilchen gebildet, und beinhaltet bereits den Gibbsfaktor):

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

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

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

Alternative Rechnung für die großkanonische Zustandssumme für Maxwell-Boltzmann-Statistik mit Hilfe der Zahl der entarteten Zustände aus Beispiel P5.2a. Hierfür wird ein „Entartungsgradoperator“ $\hat{F}$ definiert:

$$\hat{F}\,|n_1, n_2, \ldots, n_M\rangle = \frac{N!}{\prod_{a=1}^{M} n_a!}\,|n_1, n_2, \ldots, n_M\rangle\,,$$

mit dessen Hilfe sich die Spur über den symmetrisierten Fockraum darstellen lässt:

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