H 10.2

(a) Landau Diamagnetismus

Welchen Formalismus nehme ich denn jetzt?
Feste Anzahl Teilchen $\Rightarrow$ nicht großkanonisch.
Verschiedene Energien $\Rightarrow$ nicht mikrokanonisch.
Also kanonisch. Was sind denn jetzt meine Zustände?
Alle Impulse $\vec{p}$. Jedoch sind die aus $\mathbb{R}^3$. Womit ich wohl integrieren muss.

$$Z_{c,1} = \int d^3p \; \exp\left(-\beta H(\vec{p})\right)$$

$$= \int d^3p \; \exp\left(-\beta \frac{1}{2m}\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\right)$$

Dies ist eine 3D Glockenkurve, die auf den Punkt $\vec{p} = -\frac{e}{c}\vec{A}$ verschoben ist. Somit dürfte $\vec{A}$ für das Integral keinen Unterschied machen. Vielleicht kann ich das auch zeigen.

$$\cancel{= \int d^3p \; \exp\left(-\frac{\beta}{2m}\left(p^2 + 2\frac{e}{c}\vec{p}\vec{A} + \frac{e^2}{c^2}A^2\right)\right)}$$

~~Ab hier sind Kugelkoordinaten wohl sinnvoll. Wähle das Koordinatensystem so, dass $\vec{A}$ in z-Richtung zeigt.~~

$$\cancel{\vec{p}\vec{A} = p\,A\,\cos(\vartheta).}$$

$$\cancel{Z_{c,1} = \int_0^{2\pi} d\varphi \; r \int_0^{\pi} d(\cos\vartheta)\; r \int_0^{\infty} dr}$$

$$\cancel{\exp\left(\frac{\beta}{2m} r^2\right) \; \exp\left(2\frac{e}{c} r A \cos(\vartheta)\right) \; \exp\left(\frac{e^2}{c^2}A^2\right)}$$

$$2\pi \exp\left(\frac{e^2}{c^2}A^2\right)\int_0^\infty dr\, r^2 \exp\left(-\frac{\beta}{2m} r^2\right)\underbrace{\int_{-1}^{1} d(\cos\vartheta)\;\exp\left(2\frac{e}{c}\, r A \cos(\vartheta)\right)}$$

$$\frac{1}{2\frac{e}{c}\, rA}\;\exp\left(2\frac{e}{c}\, rA\cos(\vartheta)\right)\Big|_{-1}^{1}$$

$$= \frac{1}{e/c\; rA}\;\sinh\left(-\frac{\beta}{m}\frac{e}{c}\, rA\right)$$

Zusammen kürzt sich ein r weg.

$$\frac{2\pi c}{eA}\;\exp\left(-\frac{\beta e^2}{2mc^2}A^2\right)\int_0^\infty dr\, r\;\exp\left(-\frac{\beta}{2m}r^2\right)\;\sinh\left(-\frac{\beta}{m}\frac{e}{c}\, rA\right)$$

$$Z_{c,1} = \int d^3p\;\exp\left(-\beta\frac{1}{2m}\left(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\right)$$

Substituiere: $\vec{q} := \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}$

$d\vec{q} = d\vec{p}$ Also:

$$= \int d^3\vec{q}\;\exp\left(-\frac{\beta}{2m}q^2\right)$$

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

~~$z = q^2$ $dz = 2q\, dq$~~

~~$dq = \frac{dz}{2q}$~~

$$= 4\pi \left(-\frac{\beta}{2m}\right)^{-2} \int dq \; \frac{d^2}{dq^2} \; \exp\left(-\frac{\beta}{2m} q^2\right)$$

$$s = \sqrt{\frac{\beta}{2m}}\; q$$

$$= 4\pi\left(-\frac{\beta}{2m}\right)^{-2} \left(\frac{\beta}{2m}\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dq^2} \int ds \; \exp(-s^2)$$

$$dq = \frac{ds}{\sqrt{\frac{\beta}{2m}}}$$

$$= 4\pi \; - \left(\frac{\beta}{2m}\right)^{-5/2} \; \frac{d^2}{dq^2}$$

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

$$z = q^2 \qquad dz = 2q\, dq$$

$$dq = \frac{dz}{2q}$$

$$= 2\pi \int_0^\infty \frac{dz}{2q} \; z \; \exp\left(-\frac{\beta}{2m} z\right)$$

das klappt so auch nicht.

Mathematica

$$\int dq \; e^{-q^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(q) + C$$

$$4\pi \int_0^\infty dq \; \underbrace{q^2}_{u} \; \underbrace{\exp\left(-\frac{\beta}{2m} q^2\right)}_{v'}$$

partielle Integration.

$$= 4\pi \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} q^2 \operatorname{erf}(q) \Big|_0^\infty \; - \underbrace{\int dq \; 2q \; \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(q)}_{= -\frac{1}{4}\sqrt{\pi}\left(\frac{2e^{-q^2} q}{\sqrt{\pi}} + (-1+2q^2)\operatorname{erf}(q)\right)\Big|_0^\infty} \right.$$

$$= -\frac{1}{2} e^{-q^2} q + \frac{1}{4}\sqrt{\pi}\, \mathrm{erf}(q) - \frac{\sqrt{\pi}}{2} q^2 \, \mathrm{erf}(q)$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{1}{2} e^{-q^2} q + \frac{1}{4}\sqrt{\pi}\, \mathrm{erf}(q) \Big|_0^\infty$$

$$= \frac{1}{4}\sqrt{\pi}$$ ohne Vorfaktor.

Jetzt noch substituieren:

$$t = \sqrt{\frac{\beta}{2m}}\, q \qquad dq = \left(\frac{\beta}{2m}\right)^{-\frac{1}{2}} dt$$

$$q^2 = \left(\frac{\beta}{2m}\right)^{-1} t^2$$

$$4\pi \left(\frac{\beta}{2m}\right)^{-3/2} \frac{1}{4}\sqrt{\pi} = \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2}$$

Das stimmt jetzt. Somit ist $Z_{c,1}$ völlig unabhängig von $\vec{A}$.

(b) Landau - Niveaus

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} + \frac{e}{c} x B \hat{e}_y\right)^2$$

Die Zeitentwicklung von x ist gegeben durch:

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{p}, H] + \frac{\partial}{\partial t} x$$

$$[\vec{p}, H] = \frac{1}{2m}\left[\vec{p}, \; p^2 + \frac{e}{c} p_y x B + \frac{e}{c} x B p_y + \frac{e^2}{c^2} x^2 B^2\right]$$

Benutze Impulsdarstellung, so dass $x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$ ist.

$$= \frac{1}{2m}\left[\vec{p}, \; \frac{e}{c} B \; p_y \, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} + \frac{e}{c} B i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} p_y - \frac{e^2}{c^2} \hbar^2 B^2 \frac{\partial^2}{\partial p_x^2}\right]$$

<u>Erster Teil:</u>

$$\frac{1}{2m}\frac{e}{c} B \, i\hbar \left[\vec{p}, p_y \frac{\partial}{\partial p_x}\right]$$

$$\vec{p}\, p_y \frac{\partial}{\partial p_x} \psi(\vec{p}) - p_y \frac{\partial}{\partial p_x} \vec{p}\, \psi(\vec{p})$$

$$= \vec{p}\, p_y \psi'(\vec{p}) - p_y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \psi(\vec{p}) - p_y \vec{p}\, \psi'(\vec{p})$$

$$= -p_y \; \hat{e}_x$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{1}{2m}\frac{e}{c} B \, i\hbar p_y \quad \hat{e}_x$$

<u>Zweiter Teil:</u>

$$\frac{1}{2m} \; \frac{e}{c} B i\hbar \left[\vec{p}, \frac{\partial}{\partial p_x} p_y\right]$$

Dies ist doch der gleiche Kommutator wie oben, weil ∂_{p_x} und p_y vertauschen.

Dritter Teil

$$-\frac{e^2}{c^2}\hbar^2 B^2 \left[\vec{p}, \frac{\partial^2}{\partial p_x^2}\right]$$

$$\vec{p}\,\partial_x^2 \psi - \partial_x^2 \vec{p}\,\psi$$

$$= \vec{p}\,\psi'' - \partial x\left(\vec{p}\,'\psi + \vec{p}\,\psi'\right)$$

$$= \vec{p}\,\psi'' - \underset{0}{p''\psi} - \underset{\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}}{p'\psi'} - p'\psi' - p\,\psi''$$

$$= -2\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\psi' = -2\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\partial_x\,\psi$$

$$2\,\frac{e^2}{c^2}\underset{-(i\hbar)^2 = \hbar^2}{\hbar^2} B^2 \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\partial_x = -2\,\frac{e^2}{c^2}\,i\hbar\, B^2\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} x$$

Alle drei Terme zusammen:

$$-\frac{1}{m}\frac{e}{c}B\,i\hbar\, p_y\,\vec{e}_x \qquad -2\,\frac{e^2}{c^2}\,i\hbar\, B^2\,\hat{e}_x\,\hat{x}$$

Der letzte Teil sieht nicht hilfreich aus.

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{1}{m}\frac{e}{c}B\,p_y\,\hat{e}_x - 2\,\frac{e^2}{c^2}B^2\,\vec{e}_x\,\hat{x}$$

Energieniveaus

Wie komme ich jetzt an die Energiniveaus?

Normalerweise $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ und in z-Richtung noch $\frac{p_z^2}{2m}$. Ist das alles? Woher bekomme ich das $\hbar$?

Bei einem harmonischen Oszillator sieht das normalerweise so aus:

$$E_n = \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$$

$$\dot{p} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = \frac{1}{i\hbar}\frac{m}{2}\omega^2 [p, x^2]$$

Gehe zu die Impulsdarstellung mit $x^2 = (i\hbar\nabla)^2$

$$\frac{1}{i\hbar}\frac{m}{2}\omega^2 (i\hbar)^2 [p, \nabla^2]$$

$$p\nabla^2\psi - \nabla^2 p\psi$$

$$= p\psi'' - \nabla(p'\psi + p\psi')$$

$$= p\psi'' - (p''\psi + 2p'\psi' + p\psi'')$$

$$= -2p'\nabla\psi$$

$$\Rightarrow -2\frac{m}{2}\omega^2 \vec{e}_x \hat{x}$$

Vergleich mit vorherigem Ergebnis:

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{1}{m}\frac{e}{c}B p_y \hat{e}_x - 2\frac{e^2}{c^2}B^2 \vec{e}_x \hat{x}$$

Jetzt weiß ich nicht genau, woher der erste Term kommt.

$$-2\frac{m}{2}\omega^2 = -2\frac{e^2}{c^2}B^2$$

$$\omega^2 = \frac{2}{m}\left(\frac{e}{c}B\right)^2$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2}{m}}\,\frac{e}{c}B$$

Passt das alles überhaupt von den Einheiten?

$$\frac{1}{s^2} = \frac{1}{kg}\left(\frac{C}{\frac{m}{s}}T\right)^2$$

$$= \frac{1}{kg}\left(\frac{As^2}{m}T\right)^2$$

$$= \frac{1}{kg}\left(\frac{\cancel{As^2}}{m}\,\frac{kg}{\cancel{As^2}}\right)^2$$

$$= \frac{kg}{m^2}$$

Das passt jetzt nicht

Ist der zweite Summand von den Einheiten richtig?

$$\left(\frac{As^2}{m}\,\frac{kg}{As^2}\right)^2 = \left(\frac{kg}{m}\right)^2 \qquad [\dot{p}] = kg\,\frac{m}{s}$$

Auch nicht. Ist das durch die Impulsraumdarstellung überhaupt richtig?

Entartungsgrad

Wieso sind die Impulse im Kasten quantisiert?
Der Impuls ist die Wellenzahl. Die muss so sein, dass die Welle in den Kasten passt.

Angenommen, ich kann das ausrechnen und bekomme die größte Wellenlänge raus, die noch passt. Was dann? Woher kommt die Entartung? Beim Wasserstoffatom kam die m_l-Entartung durch die Rotationssymmetrie. Gibt es hier eine ähnliche Symmetrie?

(d) Großkanonisches Potential

Gegeben ist die Zustandsdichte $\rho(\varepsilon)$ als:

$$\rho(\varepsilon) = m\hbar\omega \cdot \left(x(\varepsilon)\sqrt{1 + x^2(\varepsilon)} + \operatorname{arcsch}(x(\varepsilon))\right)$$

mit

$$x(\varepsilon) = \frac{m\hbar\omega}{\sqrt{2m\varepsilon}}$$

Jetzt muss daraus Ω geschrieben werden.

$$\underline{\Omega} = -k_B T \ln(Z_{Gr})$$

Nehme Formel (5.61)

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

Dort kann ich das ρ einsetzen. Aber ob ich das dann weiter ausrechnen kann? Vielleicht brauche ich das auch gar nicht und kann das nur mit der Sommerfeldentwicklung machen.
Die erste Ableitung des Logarithmus gibt $f(E)$, die zweite gibt $f'(E)$. Nun noch die Integrationskonstante.

$$a(E) = \int_{-\infty}^{E} dE'\, \rho(E')$$

$$b(E) = \int_{-\infty}^{E} dE'\, a(E') = \int_{-\infty}^{E} dE' \int_{-\infty}^{E'} dE''\, \rho(E'')$$

Damit ist das großkanonische Potential:

$$\Omega = -\int_{-\infty}^{\infty} dE \; b(E) \; f'(E)$$

Da $f'(E)$ nur bei $E = \mu$ interessant ist, führt man die Taylorentwicklung durch.

$$b(E) = b(\mu) + a(\mu)(E-\mu) + \frac{1}{2}\rho(\mu)(E-\mu)^2 + \mathcal{O}(E^3)$$

Nun ist das eine Entwicklung in E und nicht in T. Jedenfalls kann man jetzt diese Fermiintegrale benutzen.

Ich erhalte so:

$$\Omega = b(\mu) + \frac{1}{2}\rho(\mu)\frac{\pi^2}{3}(k_B T)^2$$

$$= b(\mu) + \frac{\pi^2}{6}\rho(\mu)(k_B T)^2$$

Jetzt kann man noch $\rho(\mu)$ einsetzen, aber das bringt auch nicht mehr viel.

(e) Magnetisierung bei tiefen Temperaturen

Die Magnetisierung sollte sein:

$$M = \pm \frac{\partial \underline{\Omega}}{\partial B}$$

Jetzt taucht das B nur gar nicht in $\underline{\Omega}$ auf.