RWTH Aachen Univ.-Prof. Dr. V. Meden
Institut für Theorie der Statistischen Physik Dr. U. Kahlert

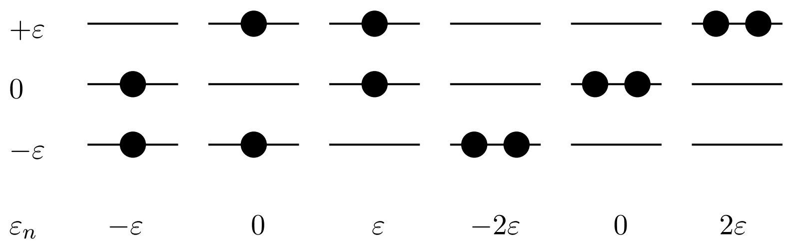
WS 2019/20 **Theoretische Physik IV – 13. Übungsblatt** Abgabe: 22.1.2020

Musterlösung

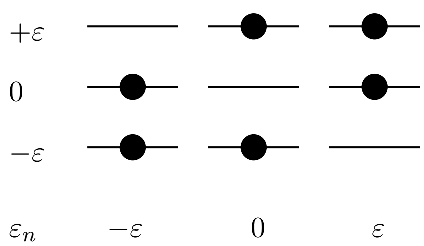
---

1. Zweiteilchensystem (3+3+3 = 9 Punkte)

a)
Für Bosonen findet man 6 unterschiedliche Zustände mit Energien ε_n :



Für Fermionen findet man nur 3 unterschiedliche Zustände mit Energien ε_n :



b)

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_n \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_n} = \mathrm{e}^{\beta\varepsilon} + \mathrm{e}^{\beta 0} + \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon} + \mathrm{e}^{2\beta\varepsilon} + \mathrm{e}^{\beta 0} + \mathrm{e}^{-2\beta\varepsilon} \\
&= 2 + 2\cosh(\beta\varepsilon) + 2\cosh(2\beta\varepsilon)\,. \\
E &= \frac{1}{Z}\sum_n \varepsilon_n \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_n} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = -\varepsilon\,\frac{\sinh(\beta\varepsilon) + 2\sinh(2\beta\varepsilon)}{1 + \cosh(\beta\varepsilon) + \cosh(2\beta\varepsilon)}\,.
\end{aligned}
$$

Grenzfälle:

$$T \to 0,\ \beta \to \infty \quad : \quad E \to -2\varepsilon \quad \text{(Grundzustand)}$$

$$T \to \infty,\ \beta \to 0 \quad : \quad E \to 0\,.$$

c)

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_n \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_n} = \mathrm{e}^{\beta\varepsilon} + \mathrm{e}^{\beta 0} + \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon} = 1 + 2\cosh(\beta\varepsilon) \\
S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\left(kT\ln Z\right) = k\ln Z + \frac{kT}{Z}\frac{\partial}{\partial T}Z
\end{aligned}
$$

$$= \quad k \ln\left(1 + 2\cosh\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)\right) - \frac{2\varepsilon}{T}\frac{\sinh\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}{1 + 2\cosh\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}\,.$$

Überprüfung des 3. Hauptsatzes:

$$T \to 0^+ \;:\; S \simeq k \ln\left(\mathrm{e}^{\varepsilon/(kT)}\right) - \frac{\varepsilon}{T} = 0\,.$$

Dies ist in Übereinstimmung mit dem 3. Hauptsatz (1). Der Grundzustand ist eindeutig.

2. Fermi-Dirac und Bose-Einstein-Statistik (4+5 = 9 Punkte)

a)
Zur Vereinfachung der Schreibweise führen wir formal einen "großkanonischen Hamilton–Operator"

$$H_g = H - \mu\, N = \sum_\nu \epsilon_g(\nu)\, a_\nu^+\, a_\nu, \qquad \epsilon_g(\nu) = \epsilon(\nu) - \mu$$

ein, so dass

$$\langle a_\nu^+\, a_\nu \rangle = \frac{1}{Z_g}\,\mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\, H_g}\, a_\nu^+\, a_\nu\right\},$$

$Z_g = \mathrm{Sp}\left\{\exp\left(-\beta\, H_g\right)\right\}$. Wir benutzen die Beziehung

$$a_\nu\, |n_1, \ldots, n_\nu, \ldots\rangle = \sqrt{n_\nu}\, |n_1, \ldots, n_\nu - 1, \ldots\rangle$$

und berechnen

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\beta\, H}\, a_\nu\, |n_1, \ldots, n_\nu, \ldots\rangle &= \sqrt{n_\nu}\, \mathrm{e}^{-\beta\, H}\, |n_1, \ldots, n_\nu - 1, \ldots\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\beta\, E}\, \mathrm{e}^{\beta\, \epsilon(\nu)}\, \sqrt{n_\nu}\, |n_1, \ldots, n_\nu - 1, \ldots\rangle, \\
a_\nu\, \mathrm{e}^{-\beta\, H}\, |n_1, \ldots, n_\nu, \ldots\rangle &= \mathrm{e}^{-\beta\, E}\, a_\nu\, |n_1, \ldots, n_\nu, \ldots\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\beta\, E}\, \sqrt{n_\nu}\, |n_1, \ldots, n_\nu - 1, \ldots\rangle
\end{aligned}$$

mit

$$E = \sum_\nu n_\nu\, \epsilon(\nu).$$

Aus dem Vergleich dieser beiden Rechnungen und der Tatsache, dass die Besetzungszahlzustände $|n_1, \ldots, n_\nu, \ldots\rangle$ vollständig sind, gewinnen wir die erste Behauptung, die sich gleichlautend auf H_g bzw. $\epsilon_g(\nu)$ überträgt:

$$\mathrm{e}^{-\beta\, H_g}\, a_\nu = \mathrm{e}^{\beta\, \epsilon_g(\nu)}\, a_\nu\, \mathrm{e}^{-\beta\, H_g}.$$

c)
Mit dem Ergebnis aus a), der Kommutator– bzw. Anti–Kommutator–Regel

$$a_\nu^+\, a_\nu = \pm\left(a_\nu\, a_\nu^+ - 1\right)$$

(oberes Vorzeichen: Bosonen, unteres Vorzeichen: Fermionen) und der Invarianz der Spur gegen zyklische Vertauschung berechnen wir

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\, H_g}\, a_\nu^+\, a_\nu\right\} &= \pm\,\mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\, H_g}\, a_\nu\, a_\nu^+\right\} \mp Z_g \\
&= \pm\,\mathrm{e}^{\beta\, \epsilon_g(\nu)}\, \mathrm{Sp}\left\{a_\nu\, \mathrm{e}^{-\beta\, H_g}\, a_\nu^+\right\} \mp Z_g
\end{aligned}$$

$$= \quad \pm\, \mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)}\,\mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\,H_g}\,a_\nu^+\,a_\nu\right\} \mp Z_g.$$

Daraus eliminieren wir

$$\left[\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)} \mp 1\right]\;\mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\,H_g}\,a_\nu^+\,a_\nu\right\} = Z_g$$

bzw. das erwartete Ergebnis

$$\langle a_\nu^+\,a_\nu\rangle = \frac{1}{Z_g}\,\mathrm{Sp}\left\{\mathrm{e}^{-\beta\,H_g}\,a_\nu^+\,a_\nu\right\} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)} \mp 1} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\,(\epsilon(\nu)-\mu)} \mp 1}.$$

3. Korrelationen bei unabhängigen Fermionen und Bosonen (9 Punkte)

Wir wählen als abkürzende Schreibweise für das großkanonische Ensemble

$$\hat{H}_g = \sum_\nu \hat{n}_\nu\,\epsilon_g(\nu), \qquad \epsilon_g(\nu) = \epsilon(\nu) - \mu.$$

Wir differenzieren die Darstellung

$$\langle\hat{n}_\nu\rangle = \frac{1}{Z_g}\,\mathrm{Sp}\left(\hat{n}_\nu\,\mathrm{e}^{-\beta\,H_g}\right) = -\frac{1}{\beta\,Z_g}\,\frac{\partial Z_g}{\partial\epsilon_g(\nu)}$$

nochmals nach $\epsilon_g(\nu')$ und erhalten

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\langle\hat{n}_\nu\rangle}{\partial\epsilon_g(\nu')} &= -\frac{\beta}{Z_g}\,\mathrm{Sp}\left(\hat{n}_\nu\,\hat{n}_{\nu'}\,\mathrm{e}^{-\beta\,H_g}\right) - \frac{1}{Z_g^2}\,\frac{\partial Z_g}{\partial\epsilon_g(\nu')}\,\mathrm{Sp}\left(\hat{n}_\nu\,\mathrm{e}^{-\beta\,H_g}\right) \\
&= -\beta\,\left(\langle\hat{n}_\nu\,\hat{n}_{\nu'}\rangle - \langle\hat{n}_\nu\rangle\,\langle\hat{n}_{\nu'}\rangle\right), \\
\langle\hat{n}_\nu\,\hat{n}_{\nu'}\rangle &= -\frac{1}{\beta}\,\frac{\partial\langle\hat{n}_\nu\rangle}{\partial\epsilon_g(\nu')} + \langle\hat{n}_\nu\rangle\,\langle\hat{n}_{\nu'}\rangle.
\end{aligned}$$

Nun ist für $\nu \neq \nu' \quad \partial\langle\hat{n}_\nu\rangle/\partial\epsilon_g(\nu') = 0$, so dass für Bosonen und Fermionen

$$\langle\hat{n}_\nu\,\hat{n}_{\nu'}\rangle = \langle\hat{n}_\nu\rangle\,\langle\hat{n}_{\nu'}\rangle, \qquad \nu \neq \nu',$$

d.h., die Besetzung verschiedener Zustände $\nu \neq \nu'$ ist für unabhängige Teilchen auch statistisch unabhängig.

Für $\nu = \nu'$ berechnen wir (mit $\eta = +1$ für Bosonen und $\eta = -1$ für Fermionen)

$$\begin{aligned}
\langle\hat{n}_\nu\rangle &= \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)} - \eta}, \\
-\frac{1}{\beta}\,\frac{\partial\langle\hat{n}_\nu\rangle}{\partial\epsilon_g(\nu)} &= \frac{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)}}{\left[\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)} - \eta\right]^2} = \langle\hat{n}_\nu\rangle\,\left(1 + \eta\,\langle\hat{n}_\nu\rangle\right),
\end{aligned}$$

so dass für *Bosonen*

$$\langle n_\nu^2\rangle = \langle\hat{n}_\nu\rangle\,\left(1 + 2\,\langle\hat{n}_\nu\rangle\right) = \langle\hat{n}_\nu\rangle\,\frac{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)} + 1}{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_g(\nu)} - 1} \geq \langle\hat{n}_\nu\rangle.$$

In der letztgenannten Ungleichung kommt der "Bose–Charakter" der Teilchen zum Ausdruck: es werden Besetzungszahlen $\hat{n}_\nu > 1$ bevorzugt, und zwar um so deutlicher, je tiefer die Temperatur $T = 1/\beta$ ist. Für *Fermionen* erhalten wir dagegen

$$\langle n_\nu^2\rangle = \langle\hat{n}_\nu\rangle.$$

In dieser Aussage kommt der "Fermi–Charakter" bzw. das Pauli–Prinzip der Teilchen zum Ausdruck: die Eigenwerte des Besetzungszahloperators $\hat{n}_\nu$ sind 0 oder 1, bzw., es gilt bereits für den Operator $\hat{n}_\nu^2 = \hat{n}_\nu$.