Universität Bonn
Physikalisches Institut
Prof. Dr. J. Kroha, U. Pohl, R. Kramer

20.12.2024
Wintersemester 2024/25

Theoretische Physik IV: Statistische Physik
Übungsblatt 11

(Abgaben auf eCampus hochladbar bis 13 Uhr am 10.01.2025)

Quickies

a) Leiten Sie die spektrale Energiedichte $\frac{\mathrm{d}E(\omega)}{\mathrm{d}\omega}$ eines Schwarzen Körpers her. Betrachten Sie dazu Photonen in einem Kastenpotential.

b) Wie ist die Dichtematrix W eines quantenmechanischen Viel-Teilchen-Systems definiert? Warum ist in allgemeinen Systemen die Einführung der Dichtematrix sinnvoll?

c) Drücken Sie den Erwartungswert eines Operators A mit Hilfe der Dichtematrix W aus.

d) Geben Sie die Dichtematrix eines Systems, das kanonisch behandelt werden kann, im thermischen Gleichgewicht an.

e) Leiten Sie die von Neumann-Gleichung für die Zeitentwicklung der Dichtematrix W aus der Schrödinger-Gleichung für einen Zustand $|\psi\rangle$ her.

11.1 Der Quanten-Otto-Motor **20 Punkte + 10 Bonuspunkte**

Der Weihnachtsmann ist nur an einem Tag im Jahr mit dem Geschenkeverteilen beschäftigt, den Rest des Jahres befasst er sich leidenschaftlich mit Quantenphysik. Um seine Rentiere zu entlasten, hat er im vergangenen Jahr an einem neuen Motor getüftelt. Um seiner Liebe zu exakt lösbaren Quantensystemen Audruck zu verleihen, ist das Arbeitsmedium seines Motors ein Ensemble von N unterscheidbaren dreidimensionalen harmonischen Oszillatoren. Jeder harmonische Oszillator gehorcht brav einem Potential $\mathcal{V}(\boldsymbol{x})$ und hat das Energiespektrum $E(n)$:

$$\mathcal{V}(x) = \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right) \qquad E(n) = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right), \tag{1}$$

wobei die Teilchen im Potential die Masse m haben und der Parameter ω das Volumen V_1 innerhalb eines Oszillatorpotentials kontrolliert. Wenn das Oszillatorpotential steiler wird, wird das Volumen eines Oszillators komprimiert; wenn das Potential flacher wird, wird das Volumen expandiert. Er definiert also die Längenskala eines Potentials als $V_1^{1/3} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Das Gesamtvolumen des Ensembles ist dann $V = NV_1$.
In Hausaufgabe 7.2 hat er gelernt, dass für die innere Energie U und die freie Energie F eines solchen Ensembles gilt:

$$U = \frac{3N\hbar\omega}{2}\left[\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right], \qquad F = \frac{3N\hbar\omega}{2} + \frac{3N}{\beta}\ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega}\right) \tag{2}$$

Die einzelnen Arbeitsschritte seines Quanten-Otto-Motors sind

- $(1 \to 2)$ *Adiabatische Kompression*: Das Volumen der Potentiale wird adiabatisch verkleinert, d.h. es findet kein Austausch von Wärme mit dem Reservoir statt.
- $(2 \to 3)$ *Isochore Erwärmung*: Das Ensemble wird an das heiße Wärmereservoir gekoppelt, das Volumen im harmonischen Potential bleibt konstant.
- $(3 \to 4)$ *Adiabatische Expansion*: Das Volumen wird adiabatisch vergrößert, wiederum wird keine Wärme ausgetauscht.
- $(4 \to 1)$ *Isochore Abkühlung*: Das Ensemble wird an das kalte Wärmereservoir gekoppelt, das Fallenvolumen bleibt konstant.

Um herauszufinden, wie effizient sein neuer Motor tatsächlich ist, bittet er Sie darum, den Wirkungsgrad η auszurechnen.

a) (7P) Zeigen Sie zunächst, dass folgende Zustandsgleichung gilt

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{\hbar^2}{mV^{\frac{5}{3}}}\coth\left(\frac{\hbar^2\beta}{2mV^{\frac{2}{3}}}\right) \tag{3}$$

b) (8P) Zeigen Sie dann, dass die übertragenen Wärmemengen bei den isochoren Zustandsänderungen gegeben sind durch

$$\Delta Q_{23} = 3N\hbar\omega\left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT_3}\right) - \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT_2}\right)\right] \tag{4}$$

$$\Delta Q_{41} = 3N\hbar\omega\left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT_1}\right) - \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT_4}\right)\right] \tag{5}$$

c) (5P) Zeigen Sie schließlich, dass der Wirkungsgrad des Quanten-Otto-Motors geschrieben werden kann als

$$\eta = 1 - \left(\frac{V_4}{V_2}\right)^{\frac{5}{3}} \left(\frac{p_4 - p_1}{p_3 - p_2}\right) \tag{6}$$

d) Bonusaufgabe: (10P) Berechnen Sie die verrichtete Arbeit ΔW_{12} und ΔW_{34} bei den adiabatischen Zustandsänderungen.
Hinweis: Bedenken Sie, dass $U = U(V, T(V))$, da die Temperatur nicht konstant ist.

Der Weihnachtsmann ist unendlich dankbar und wird Sie sicherlich reich beschenken.

11.2 Thermisches Photonengas **20 Punkte**

Wir betrachten ein thermisches Photonengas mit der Energie-Impuls-Beziehung $E = |p|c$. Die Zustandsdichte für ein solches Gas ist gegeben durch[1]

$$\rho(E) = \frac{VE^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \ . \tag{7}$$

a) (5P) Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme sowie das großkanonische Potential des Photonengases. Was gilt dabei für μ?
Sie sollten folgendes Ergebnis erhalten:

$$\Omega = -\frac{\pi^2 k_B^4}{45\hbar^3 c^3} V T^4 \ . \tag{8}$$

Hinweis: $\int_0^\infty \mathrm{d}x \ x^2 \ln\left(1 - e^{-x}\right) = -\frac{\pi^4}{45}$

b) (4P) Berechnen Sie nun die mittlere Photonenzahl N.
Sie sollten folgendes Ergebnis erhalten:

$$N = 0.244 \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 V \ . \tag{9}$$

Hinweis: $\frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \mathrm{d}x \ \frac{x^2}{e^x - 1} \approx 0.244$

c) (3P) Berechnen Sie aus dem großkanonischen Potential die Entropie S sowie die innere Energie E. Die Temperaturabhängigkeit der inneren Energie des Photonengases heißt *Stefan-Boltzmann-Gesetz.*
Hinweis: Vergleichen Sie die freie Energie mit dem großkanonischen Potential.

d) (4P) Verwenden Sie geeignete thermodynamische Ableitungen, um die thermische Zustandsgleichung zu berechnen. Bestimmen Sie hierzu den Druck p, auch Strahlungsdruck genannt, bei der Temperatur T. Hängt der Druck vom Volumen V ab? Interpretieren Sie das Ergebnis physikalisch.

e) (4P) Betrachten Sie nun abschließend die Adiabatengleichung. Hierzu schauen wir uns Zustandsänderungen an, bei denen sich das Volumen ohne Wärmeaustausch (quasistatisch) ändert, d. h. $\mathrm{d}S = 0$. Was gilt hierbei für die Änderung der Photonenzahl N?
Stellen Sie hiermit die Zusammenhänge $T(V)$ sowie $p(V)$ für die adiabatische Zustandsänderung her. Eine adiabatische Ausdehnung erfolgte z.B. bei der Expansion des frühen Universums, seit das Photonengas von der Wechselwirkung mit Materie abgekoppelt war.
Hinweis: Vergleichen Sie (b) und (c).

[1] In der Zustandsdichte wurde bereits ein Faktor 2 für den Polarisationsfreiheitsgrad berücksichtigt.

11.3 Landau Diamagnetismus — 30 Bonuspunkte

Wir wollen hier ein Elektronengas in einer Box mit Volumen $V = L_x L_y L_z$ in einem konstanten Magnetfeld betrachten. Wie Sie in der Quantenmechanik Vorlesung gelernt haben, kann ein Magnetfeld mithilfe der sog. *minimalen Kopplung* an ein quantenmechanisches System gekoppelt werden. Hierbei wird der Impulsoperator durch $\hat{\boldsymbol{p}}_i \to \hat{\boldsymbol{p}}_i - q\boldsymbol{A}(x_i)$ ersetzt. $\boldsymbol{A}(x_i)$ ist dabei das Vektorpotential des elektromagnetischen Feldes. Der Hamiltonoperator eines einzelnen Elektrons kann dann geschrieben werden als

$$H_i = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}_i - q\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{x}}_i)/c\right)^2 . \tag{10}$$

Wir ignorieren den Beitrag der Kopplung des Spins an das Magnetfeld, da dieser separat betrachtet werden kann (Pauli-Paramagnetismus), betrachten also nur die Kopplung des Magnetfelds an die quantisierten Bahndrehimpulse.
Das Magnetfeld sei homogen und in z-Richtung ausgerichtet, sodass es durch ein Vektorpotential $\boldsymbol{A} = -B_0 y \boldsymbol{e}_x$ beschrieben werden kann.

a) (6P) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator eines einzelnen Elektrons in den freien Impuls entlang des Magnetfelds und einen harmonischen Oszillator umgeformt werden kann:

$$H_i = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \hbar\omega_c(\hat{n} + 1/2) \quad \text{mit} \quad \omega_c = qB/mc \tag{11}$$

Berechnen Sie auch den Entartungsgrad der Oszillatorzustände[2] für konstantes p_z.
<u>*Hinweis:*</u> Machen Sie sich klar, was die Eigenfunktionen in z und x Richtung sind und benutzen Sie deren Eigenwertgleichungen. Was ist die obere Grenze für p_x?

Hiermit können wir die Zustandsdichte des Oszillator-Teils schreiben als

$$\rho_{osc}(\epsilon) = L_x L_y \frac{qB_0}{2\pi\hbar c} \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left(\epsilon - \hbar\omega_c(n + 1/2)\right) . \tag{12}$$

Die Zustandsdichte des gesamten Systems folgt dann als Faltung der 1D Zustandsdichte in z-Richtung mit der Oszillator Zustandsdichte $\rho(\epsilon) = \int d\omega \rho_{1d}(\omega)\rho_{osc}(\epsilon - \omega)$. Also finden wir mit einem Faktor 2 für den Spinfreiheitsgrad

$$\rho(\epsilon) = 2V \frac{\sqrt{2m} qB_0}{(2\pi\hbar)^2 c} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Theta\left(\epsilon - \hbar\omega_c(n + 1/2)\right)}{\sqrt{\epsilon - \hbar\omega_c(n + 1/2)}} . \tag{13}$$

b) (3P) Leiten Sie Gleichung (13) her, indem Sie die Faltung durchführen.

c) (6P) Zeigen Sie damit, dass das Großkanonische Potential durch folgenden Ausdruck gegeben ist:

$$\Phi(T, V, \mu, B) = -2V k_B T \frac{\sqrt{2m} qB_0}{(2\pi\hbar)^2 c} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon}} \ln\left(1 + e^{\beta(\mu - \hbar\omega_c(n+1/2) - \epsilon)}\right) \tag{14}$$

[2] Damit ist gemeint, dass sich die Entartung alleine auf die Oszillatorzustände bezieht, und nicht auf eventuelle Beiträge von p_z.

Die Landau-Niveaus n haben interessante Eigenschaften, wenn man diese in großen Magnetfeldern $\hbar\omega_c \gg k_B T$ isolieren kann. In diesem Grenzfall erhält man eine Vielzahl an beeindruckenden Effekten, z.B. den Quanten-Hall-Effekt. Wir wollen hier der Einfachheit halber den anderen Grenzfall, also den kleiner Magnetfelder betrachten. In diesem Fall variieren die Terme in der Summe über die Oszillator Niveaus n in Gleichung (14) nur langsam und wir können, wie im Falle der Rotationsfreiheitsgrade bei Molekülen, die Summe mithilfe der Euler-Maclaurin-Formel entwickeln.

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) \approx \int_0^{\infty} f(n)\mathrm{d}n + \frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) \tag{15}$$

Eine der wichtigsten Größen, die wir mithilfe der statistischen Physik in magnetischen Systemen erhalten können, ist die Suszeptibilität. Diese wollen wir nun bei verschwindendem Magnetfeld berechnen. Dabei müssen wir nur Terme der Ordnung B^2 betrachten, da

$$\chi_{T,V,\mu}|_{B=0} = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_{T,V,\mu}|_{B=0} = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial B^2}\right)_{T,V,\mu}|_{B=0}\,. \tag{16}$$

Wir wollen im weiteren versuchen jede direkte Auswertung der Integrale zu umgehen. Hierfür ist es Sinnvoll, sich einige Größen zu definieren:

$$\mu(B) = \mu - \hbar\omega_c/2 \quad \& \quad F(x) = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega}} \ln\left(1 + e^{\beta(x-\omega)}\right) \tag{17}$$

d) (6P) Zeigen Sie mithilfe der Euler-Maclaurin-Formel, dass

$$\Phi(T,V,\mu,B) \approx -\frac{V k_B T m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\left[\int_{-\infty}^{\mu(B)} F(\epsilon)d\epsilon + \frac{1}{2}\hbar\omega_c F(\mu(B)) + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{12}F'(\mu(B))\right]. \tag{18}$$

e) (6P) Entwickeln Sie dies bis zur quadratischen Ordnung in B_0, um folgenden Ausdruck zu erhalten:

$$\Phi(T,V,\mu,B) \approx -\frac{V k_B T m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\left[\int_{-\infty}^{\mu} F(\epsilon)d\epsilon - \frac{(\hbar\omega_c)^2}{24}F'(\mu)\right]. \tag{19}$$

Die Terme unabhängig von B_0 müssen im Limes $B_0 \to 0$ das Ergebnis des freien Elektronengases reproduzieren. Demnach können wir das Ergebnis wie folgt umschreiben:

$$\Phi(T,V,\mu,B) \approx \left[1 - \frac{(\hbar\omega_c)^2}{24}\frac{\partial^2}{\partial\mu^2}\right]\Phi(T,V,\mu,B=0) \tag{20}$$

f) (3P) Zeigen Sie, dass die Suszeptibilität proportional zur Ableitung der Teilchendichte nach dem chemischen Potential ist (vgl. (21)) und bestimmen Sie das Vorzeichen von χ. Wie ist das Vorzeichen im paramagnetischen Fall? Interpretieren Sie Ihr Ergebnis physikalisch.

$$\chi = -\frac{q^2\hbar^2}{12m^2c^2}\frac{\partial n}{\partial\mu} \tag{21}$$