Ideale Quantengase kleiner Teilchenzahl

Heinz-Jürgen Schmidt; Jürgen Schnack
Universität Osnabrück

Seminar Theoretische Physik

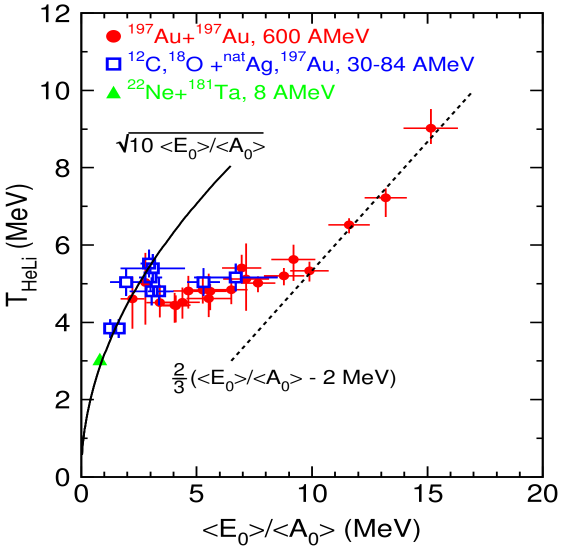
Montag, 04.05.98, 16.15 Uhr, 32/409

Gliederung:

1. Problemstellung und geschlossene Lösungen (J.S.)
   - Systeme kleiner Teilchenzahl
   - eindimensionaler quantenmechanischer Oszillator
   - Fermionen und Bosonen im eindimensionalen harmonischen Oszillator
   - einfache Näherungslösung für Fermionen
2. Rekursionsformeln für die Zustandssumme (H.-J.S.)
   - Rekursionsformeln
   - dreidimensionaler harmonischer Oszillator
   - Bose-Einstein-Kondensation

Problem

Atomkerne als Beispiel kleiner Fermisysteme:



- exp. Bestimmung der kalorischen Kurve von Kernen: J. Pochodzalla et al., Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 1040

- kleine Kerne sind durch das Oszillatorschalenmodell besser beschrieben als durch das Modell des freien Fermigases

Dünne Gase in Fallen als Beispiel kleiner Bosesysteme:

- exp. Realisierung: Alkaliatome in Fallen; z.B. Anderson et al., Science **269** (1995) 198

- Syteme annähernd wechselwirkungsfrei

- theoretische Gruppen: Grossmann/Holthaus, Marburg; Hilf/Borrmann, Oldenburg; Wilkens, Potsdam; Brosens et al., Antwerpen

Unterscheidbare Teilchen im eindimensionalen Oszillator

Hamiltonoperator:

$$\underset{\sim}{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\underset{\sim}{p}_i^{\,2}}{2m_i} + \frac{1}{2}\, m_i \omega^2 \underset{\sim}{x}_i^{\,2} \right) = \sum_{i=1}^{N} \underset{\sim}{h}_i$$

$$\underset{\sim}{h} \mid n \,\rangle = E_n \mid n \,\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}\,) \mid n \,\rangle$$

kanonisches Ensemble $(N = 1)$**:**

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \mathrm{Sp}\left(e^{-\beta \underset{\sim}{h}}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta E_n}\right) \;; \qquad \beta = \frac{1}{k_B\, T} \\ &= e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \end{aligned}$$

$$\underset{\sim}{R}(\beta) = \frac{e^{-\beta \underset{\sim}{h}}}{Z(\beta)}$$

$$\begin{aligned} E(\beta) &= \mathrm{Sp}\,(\underset{\sim}{h}\; \underset{\sim}{R}(\beta)) = -\frac{\partial}{\partial\, \beta}\; \ln(Z(\beta)) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \end{aligned}$$

Unterscheidbare Teilchen im dreidimensionalen Oszillator

Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{H} &= \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\underset{\sim}{\vec{p}}_i^{\,2}}{2m_i} + \frac{1}{2}\, m_i \omega^2 \underset{\sim}{\vec{x}}_i^{\,2} \right) = \sum_{i=1}^{N} \underset{\sim}{h}_i \\
\underset{\sim}{h} \,|\, n_x\, n_y\, n_z \,\rangle &= \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \,|\, n_x\, n_y\, n_z \,\rangle
\end{aligned}$$

kanonisches Ensemble $(N = 1)$**:**

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= \mathrm{Sp}\left(e^{-\beta \underset{\sim}{h}} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta E_n} \right) \\
&= \left(\frac{e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^3 \\
E(\beta) &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z(\beta)) \\
&= \frac{3\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)
\end{aligned}$$

N **Teilchen:**

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= \left(\frac{e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^{3N} \\
E(\beta) &= \frac{3N\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)
\end{aligned}$$

Fermionen im eindimensionalen Oszillator

Hamiltonoperator:

$$\underset{\sim}{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\underset{\sim}{p}_i^{\,2}}{2m_i} + \frac{1}{2}\, m_i \omega^2 \underset{\sim}{x}_i^{\,2} \right)$$

Projektor auf antisymmetrische Zustände:

$$\underset{\sim}{A} \mid n_1, n_2, \dots, n_N \,\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\pi} \mathrm{sign}(\pi) \mid n_{\pi(1)}, n_{\pi(2)}, \dots, n_{\pi(N)} \,\rangle$$

kanonisches Ensemble:

$$Z(\beta) = \mathrm{Sp}\left(e^{-\beta \underset{\sim}{H}} \right)$$

$$= \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_N=0}^{\infty} \langle\, n_1, n_2, \dots, n_N \mid \underset{\sim}{A}^{\dagger} e^{-\beta \underset{\sim}{H}} \underset{\sim}{A} \mid n_1, n_2, \dots, n_N \,\rangle$$

$$= \sum_{n_1 < n_2 < \cdots < n_N}^{\infty} \langle\, n_1, n_2, \dots, n_N \mid e^{-\beta \underset{\sim}{H}} \mid n_1, n_2, \dots, n_N \,\rangle$$

$$= \exp\left(-\beta E_0(N)\right) \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{1 - \exp(-n\,\beta \hbar \omega)}$$

Trick: $n_2 = n_1 + n_{12} + 1$ mit $n_{12} = 0, 1, 2, \dots$ usw.

Fermionen oder Bosonen im eindimensionalen Oszillator

kanonisches Ensemble:

$$
\begin{aligned}
Z(\beta) &= \exp\left(-\beta E_0(N)\right) \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{1-\exp(-n\;\beta\hbar\omega)} \\
E_0(N) &= N\frac{\hbar\omega}{2} \qquad \text{Bosonen} \\
E_0(N) &= N^2\frac{\hbar\omega}{2} \qquad \text{Fermionen}
\end{aligned}
$$

mittlere Energie:

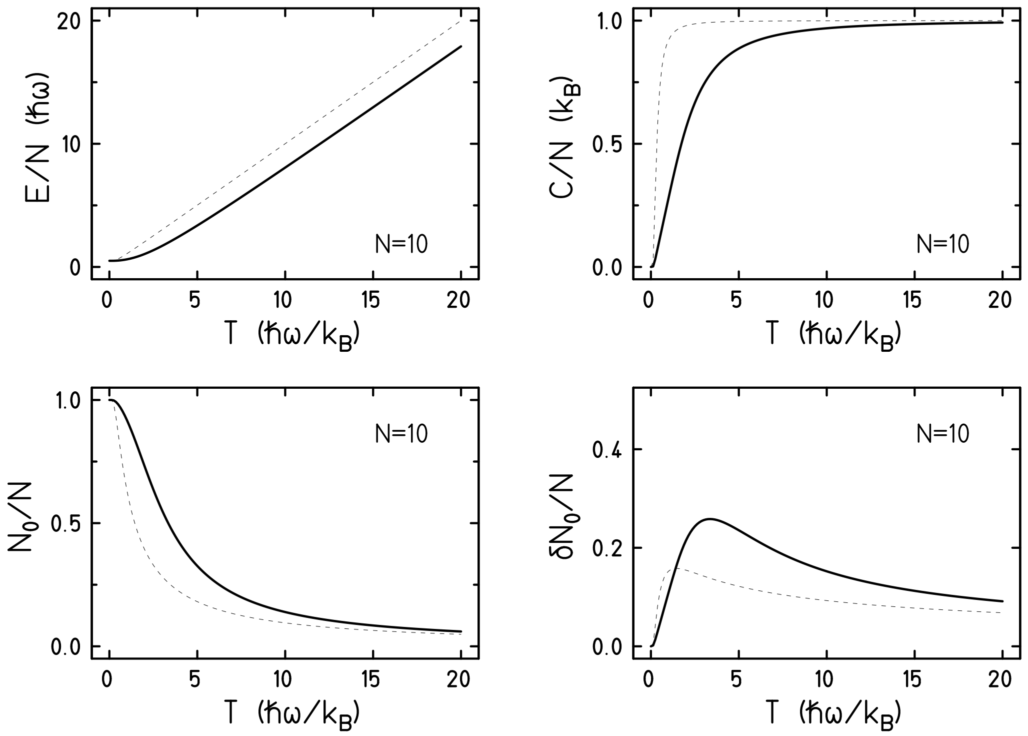
$$
E_N(T) = E_0(N) + \sum_{n=1}^{N} n\frac{\hbar\omega}{2}\;\left[\coth\left(n\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)-1\right]
$$

spezifische Wärmekapazität:

$$
c = \frac{1}{N}\left(\frac{\partial\, E(T)}{\partial\, T}\right)_{\omega} = \frac{1}{N\;k_B\;T^2}\sum_{n=1}^{N}\left(n\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\frac{1}{\sinh^2\left(n\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}
$$

Fermionen oder Bosonen im eindimensionalen Oszillator

Mittlere Energie, spezifische Wärmekapazität, Besetzungszahl des Grundzustandes (Bosonen) und Schwankung (Bosonen):



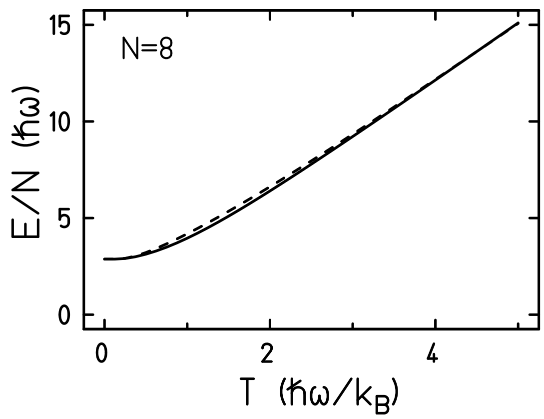
Näherung für Fermionen im dreidimensionalen Oszillator

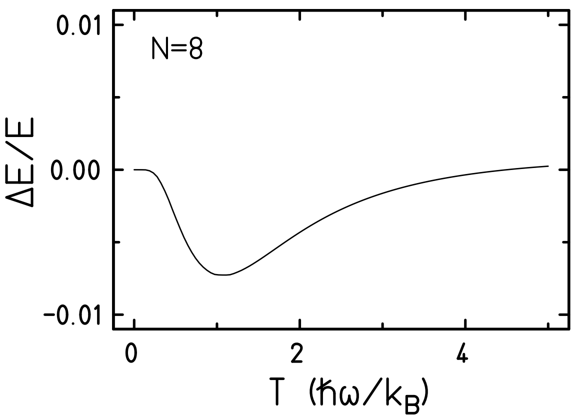
Zustandssumme und mittlere Energie:

Idee: Pauliprinzip nur in einer Dimension anwenden, Grundzustandsenergie richtig behandeln

$$\tilde{Z}_N(\beta) = \exp\left(-\beta E_0(N)\right) \left(\frac{1}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)}\right)^{2N} \times \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{1-\exp(-n\,\beta\hbar\omega)}$$

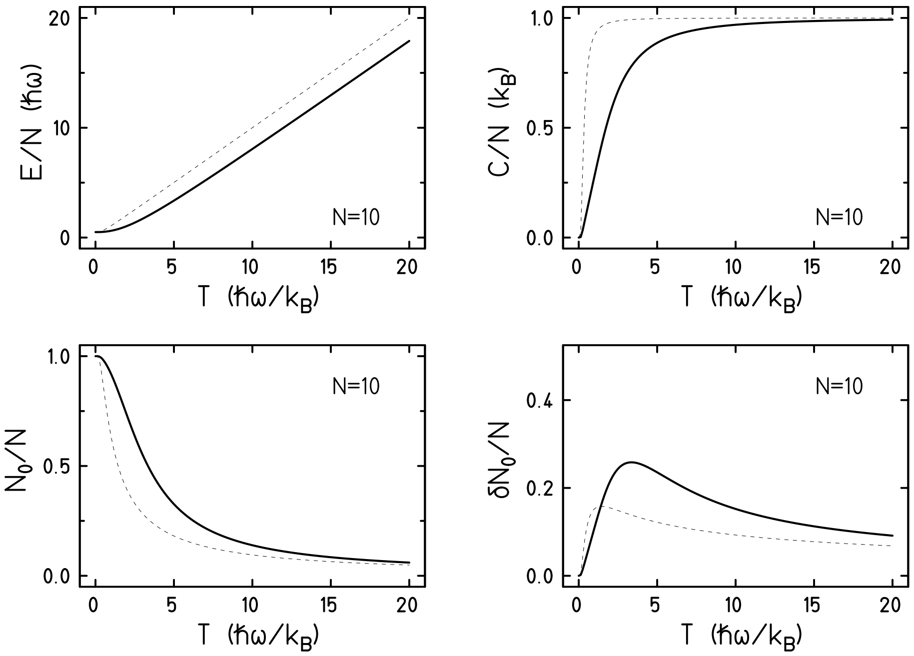
$$\tilde{E}_N(T) = E_0(N) + 2N\frac{\hbar\omega}{2}\left[\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)-1\right] + \sum_{n=1}^{N} n\frac{\hbar\omega}{2}\left[\coth\left(n\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)-1\right]$$





Bosonen im Oszillator

Eindimensional:



Dreidimensional: