Aufgabenblatt 12

12.1 Hamiltonoperator und Teilchenzahloperator in zweiter Quantisierung

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

$$\underset{\sim}{H} = \sum_k \varepsilon_k \, \underset{\sim}{a}_k^\dagger \underset{\sim}{a}_k \ . \tag{1}$$

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

$$\underset{\sim}{N} = \sum_k \underset{\sim}{a}_k^\dagger \underset{\sim}{a}_k \ . \tag{2}$$

Die Operatoren $\underset{\sim}{a}_k^\dagger$ und $\underset{\sim}{a}_k$ seien die Erzeuger und Vernichter eines Fermions im Einteilchenzustand $|\,k\,\rangle$. 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.

12.2 Zusatzaufgabe: Bosonen im dreidimensionalen harmonischen Oszillator

Wenn die Dimension des Teilchencontainers kleiner 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

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \; Z_1(n\beta) \; Z_{N-n}(\beta) \; , \quad Z_0(\beta) = 1 \; , \; \beta = \frac{1}{k_B T} \; . \tag{3}$$

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.

Wählen Sie vernünftige Einheiten: „Verheiraten“ Sie $\hbar$, ω und k_B zu einer Konstanten, die Sie als Einheit der Temperatur verwenden.

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. Mathematica bietet dazu z.B. die Funktion `NSolve`.

e. Die Rekursionsformel gilt für alle Dimensionen. Sie müssen nur $Z_1(\beta)$ entsprechend anpassen. Wenn Sie jetzt die Rechnung für ein, zwei oder drei Dimensionen durchführen, werden Sie an der Wärmekapazität erkennen, dass es erst ab zwei Dimensionen einen Phasenübergang gibt.