H 10.2

(a) Unabhängigkeit von $\vec{A}$

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.

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

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

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

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

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

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

Zusammen kürzt sich ein r weg.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 substituti:

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

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

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

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

Neuer Versuch nach Noltings Buch und Übung

Ich benutze jetzt doch den großkanonischen Formalismus, weil ich Ω noch brauchen werde.

Was sind meine Zustände? Die bestehen aus Impuls $\vec{p}$ und Spin σ. Das sind Einteilchenzustände. Hier muss aber über alle Systemzustände iteriert werden.

Gerade auf Papier nachgerechnet und im Skript gelesen. Die α_i sind Einteilchenzustände.

Also schreibe ich erstmal:

$$Z_{GC} = \prod_p \prod_\sigma \left(1 + \exp\left(-\frac{H-\mu}{k_B T}\right)\right)$$

$$= \prod_p \prod_\sigma \left(1 + \exp\left(-\frac{\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \mu}{k_B T}\right)\right)$$

Wenn ich daraus $\exp\left(\sum_p \sum_\sigma \ln\left(1+\exp\left(-\frac{\dots}{\dots}\right)\right)\right)$

mache, kann ich wohl $\vec{q} := \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ machen,

aber hilft das?

(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.

<u>Dritter Teil</u>

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

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

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

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

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

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

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 Wasserstoff-atom kam die m_ℓ-Entartung durch die Rotations-symmetrie. Gibt es hier eine ähnliche Symmetrie?

Neuer Versuch nach Lesen in Noltings Buch

Um die Frequenz zu erhalten, löst Nolting die Schrödingergleichung.

Diese ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

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

In y und z sind dies ebene Wellen, in x etwas anderes. Daher ist wohl folgender Ansatz legitim:

$$\psi(\vec{r}) = e^{ik_y y} e^{ik_z z} u(x)$$

$$E\, u(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} u(x)$$

$$+ \frac{1}{2m}\left(\hbar k_y + \frac{e}{c} B \hat{x}\right)^2 u(x)$$

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

Jetzt führt Nolting die Zyklotronfrequenz ein.

$$m r \omega^2 = e \omega r B$$

$$\omega = \frac{e}{m} B \qquad\qquad \hbar\omega = \underbrace{\hbar \frac{e}{m}}_{\stackrel{!}{=}\ \mu_B} B$$

stimmt, Umschlag Gerthsen

Jetzt möchte man so substitiern, dass die Oszillator-gleichung herauskommt. Diese ist

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 q^2$$

$$\frac{e}{m}B = \omega$$

$$\frac{e}{c}B = \frac{m\omega}{c}$$

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

$$= \frac{1}{2m}\left(m^2\omega^2 q^2\right)$$

Daher muss gelten:

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

$$q = \frac{1}{c}\hat{x} + \frac{\hbar k_y}{m\omega} = \frac{1}{c}\hat{x} + \frac{\hbar k_y}{m\frac{e}{m}B} = \frac{1}{c}\hat{x} + \frac{\hbar k_y}{eB}$$

Im Gegensatz zu Nolting habe ich hier noch ein c stehen. Jedenfalls kann man das so machen, ich nehme mal die Version von Nolting.

Für die Energie klammer gilt, dass sie $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ ist. Somit ist die Energie des Systems dann auch:

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

Nun hängt diese Energie von n und k_z ab, also x und z sind verwendet. Jetzt muss noch y

verarbeitet werden.

Der Kasten in x ist durch $x = \pm \frac{L_x}{2}$ begrenzt.

Also gilt dann:

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

Dort setzen wir die Substitution ein.

$$q = x + \frac{\hbar k_y}{eB}$$

$$\Longleftrightarrow \quad x = q - \frac{\hbar k_y}{eB}$$

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

Überall $-q$

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

Dann $\cdot(-1)$ und Umdrehen

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

Somit ist das maximale k_y bestimmt. Daraus die Anzahl der Zustände: Bei Zustandsnummer n ist k

$$k = \frac{2\pi}{L_x} \cdot n$$

Die Δk durch $\frac{2\pi}{L_x}$ ist Δn, die Entart.

(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.

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

Nehme Formel (5.61)

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

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.

Nächster Versuch

In der (a) hatte ich für die Zustandsdichte:

$$Z_{GC} = \prod_p \prod_\sigma \left(1 + \exp\left(-\frac{\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \mu}{k_B T}\right)\right)$$

Ich bilde $\underline{\Omega}$:

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

$$= -k_B T \sum_p \sum_\sigma \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E(p,\sigma) - \mu}{k_B T}\right)\right)$$

Daraus soll ich jetzt ein Energieintegral machen.
$\sum_\sigma \ldots = 2 \ldots$, weil die Spins hier entartet sind.

$$= -2k_B T \sum_i \ln\left(1 + \exp\left(-\frac{E_{\alpha_i} - \mu}{k_B T}\right)\right)$$

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

Scheint so in Ordnung zu sein. Dann Sommerfeldentwicklung.

$$\underline{\Omega} = -2b(\mu) - \frac{\pi^2}{3}\rho(\mu)(k_B T)^2 + \mathcal{O}(T^4) \qquad (5.71)$$

(e) Magnetisierung bei tiefen Temperaturen

Die Magnetisierung ist Vorl. 3.2.9

$$M = -\frac{1}{V}\frac{\partial \Omega}{\partial B}$$

Jetzt taucht das B nur gar nicht in Ω auf.

Wenn $b(E)$ und $\rho(E)$ allerdings vom Magnetfeld abhängen, dann ist B drin und M kann errechnet werden.