Thermodynamische Fermion-Boson-Symmetrie im Potential des harmonischen Oszillators

Heinz-Jürgen Schmidt; **Jürgen Schnack**
Universität Osnabrück

Gliederung:

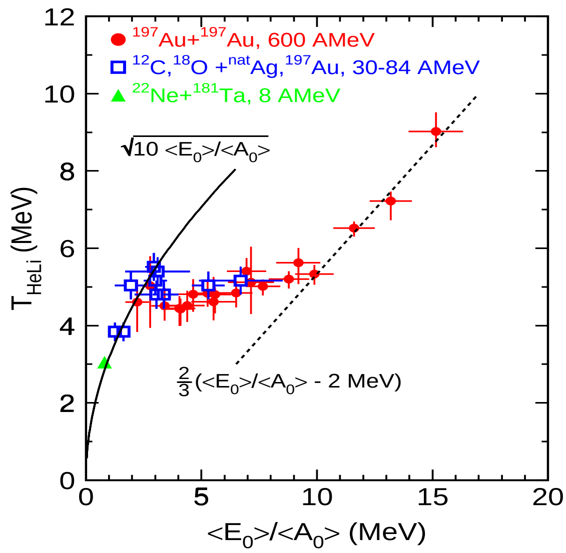
1. Einführung in die Vielteilchenquantenstatistik
   - Fermionen, Bosonen und unterscheidbare Teilchen
   - statistische Größen
   - harmonischer Oszillator für unterscheidbare Teilchen
   - eindimensionaler harmonischer Oszillator für Fermionen und Bosonen
   - Luttinger-Flüssigkeiten
2. dreidimensionaler harmonischer Oszillator für Fermionen und Bosonen
   - Rekursionsformel für die Zustandssumme
   - Struktur der Zustandssumme
   - Fermion-Boson-Symmetrie

http://obelix.physik.uni-osnabrueck.de/~schnack/

Problemstellung

Untersuchung kleiner Fermi- und Bosesysteme, die sich approximativ als nichtwechselwirkende Quantengase im äußeren Feld des harmonischen Oszillators beschreiben lassen

- dünne Gase in magnetischen Fallen
  - Alkaliatome als Beispiel kleiner Bosesysteme; Bose-Einstein Kondensation
  - atomare Gase, z.B. aus ^{6}Li, als Beispiel kleiner Fermisysteme; BCS-Übergang (Cooper-Paarbildung)
- Atomkerne in der Nähe des Grundzustandes (Schalenmodell der Atomkerne)



Vielteilchenquantenmechanik

N-Teilchenzustände sind Zustände im N-Teilchen-Hilbertraum. Die einfachsten N-Teilchenzustände sind Produktzustände mit der entsprechenden Symmetrie.

1. Produktzustände aus N Einteilchenzuständen für unterscheidbare Teilchen:

$$| \Psi \rangle = | \psi_1 \rangle \otimes | \psi_2 \rangle \otimes \cdots \otimes | \psi_N \rangle$$

2. Antisymmetrische Produktzustände (Slaterdeterminanten) von N Einteilchenzuständen für identische Fermionen:

$$\begin{aligned} | \Psi \rangle &= \underset{\sim}{A} \left(| \psi_1 \rangle \otimes | \psi_2 \rangle \otimes \cdots \otimes | \psi_N \rangle \right) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi} \mathrm{sgn}(\pi) \, | \psi_{\pi(1)} \rangle \otimes \cdots \otimes | \psi_{\pi(N)} \rangle \\ | \Psi; (i,j) \rangle &= - | \Psi; (j,i) \rangle \quad \text{Pauliprinzip} \end{aligned}$$

3. Symmetrische Produktzustände von N Einteilchenzuständen für identische Bosonen:

$$\begin{aligned} | \Psi \rangle &= \underset{\sim}{S} \left(| \psi_1 \rangle \otimes | \psi_2 \rangle \otimes \cdots \otimes | \psi_N \rangle \right) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\pi} | \psi_{\pi(1)} \rangle \otimes \cdots \otimes | \psi_{\pi(N)} \rangle \\ | \Psi; (i,j) \rangle &= | \Psi; (j,i) \rangle \end{aligned}$$

Nichtwechselwirkende Teilchen lassen sich durch Produktzustände darstellen.

Statistische Größen im kanonischen Ensemble

Zustandssumme

$$Z(\beta) \quad = \quad \mathrm{Sp}\left(e^{-\beta \underset{\sim}{H}}\right) \;, \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Mittlere (innere) Energie

$$E(T) \quad = \quad \frac{1}{Z(\beta)} \mathrm{Sp}\left(\underset{\sim}{H}\, e^{-\beta \underset{\sim}{H}}\right) = -\frac{\partial}{\partial \beta}\, \ln(Z(\beta))$$

Spezifische Wärmekapazität

$$c(T) \quad = \quad \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial T}\, E(T)$$

Unterscheidbare Teilchen im dreidimensionalen Oszillator

Hamiltonoperator:

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

$$\underset{\sim}{h} \,|\, n_x\, n_y\, n_z \,\rangle = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \,|\, n_x\, n_y\, n_z \,\rangle$$

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

$$Z(\beta) = \mathrm{Sp}\left(e^{-\beta\, \underset{\sim}{h}} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta E_n} \right)$$

$$= \left(\frac{e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^3$$

$$E(T) = \frac{3\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)$$

N **Teilchen:**

$$Z(\beta) = \left(\frac{e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^{3N}$$

$$E(T) = \frac{3N\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right)$$

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:

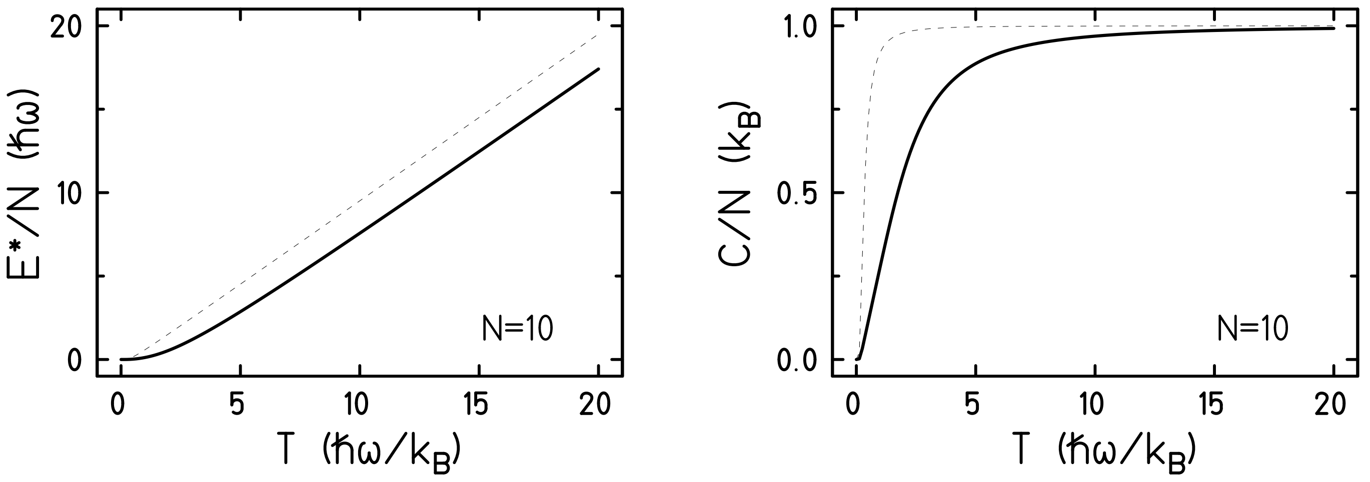
$$
E_N(T) = E_0(N) + \sum_{n=1}^{N} n\frac{\hbar\omega}{2}\left[\coth\left(n\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) - 1\right]
$$

spezifische Wärmekapazität:

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

Luttinger-Flüssigkeit

Mittlere Energie und spezifische Wärmekapazität



Im eindimensionalen harmonischen Oszillator sind Fermionen und Bosonen anhand ihrer spezifischen Wärmekapazität nicht unterscheidbar.

Das ist die Grundlage sogenannter Luttinger-Flüssigkeiten:

- Beschreibung eines **eindimensionalen** wechselwirkenden Fermionensystems, z.B. Quantendraht, durch einen effektiven Einteilchenhamiltonoperator
- Anregungsspektrum (über dem Grundzustand) kann oft äquidistant genähert werden
- $\Rightarrow$ wechselwirkende Fermionen verhalten sich wie wechselwirkungsfreie Bosonen

Rekursionsformel für die Zustandssumme

Beispiel für zwei Fermionen:

$$\begin{aligned}
Z_2^-(\beta) &= \sum_{i<j} \exp\left(-\beta(E_i + E_j)\right) \\
&= \frac{1}{2}\left\{\sum_{i,j} \exp\left(-\beta(E_i + E_j)\right) - \sum_{i=j} \exp\left(-\beta(E_i + E_j)\right)\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{Z_1(\beta)\, Z_1(\beta) - Z_1(2\,\beta)\right\}
\end{aligned}$$

N **Fermionen bzw. Bosonen:**

$$Z_N^{\pm}(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\pm 1)^{n+1}\, Z_1(n\beta)\, Z_{N-n}^{\pm}(\beta)\ , \quad Z_0(\beta) = 1$$

Struktur der Zustandssumme im harmonischen Oszillator

Einteilchenzustandssumme:

$$Z_1(\beta) = \left[\frac{\exp\left(-\beta\frac{\hbar\omega}{2}\right)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)}\right]^3$$

$$\text{mit} \quad y = \exp(-\beta\hbar\omega)$$

$$Z_1(y) = \frac{y^{\frac{3}{2}}}{(1-y)^3}$$

Zerlegung der N-Teilchen-Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z_N^{\pm}(y) &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\pm 1)^{n+1}\, Z_1(y^n)\, Z_{N-n}^{\pm}(y) \\ &= \frac{y^{\frac{3N}{2}}}{\prod_{j=1}^{N}(1-y^j)^3}\, P_N^{\pm}(y) \end{aligned}$$

Symmetrie der Polynome

Beispiel Polynome P_3:

$$
\begin{aligned}
P_3^+(y) &= 1 + 3y^2 + 7y^3 + 6y^4 + 6y^5 + 10y^6 + 3y^7 \\
P_3^-(y) &= y^2 \left(3 + 10y + 6y^2 + 6y^3 + 7y^4 + 3y^5 + 1y^7\right)
\end{aligned}
$$

Symmetrie:

$$
\begin{aligned}
P_N^-(y) &= y^{\frac{3}{2}N(N-1)}\, P_N^+\left(\frac{1}{y}\right) \\
Z_N^+(y) &= (-1)^N Z_N^-\left(\frac{1}{y}\right)
\end{aligned}
$$

Fermion-Boson-Symmetrie im harmonischen Oszillator

Symmetrie:

$$
\begin{aligned}
Z_N^+(\beta) &= (-1)^N Z_N^-(-\beta) \\
E_N^+(\beta) &= -E_N^-(-\beta) \\
C_N^+(\beta) &= C_N^-(-\beta)
\end{aligned}
$$

Funktionen mit negativem Argument sind als analytische Fortsetzung in das Gebiet mit $y = \exp(-\beta\hbar\omega) > 1$ zu verstehen.

Grundlage der Symmetrie:

$$
Z_1(\beta) = -Z_1(-\beta)
$$

Einzige bekannte Beispiele sind die harmonischen Oszillatoren ungerader Raumdimension.