

Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik521.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik521/ gefunden werden.

Sofern im Dokument nichts anderes angegeben ist: Dieses Werk von Martin Ueding ist lizenziert unter einer [Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz](#).

[disclaimer]

physik521 – Übung 10

Martin Ueding
mu@martin-ueding.de

Paul Manz

Lino Lemmer
l2@uni-bonn.de

2014-07-07

1 Pauli-Spin-Paramagnetismus eines Elektronengases

Die Zustandsdichte soll aus der Vorlesung bekannt sein. Wir benutzen die „Zustandsdichte idealer Quantengase“ (nolting-theo6):

$$\rho(E) = \begin{cases} (2S + 1) \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} & E \geq 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

1.1 Energie-Eigenwerte und großkanonische Zustandssumme

Die Energie-Eigenwerte eines Elektrons mit Impuls p und Spin-Quantenzahl σ in einem Magnetfeld $B = B\hat{e}_z$ sind

$$E_{p,\sigma} = E_\alpha = E_p + E_\sigma = \frac{p^2}{2m} + g\mu_B\sigma B.$$

Hat man eine Zahl N von Elektronen gegeben, berechnet sich die großkanonische Zustandssumme zu

$$Z_G = \sum_{\substack{n_{\alpha_i}=0,1 \\ i=1,2,\dots}} \exp\left(-\beta\left(E\left(\{n_{\alpha_i}\}\right) - \mu N\right)\right),$$

mit der Gesamtenergie $E\left(\{n_{\alpha_i}\}\right) = \sum_i n_{\alpha_i} E_{\alpha_i}$. Dabei gilt für die Anzahl $N = \sum_i n_{\alpha_i}$. Damit erhält man

$$\begin{aligned} &= \prod_i \sum_{n_{\alpha_i}=0,1} \exp\left(-\beta n_{\alpha_i} (E_{\alpha_i} - \mu)\right) \\ &= \prod_i \left(1 + \exp\left(-\beta (E_{\alpha_i} - \mu)\right)\right) \end{aligned}$$

1.2 Tieftemperaturentwicklung des großkanonischen Potentials

Das großkanonische Potential erhält man aus der großkanonischen Zustandssumme:

$$\begin{aligned}\Omega &= -k_B T \ln Z_G \\ &= -k_B T \sum_i \ln \left(1 + \exp \left(-\beta (E_{\alpha_i} - \mu) \right) \right)\end{aligned}$$

Dies kann mit Formel 5.61 aus dem Skript in ein Integral über die Energien und eine Summe über die Spins umgewandelt werden.

$$= -k_B T \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\sigma}(E) \ln \left(1 + \exp \left(-\beta (E - \mu) \right) \right)$$

Nach einer partiellen Integration erhält man mit $\int_{-\infty}^E d\epsilon D_{\sigma}(\epsilon) = a_{\sigma}(E)$:

$$\begin{aligned}&= k_B T \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE a_{\sigma}(E) \frac{-\beta \exp \left(-\beta (E - \mu) \right)}{1 + \exp \left(-\beta (E - \mu) \right)} \\ &= - \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE a_{\sigma}(E) f(E)\end{aligned}$$

Nach einer weiteren partiellen Integration erhält man mit $\int_{-\infty}^E d\epsilon a_{\sigma}(\epsilon) = b_{\sigma}(E)$:

$$= \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE b_{\sigma}(E) f'(E)$$

Eine Tieftemperaturnäherung nach Sommerfeld (Taylor-Entwicklung von b um $E = \mu$) liefert uns

$$\approx \sum_{\sigma} \left[b(\mu) + \frac{\pi^2}{6} D_{\sigma}(\mu) (k_B T)^2 \right].$$

1.3 Teilchenzahlen

Die Gesamtteilchenzahl ist gegeben durch

$$N = \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} dE D_{\sigma}(E) f(E).$$

Betrachtet man die verschiedenen Spins einzeln erhält man

$$N_{\uparrow} = \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\uparrow}(E) f(E).$$

Mit **molting-theo6** ist dies

$$= \frac{1}{2} \int_{\mu_B B}^{\infty} dE D(E - \mu_B B) f(E).$$

Mit $y = E - \mu_B$ und $dy = dE$ ergibt sich

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(y) f(y + \mu_B).$$

Da $\mu_B B \ll 1$ Taylorn wir f um y und erhalten

$$\begin{aligned} &\approx \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(y) (f(y) + \mu_B f'(y)) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(y) f(y) + \frac{\mu_B B}{2} \int_0^{\infty} dE D(y) f'(y). \end{aligned}$$

Analog dazu die Rechnung für den anderen Spin, es folgt

$$N_{\downarrow} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE D(y) f(y) - \frac{\mu_B B}{2} \int_0^{\infty} dE D(y) f'(y).$$

Dies ist auch das, was in der Abbildung zu sehen ist. Ein Spin hat mehr Teilchen. Da aber das chemische Potenzial μ für beide gleich sein soll, laufen einige zum anderen Spin über.

1.4 Tieftemperaturverhalten der Magnetisierung

Die Magnetisierung des Systems ist

$$\begin{aligned} M &= \frac{\mu_B}{V} (N_{\downarrow} - N_{\uparrow}) \\ &= -\frac{\mu_B^2 B}{V} \int_0^{\infty} dD(y) f'(y). \end{aligned}$$

Eine Entwicklung nach Sommerfeld bringt für tiefe Temperaturen

$$\approx \left(D(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D''(\mu) \right).$$

1.5 Magnetische Suszeptibilität

Die Suszeptibilität ergibt sich aus

$$\begin{aligned} \chi &= \mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_{T, \mu} \\ &= \frac{\mu_0 \mu_B^2}{V} \left(D(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D''(\mu) \right). \end{aligned}$$

Mit **nolting-theo6** erhält man für die Zustandsdichte und ihre zweite Ableitung

$$D(\mu) = \frac{3N}{2E_F^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\mu},$$

$$D''(\mu) = -\frac{3N}{8E_F^{\frac{3}{2}}} \mu^{-\frac{3}{2}}.$$

Mit $\mu \approx E_F$ erhält man so für die magnetische Suszeptibilität:

$$\chi = \frac{3N\mu_0\mu_B^2}{2\mu^{\frac{3}{2}}V} \left(\sqrt{\mu} - \frac{1}{4} \frac{1}{\mu^{\frac{3}{2}}} (k_B T)^2 \right)$$

$$= \frac{3N\mu_0\mu_B^2}{2V\mu} \left(1 - \frac{1}{4} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right).$$

Für kleine Temperaturen $k_B T \ll \mu$ gilt damit

$$\chi = \frac{3N\mu_0\mu_B^2}{2V\mu} = \text{const.}$$

1.6 Feste Teilchenzahl statt festes chemisches Potenzial

Hier fehlen noch Inhalte.

2 Landau-Diamagnetismus

2.1 Unabhängigkeit der Zustandssumme von Magnetfeld

Es gibt eine feste Anzahl Teilchen und verschiedene Energien, daher kann ich den kanonischen Formalismus benutzen.

Meine Zustände sind alle Impulse $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$. Daher muss ich für die Zustandssumme im Impulsraum, in dem $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$ gilt, integrieren.

$$Z_{C,1} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \exp(-\beta \hat{H}(\mathbf{p}))$$

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p \exp\left(-\beta \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2\right)$$

Jetzt ist zu zeigen, dass dies unabhängig von \mathbf{B} ist. Wir werden sogar zeigen, dass dies unabhängig von \mathbf{A} ist. Dazu führen wir eine Substitution durch:

$$\mathbf{q} := \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}.$$

Diese Substitution ist für alle impulsunabhängigen \mathbf{A} definiert und es gilt vor allem $d\mathbf{q} = d\mathbf{p}$, da \mathbf{A} nicht vom Impuls abhängt. Somit erhalten wir:

$$= \int_{\mathbb{R}^3} d^3q \exp\left(-\beta \frac{1}{2m} \mathbf{q}^2\right)$$

An dieser Stelle ist schon gezeigt, dass die Zustandssumme nicht von \mathbf{A} abhängt. Jedoch können wir dieses Integral auch analytisch lösen. Wir wählen Kugelkoordinaten für den Impuls und können aufgrund der Isotropie den Winkelanteil schon integrieren. Es bleibt:

$$= 4\pi \int_0^\infty dq q^2 \exp\left(-\beta \frac{1}{2m} q^2\right)$$

Dieses Integral können wir mit partieller Integration lösen. Dabei ist die erste Stammfunktion zur Exponentialfunktion die Gauß'sche Fehlerfunktion. Die zweite Stammfunktion dazu ist beinhaltet wieder die Fehlerfunktion, jedoch haben wir dies nur mit Mathematica herausbekommen. Nach weiteren Rechnungen und weiteren Substitutionen erhalten wir:

$$= \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2}.$$

Wir versuchen noch, die großkanonische Zustandssumme aufzustellen:

$$\begin{aligned} Z_{GC} &= \prod_p \prod_\sigma \left(1 + \exp\left(-\frac{E(p, \sigma) - \mu}{k_B T}\right)\right) \\ &= \prod_p \prod_\sigma \left(1 + \exp\left(-\frac{\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \mu}{k_B T}\right)\right) \end{aligned}$$

Wenn man daraus jetzt

$$\exp\left(\sum_p \sum_\sigma \ln(1 + \exp(-\dots))\right)$$

formt, kann man wieder die gleiche Substitution im Integral vornehmen. Dadurch sollte auch gezeigt sind, dass Z_{GC} nicht von \mathbf{A} abhängt.

2.2 Entartungsgrad von Landau-Niveaus

Der Hamiltonoperator ist gegeben als:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} \hat{x} B e_y \right)^2,$$

wobei \mathbf{e}_y den Einheitsvektor in y -Richtung bezeichnet.

Die Zeitentwicklung von $\hat{\mathbf{p}}$ ist gegeben durch:

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{p}}.$$

Wir setzen den Hamiltonoperator ein und benutzen die Darstellung im Impulsraum, so dass $\hat{p} = p$ und $\hat{x} = i\hbar \partial / \partial p_x$ ist. Der Impulsoperator ist nicht explizit zeitabhängig, so dass wir nur den Kommutator ausrechnen müssen, um die Zeitentwicklung zu erhalten.

Jedoch hatte das nicht sonderlich gut geklappt.

Daher lösen wir die Schrödingergleichung mit einem Ansatz und transformieren die verbleibende Differentialgleichung so, dass die Differentialgleichung des harmonischen Oszillators herauskommt, wie in **Volting-theo6** vorgerechnet.

Die Schrödingergleichung ist:

$$E |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle.$$

Wir setzen \hat{H} ein und multiplizieren teilweise aus, um die Variablen etwas zu separieren:

$$= \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_z^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{e}{c} B \hat{x} \right)^2 \right) |\psi\rangle.$$

Nun wird der Ansatz $\psi(\mathbf{r}) = \exp(ik_y y) \exp(ik_z z) u(x)$ gewählt. Im Ortsraum ist der Impulsoperator eine Raumableitung. Die Impulsoperatoren erzeugen dadurch mit der Kettenregel jeweils ein k_y^2 und ein k_z^2 . Für u bleibt folgende Differentialgleichung übrig:

$$\begin{aligned} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} u(x) + \frac{1}{2m} \left(\hbar k_y + \frac{e}{c} B x \right)^2 u(x) \\ \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) u(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{1}{2m} \left(\hbar k_y + \frac{e}{c} B x \right)^2 u(x). \end{aligned}$$

Aus dem Ansatz „Lorentzkraft ist Zentripetalkraft“ kann die Zyklotronfrequenz $\omega = eB/m$ hergeleitet werden. Dies setzen wir ein und erhalten:

$$\left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) u(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{1}{2m} \left(\hbar k_y + \frac{m\omega}{c} x \right)^2 u(x).$$

Der letzte Summand in der Klammer muss gerade $m\omega^2 q^2/2$ werden, damit die Differentialgleichung die richtige Form für den harmonischen Oszillator bekommt. Daher fordern wir

$$\frac{m}{2}\omega^2 q^2 = \frac{1}{2m} \left(\hbar k_y + \frac{m\omega}{c} x \right)^2,$$

was wir durch

$$q = \frac{1}{c}x + \frac{\hbar k_y}{m\omega}$$

erfüllen können. Nolting hat hier keinen Faktor $1/c$. In der ganzen Herleitung taucht bei ihm das c nicht auf. Liegt dies an natürlichen Einheiten mit $c = 1$? Wir müssen das c ab dieser Stelle weglassen, da wir ansonsten nicht die richtigen Ergebnisse erhalten. Jedenfalls erhalten wir dann folgende Differentialgleichung für u :

$$\left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) u(q) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} u(q) + \frac{m}{2} \omega^2 q^2 u(q).$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind vom harmonischen Oszillator bekannt. Somit ist gezeigt, dass die Bewegung einem harmonischen Oszillator entspricht. Mit der Quantenzahl n , die durch die Hermitepolynome eingeführt wird, sind die Energieeigenwerte durch $\hbar\omega(n + 1/2)$ gegeben. Die Energieeigenwerte sind allerdings auch in der Klammer gegeben. Somit können wir nach E auflösen und erhalten die Energieeigenwerte der Elektronen:

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.$$

Diese Energie hängt von n und k_z ab, die aus x und z gewonnen worden sind. k_y taucht hier nicht auf, so dass die Energieeigenwerte bezüglich k_y entartet sind. Der Entartungsgrad ist die Anzahl der möglichen Werte, die k_y annehmen kann.

Da das Teilchen im Quader mit Kantenlängen $\{L_i | i = 1, 2, 3\}$ eingesperrt ist, darf die x -Koordinate nur im Intervall

$$-\frac{L_x}{2} \leq x \leq \frac{L_x}{2}$$

liegen. Mit der vorhin benutzten Substitution können wir dies durch q ersetzen und erhalten:

$$-\frac{L_x}{2} \leq q - \frac{\hbar k_y}{eB} \leq \frac{L_x}{2}.$$

Wir subtrahieren auf allen drei „Seiten“ q und multiplizieren mit -1 . Da dies eine streng monoton fallende Transformationsfunktion ist, kehren sich die \leq zu \geq um. Wir drehen dann allerdings die Gleichung wieder um, so dass wir die ursprüngliche Form erhalten. Somit wird die Gleichung zu:

$$q - \frac{L_x}{2} \leq \frac{\hbar k_y}{eB} \leq q + \frac{L_x}{2}.$$

Dies bestimmt das maximale und minimale k_y . Wir haben also ein Spektrum von

$$\Delta k_y = \frac{1}{\hbar} eBL_x$$

im Phasenraum zur Verfügung. Die Zustände sind im Phasenraum mit der Quantenzahl m_y quantisiert:

$$k = \frac{2\pi}{L_y} m_y.$$

Aufgrund des linearen Zusammenhangs können wir mit Δk die Anzahl der Zustände, Δm_y , errechnen und erhalten so:

$$\Delta m_y = \frac{eBL_x L_y}{2\pi\hbar}.$$

2.3 Zustandsdichte des Elektronengases im Magnetfeld

Hier fehlen noch Inhalte.

2.4 Großkanonisches Potenzial

Das großkanonische Potential können wir aus der Zustandssumme der ersten Teilaufgabe errechnen, wobei wir die Summe über die beiden entarteten Spins direkt ausführen:

$$\Omega = -2k_B T \sum_a \ln \left(1 + \frac{E_a - \mu}{k_B T} \right).$$

In \sum_a werden auch entartete Zustände gemäß ihrem Entartungsgrad mehrfach gezählt. Diese Summe kann man generell durch ein Integral über die Zustandsdichte schreiben, die so (mit δ -Distributionen) konstruiert ist, dass sie bei jedem Energieeigenwert nach Integration den entsprechenden Entartungsgrad ergibt. Somit können wir schreiben:

$$\Omega = -2k_B T \int_{-\infty}^{\infty} dE \rho(E) \ln \left(1 + \frac{E - \mu}{k_B T} \right).$$

Wir gehen davon aus, dass die Zustandsdichte, die in der Teilaufgabe (c) gegeben ist, genau die ist, die hier funktioniert. Nun können wir die Sommerfeldentwicklung aus dem Skript benutzen, da wir hier nicht noch einmal alle Teilschritte – zweifache partielle Integration, Reihenentwicklung und Fermiintegrale – durchrechnen möchten. Als Endergebnis ist im Skript als Formel (5.71) angegeben:

$$\Omega = -2b(\mu) - \frac{\pi^2}{3} \rho(\mu) (k_B T)^2 + \mathcal{O}(T^4).$$

b ist dabei die zweifache Stammfunktion von ρ , die als Parameter stehengelassen werden durfte.

2.5 Magnetisierung des Elektronengases

Hier fehlen noch Inhalte.

3 Bose-Einstein-Kondensation

3.1 Entartungsgrad

Der Hamiltonian ist gegeben durch

$$H = \frac{1}{2M}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2}M\omega_0^2(x^2 + y^2 + z^2)$$

Die Lösung der Schrödingergleichung für diesen Hamiltonian lässt sich als Summe unabhängiger Lösungen harmonischer Oszillatoren darstellen.

$$E_{n_1+n_2+n_3} = \hbar\omega_0 \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right)$$

Ein Energiezustand E_n ergibt sich aus einer Kombination aus n_1 , n_2 und n_3 mit der Bedingung $n_1 + n_2 + n_3 = n$. Dabei handelt es sich um eine Kombination von n Elementen aus einer dreielementigen Menge mit Wiederholung. Aus der Kombinatorik wissen wir, dass die Anzahl an Möglichkeiten

$$\Omega(n) = \frac{3+n-1}{(3-1)!n!} = \frac{(2+n)!}{2n!} = (n+1)(n+2) = n^2 + 3n + 2$$

ist. Das ist der Entartungsgrad des Systems. Bestimme daraus nun die Zustandsdichte $\rho(\epsilon_n)$.

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega_0 \left(n + \frac{3}{2} \right) \\ \epsilon_n &= \hbar\omega_0 n \\ n &= \frac{\epsilon_n}{\hbar\omega_0} \\ \implies \Omega(\epsilon_n) &= \left(\frac{\epsilon_n}{\hbar\omega_0} \right)^2 + 3 \frac{\epsilon_n}{\hbar\omega_0} + 2 \end{aligned}$$

Die Zustandsdichte ist definiert als $\rho(\epsilon) = \frac{d\Omega}{d\epsilon}$.

$$\implies \rho(\epsilon_n) = \frac{2\epsilon_n}{(\hbar\omega_0)^2} + \frac{3}{\hbar\omega_0}$$

3.2 Thermodynamischer Limes

Die angegebene Zustandsdichte geht im Limes ($\hbar\omega \rightarrow 0$) gegen:

$$\rho(\epsilon) = \frac{2\epsilon_n}{(\hbar\omega_0)^2}$$

Für die Teilchenzahl gilt:

$$\begin{aligned}
 N &= N_0 + \int_0^\infty d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon}{k_B T}\right) - 1} \\
 &= N_0 + \int_0^\infty d\epsilon \frac{\frac{2\epsilon_n}{(\hbar\omega_0)^2}}{\exp\left(\frac{\epsilon}{k_B T}\right) - 1} \\
 &= N_0 + \frac{2(k_B T)^2}{\hbar^2 \omega_0^2} \zeta(2) = N_0 + \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3\hbar^2 \omega_0^2}
 \end{aligned}$$

N_0 ist dabei die Anzahl der Teilchen im Grundzustand.

3.3 BEC-Temperatur

Wir stellen den Ausdruck für N nach N_0 um:

$$N_0 = N - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3\hbar^2 \omega_0^2}$$

Gehe nun analog zur Vorlesung vor:

$$\begin{aligned}
 N_0 &= N \left(1 - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3N\hbar^2 \omega_0^2} \right) \\
 &= N \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right)
 \end{aligned}$$

Es gilt damit also:

$$T_0 = \frac{\hbar\omega_0 \sqrt{3N}}{\pi k_B}$$

3.4 Experimentelle Beobachtung

Für den harmonischen Oszillator gilt:

$$\begin{aligned}
 \langle n|H|n\rangle &= \langle n|T + V|n\rangle = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{3}{2} \right) \\
 \langle n|T|n\rangle &= \langle n|V|n\rangle \\
 \implies \langle n|V|n\rangle &= \frac{1}{2} M \omega_0^2 \langle n|x^2 + y^2 + z^2|n\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega_0 \left(n + \frac{3}{2} \right) \\
 \implies \langle n|x^2 + y^2 + z^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{M\omega_0} \left(n + \frac{3}{2} \right)
 \end{aligned}$$