Universität Bielefeld	Theoretische Physik III	Prof. Dr. Jürgen Schnack
Fakultät für Physik	WS 2007/2008	jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 11

11.1 Fermionen im harmonischen Oszillator

Wir betrachten N identische (z.B. spinpolarisierte) Fermionen in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential. Das System soll im kanonischen Ensemble beschrieben werden.

a. Zeigen Sie, daß folgende Gleichung gilt

$$Z_N^F(T,\omega) \;=\; \sum_{n_1<n_2<\cdots<n_N} e^{-\beta\hbar\omega(n_1+n_2+\cdots+n_N+\frac{N}{2})} = e^{-\beta\hbar\omega\frac{N^2}{2}} \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{1-e^{-n\beta\hbar\omega}} \; . \quad (1)$$

b. Zeigen Sie, daß die Grundzustandsenergie $E_0(N) = \hbar\omega\frac{N^2}{2}$ ist. Begründen Sie dies evtl. mit einer Skizze.

c. Leiten Sie die innere Energie $U_N^F(T,\omega)$ her und vergleichen Sie mit der Vorlesung.

d. Leiten Sie die Wärmekapazität $C_N^F(T,\omega)$ her und vergleichen Sie mit der Vorlesung.

e. Stellen Sie die Wärmekapazität $C_N^F(T,\omega)$ für $N = 10$ als Funktion von $\beta\hbar\omega$ dar und stellen Sie zum Vergleich die Wärmekapazität $C_N(T,\omega)$ für 10 unterscheidbare Teilchen dar.

11.2 Hamiltonoperator und Teilchenzahloperator in zweiter Quantisierung

In zweiter Quantisierung kann der Hamiltonoperator für ideale Quantengase wie folgt dargestellt werden

$$\underset{\sim}{H} \;=\; \sum_k \varepsilon_k \, \underset{\sim}{a}_k^\dagger \underset{\sim}{a}_k \; . \quad (2)$$

ε_k sind die zum Einteilcheneigenzustand $\mid k \,\rangle$ gehörigen Einteilchenenergieeigenwerte. Der Teilchenzahloperator lautet dann

$$\underset{\sim}{N} \;=\; \sum_k \underset{\sim}{a}_k^\dagger \underset{\sim}{a}_k \; . \quad (3)$$

Die Operatoren $\underset{\sim}{a}_k^\dagger$ und $\underset{\sim}{a}_k$ seien die Erzeuger und Vernichter eines Fermions im Einteilchenzustand $\mid k \,\rangle$. Die Ausdrücke gelten für Bosonen entsprechend, die zugehörigen Operatoren können z. B. mit $\underset{\sim}{b}_k^\dagger$ und $\underset{\sim}{b}_k$ bezeichnet werden.

Zeigen Sie, daß $\underset{\sim}{H}$ und $\underset{\sim}{N}$ vertauschen. Nutzen Sie dazu die Kommutatorrelationen für $\underset{\sim}{a}_k^\dagger$ und $\underset{\sim}{a}_k$ bzw. $\underset{\sim}{b}_k^\dagger$ und $\underset{\sim}{b}_k$ aus der Vorlesung.

11.3 Zusatzaufgabe: Bosonen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator

Wenn die Dimension des Teilchencontainers kleiner gleich Zwei ist, tritt keine Bose-Einstein-Kondensation auf. Im folgenden wollen wir kanonische Ensemble von N Bosonen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator betrachten. Wie aus der Theorie von Yang und Lee bekannt, kann man die mit dem Phasenübergang verbundene Nichtanalytizität der Wärmekapazität nur für $N \to \infty$ beobachten. Nichtsdestotrotz zeigt die Wärmekapazität schon für verhältnismäßig kleine N ein ausgeprägtes Maximum, das sich für $N \to \infty$ zur Nichtanalytizität entwickeln wird.

a. Geben Sie den Hamiltonoperator für ein Teilchen im isotropen dreidimensionalen harmonischen Oszillator an. Isotrop bedeutet hier, daß die Frequenz in alle drei Raumrichtungen gleich ist. Wie lauten die Energieeigenwerte und wie lautet die Zustandssumme?

b. Betrachten Sie jetzt N unterscheidbare Teilchen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator. Wie lauten Zustandssumme, innere Energie und Wärmekapazität?

c. Die Zustandssumme für N Bosonen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator kann nicht mehr in kurzer geschlossener Form angegeben werden. Man kann aber eine Rekursionsrelation für die Zustandssumme herleiten, mit der man die Zustandssummen sukzessive von $N = 1$ bis zum gewünschten N erzeugen kann. Die Rekursionsrelation lautet

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} Z_1(n\beta)\, Z_{N-n}(\beta) \ , \quad Z_0(\beta) = 1 \ , \ \beta = \frac{1}{k_B T} \ . \tag{4}$$

Berechnen Sie mit Hilfe dieser Formel die Zustandssumme, die innere Energie und die Wärmekapazität für $N = 6$. Nutzen Sie dazu ein Computeralgebraprogramm (Mathematica, Maple). Stellen Sie die Wärmekapazität zusammen mit der für 6 unterscheidbare Teilchen graphisch dar. Sie sollten in der bosonischen Kurve das Maximum sehen, das auf den Phasenübergang hindeutet.

Falls Ihr Computer das hergibt, lohnt es sich, die Entwicklung bis z. B. $N = 10$ voranzutreiben.

d. **Zusatzaufgabe:** Versuchen Sie, die Yang-Lee-Nullstellen der Zustandssumme Z_N in der komplexen Temperaturebene zu finden.