Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Theoretische Physik III WS 2023/2024	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 11 – Selbststudium + Zusatzpunkte

11.1 Zwei identische Teilchen im Kastenpotential

Zwei identische Teilchen befinden sich in einem eindimensionalen Kastenpotential mit unendlich hohen Potentialwänden

$$V(x) \quad = \quad \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad . \tag{1}$$

a. Wie lauten die Energieeigenwerte und die Eigenfunktionen (Ortsdarstellung) für ein Teilchen im Kastenpotential?

b. Formulieren Sie den Hamiltonoperator des Zweiteilchensystems. Warum separieren die Eigenfunktionen in einen Orts- und einen Spinanteil?

c. Bei den beiden Teilchen handele es sich um Fermionen mit Spin $s = 1/2$. Welche Symmetrie muss der Ortsanteil der Eigenfunktion haben, wenn der Spinanteil durch $S = 1$ beschrieben wird und welche Symmetrie muss der Ortsanteil der Eigenfunktion haben, wenn der Spinanteil durch $S = 0$ beschrieben wird? Berechnen Sie für beide Fälle die möglichen Energieeigenwerte und Eigenfunktionen.

d. Bei den beiden Teilchen handele es sich nun um Bosonen mit Spin $s = 1$. Welche Symmetrie muss der Ortsanteil der Eigenfunktion haben, wenn der Spinanteil durch $S = 2, M = 2$ beschrieben wird? Berechnen Sie für diesen Fall die möglichen Energieeigenwerte und Eigenfunktionen.

11.2 Fermionen im harmonischen Oszillator

Wir betrachten N identische und ununterscheidbare Fermionen[1] in einem eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential. Das System soll im kanonischen Ensemble beschrieben werden.

a. Zeigen Sie, dass folgende Gleichung gilt

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

[1] Da Fermionen einen Spin besitzen, haben sie auch mehrere mögliche m_s-Zustände, die man berücksichtigen müsste. Damit man den Spin im weiteren nicht mehr zu berücksichtigen braucht, nehmen wir in diesem Beispiel an, dass alle dieselbe m_s-Quantenzahl besitzen. Man kann das zum Beispiel durch hohe Magnetfelder erreichen, dann sind die Fermionen spinpolarisiert. Ein solcher Fall wird in der Literatur witzigerweise auch „spinlose Fermionen“ genannt.

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 $1/(\beta\hbar\omega)$ dar und stellen Sie zum Vergleich auch die Wärmekapazität $C_N(T, \omega)$ für 10 unterscheidbare Teilchen dar.

11.3 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, sympy) oder ziehen Sie das numerisch durch. 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. 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.