13.Übung zur Thermodynamik und Statistik WS2011/12

Ausgabe: 17. Januar 2012 Priv.-Doz. Dr. U. Löw
Abgabe: 26. Januar 2012 bis $13^{\underline{00}}$Uhr

Hausaufgabe 13.1: Photonen - *Wien*sches Verschiebungsgesetz 5 Punkte

Die spektrale Energiedichte $\hat{\epsilon}(\omega, T)$ der elektormagnetischen Strahlung im Hohlraum ist durch die *Planck*sche Strahlungsformel

$$\hat{\epsilon}(\omega, T)\mathrm{d}\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\frac{\mathrm{d}\omega}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1}$$

gegeben.

(a) Zeigen Sie, dass $\hat{\epsilon}(\omega, T)$ ein Maximum aufweist, welches durch die transzendente Gleichung

$$(3 - x)\exp(x) = 3$$

bestimmt ist, wobei $x = \beta\hbar\omega$.

(b) Wie verhalten sich die Frequenzen ω_1 und ω_2 zueinander, bei denen die spektralen Energiedichten zweier Hohlräume der Temperaturen T_1 und T_2 maximal werden?

Hausaufgabe 13.2: Tight-Binding Modell in zweiter Quantisierung 5 Punkte

Der Hamiltonoperator des Tight-Binding Modells auf einer Kette der Länge N in zweiter Quantisierung ist gegeben durch

$$H = t_0 \sum_i a_i^\dagger a_i + t \sum_i \left(a_i^\dagger a_{i+1} + a_{i+1}^\dagger a_i \right). \tag{1}$$

Die reellen Parameter t_0 und t geben die Platzenergie und die Hüpfenergie an. $a_i^\dagger$ ist ein fermionischer Erzeugungsoperator und a_i ein fermionischer Vernichter. Diese Operatoren wirken auf den i-ten Kettenplatz und erfüllen die fermionischen Antikommutatorrelationen

$$\{a_i, a_j\} = \left\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\right\} = 0 \tag{2}$$

$$\left\{a_i, a_j^\dagger\right\} = \delta_{i,j} \tag{3}$$

Der Zustand einer Kette mit N Plätzen ist gegeben durch $\big|n_1, n_2, \ldots, n_N\big\rangle$ wobei $n_i \in \{0, 1\}$ die Besetzung des i-ten Platzes angeben. Die Wirkung der Operatoren lässt sicher daher ausdrücken durch

$$a_i\big|\ldots, n_i, \ldots\big\rangle = n_i(-1)^{\sum_{j<i} n_j}\big|\ldots, n_i - 1, \ldots\big\rangle \tag{4}$$

$$a_i^\dagger\big|\ldots, n_i, \ldots\big\rangle = (1 - n_i)(-1)^{\sum_{j<i} n_j}\big|\ldots, n_i + 1, \ldots\big\rangle. \tag{5}$$

In Worten ausgedrückt, bedeutet dies, dass $a_i^\dagger$ die Besetzung des i-ten Kettenplatzes um eins erhöht, wenn der Platz unbesetzt ist und a_i die Besetzung des i-ten Kettenplatzes um eins verringert, wenn der Platz besetzt ist. Das Tight-Binding Modell beschreibt daher ein System, bei dem fermionische Teilchen zwischen benachbarten Plätzen hin und her springen können.

Der Hamiltonoperator ist im Realraum gegeben, d.h. man kann sich eine reale Kette vorstellen, bei der die Plätze den Abstand d voneinander haben. Da die Teilchen auf der Kette springen können gibt es eine Wechselwirkung zwischen den verschiedenen Plätzen. Man nennt so einen Hamiltonoperator nicht-diagnoal. Allerdings lässt sich dieser Hamiltonoperator durch Fourier-Transformation diagonalisieren. Dies wird durch die Einführung neuer Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c_k^\dagger$ und c_k erreicht. Die ursprünglichen Operatoren ergeben sich aus diesen durch die Transformation

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_j} c_k \qquad a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR_j} c_k^\dagger. \tag{6}$$

Hier ist R_j der Richtungsvektor zum j-ten Kettenplatz und die k-Summation läuft über alle k-Werte der 1. Brillouin Zone, d.h. $k \in [-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}]$.

(a) Zeigen Sie, dass die transformierten Operatoren die fermionischen Antikommutatorrelationen erfüllen.

(b) Benutzen sie die Transformation in Glg. (6), um den Hamiltonoperator des Tight-Binding Modells auf einer Kette zu diagonalisieren, d.h. bringen Sie den Hamiltonoperator auf die Form

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k. \tag{7}$$

Geben Sie insbesondere ϵ_k explizit an.

Hausaufgabe 13.3: Bose Einstein Kondensation 5 Punkte

Wir betrachten N Teilchen in einem harmonischen Potential (Parabel-Potential) in drei Dimensionen. Die Zustandsdichte ist gegeben durch $D(\epsilon) \simeq \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3}$ (gültig im Bereich $\epsilon \gg \hbar\omega$).

(a) Warum tritt in diesem System Bose-Einstein-Kondensation auf?

(b) Berechnen Sie die **kritische Temperatur** T_c für eine Bose-Einstein-Kondensation des Systems.

Kontrollergebnisse: Teilchenzahldichte $n(\hbar\omega\beta)^3 = g_3(z)$ im Bereich $T > T_\mathrm{c}$
kritische Temperatur gegeben durch $n(\hbar\omega\beta_\mathrm{c})^3 = \zeta(3)$ mit $\beta_\mathrm{c} := \frac{1}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}$.

(c) Berechnen Sie die **Entropie** $\frac{S}{k_\mathrm{B}N}$ als Funktion des Kondensatanteils f_0.

Kontrollergebniss: $\frac{S}{k_\mathrm{B}N} = 4\frac{\zeta(4)}{\zeta(3)}(1 - f_0)$.

(d) Berechnen Sie die **spezifische Wärme** $\frac{C_V(T)}{Nk_\mathrm{B}}$ für $T \leq T_\mathrm{c}$ und $T > T_\mathrm{c}$.

Kontrollergebniss: $$\frac{C_V(T)}{Nk_\mathrm{B}} = \begin{cases} 12\frac{\zeta(4)}{\zeta(3)}\left(\frac{T}{T_\mathrm{c}}\right)^3 & \text{für } T \leq T_\mathrm{c} \ , \\ 12\frac{g_4(z)}{g_3(z)} - 9\frac{g_3(z)}{g_2(z)} & \text{für } T > T_\mathrm{c} \ . \end{cases}$$

(e) Bestimmen Sie (falls existent) die Grenzwerte $\lim_{T\to T_\mathrm{c}+} \frac{C_V(T)}{Nk_\mathrm{B}}$ und $\lim_{T\to T_\mathrm{c}-} \frac{C_V(T)}{Nk_\mathrm{B}}$.

(f) Welche Ordnung besitzt der Phasenübergang zum Bose-Einstein-Kondensat?

(g) Skizzieren Sie $\frac{C_V(\frac{T}{T_\mathrm{c}})}{Nk_\mathrm{B}}$.

TuS Blatt 13

$\boxed{\text{A 13.1}}$:

a) $\mathcal{E}\, d\omega = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{d\omega}{\exp(x)-1}$ $\qquad x = \beta \hbar \omega$

$\Rightarrow \frac{3\omega^2 \hbar}{\pi^2 c^3} (\exp(x)-1) - \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} (\beta \hbar \exp(x)) = 0$

$\Leftrightarrow 3(\exp(x)-1) = x \exp(x)$

$\Leftrightarrow -3 = \exp(x)(x-3)$

b) $x_1 = \beta_1 \hbar \omega_1 \quad , \quad x_2 = \beta_2 \hbar \omega_2$

$$\left[\begin{array}{l} \exp(x_1)(x_1-3) = \exp(x_2)(x_2-3 \\ \Rightarrow \exp(\cancel{x_1}-\cancel{x_2}) = \frac{\beta\hbar\omega_2-3}{\beta\hbar\omega_1-3} \end{array}\right]$$

$x_{max} = X_1 = X_2$

$\frac{\omega_1}{T_1} = \frac{\omega_2}{T_2}$

$\boxed{\text{A 13.2}}$

$H = t_0 \sum_i a_i^+ a_i + t \sum_i (a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i)$

Beispiel: 2 Teilchen : Basis: $\left\{ \begin{array}{l} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{array} \right.$

i=1 i=2

[illegible]

i=1 i=2

$\langle 00 | H | 00 \rangle = 0 \qquad \langle 10 H | 01 \rangle = t$

$\langle 10 | H | 10 \rangle = t_0$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & t & 0 \\ 0 & t & t_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2t_0 \end{pmatrix}$$

$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_j} c_k \quad , \quad a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR_j} c_k^+$

$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikR_j} a_j \quad , \quad \{c_k, c_{k'}\} = \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{ikR_j + ik'R_{j'}} \underbrace{\{a_j, a_{j'}\}}_{=0} = 0$

$\{c_k, c_{k'}^+\} = \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{ikR_j - ik'R_{j'}} \underbrace{\{a_j, a_{j'}^+\}}_{=\delta_{j,j'}} = \frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')R_j} = \delta_{k,k'}$

b) $$H = \sum_{kk'} \sum_{j} \frac{t_0}{N} e^{i(k-k')R_j} c_k^+ c_{k'} + \sum_{kk'} \sum_{j} \frac{t}{N} e^{i(k-k')R_j} c_k^+ c_{k'} (e^{-iak'} + e^{iak'})$$

$$= \sum_{kk'} (t_0 \delta_{k,k'} c_k^+ c_{k'} + t c_k^+ c_{k'} \delta_{k,k'} (e^{-iak'} + e^{iak'}))$$

$$= \sum_{k} \underbrace{(t_0 + 2t \cos(ak))}_{\varepsilon_k} c_k^+ c_k$$