Anwesenheitsübungen VIII

9. Dezember bis 11. Dezember

A8.1 *Grundzüge der statistischen Physik, Bose/Einstein–Kondensation*

In einem Kasten $B = \{\vec{r} \in \mathbb{R}^3 \big| 0 \leq x_k \leq L\}$ mit Kantenlänge L und Volumen $V = L^3$ eingesperrte Teilchen mit Spin S besitzen die Wellenfunktionen ($\chi^{(\sigma)}$ ein Spinor):

$$\psi^{(\sigma)}_{\vec{n}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\chi^{(\sigma)}, \quad \vec{p} = \vec{n}\frac{2\pi\hbar}{L},\ \vec{n} \in \mathbb{Z}^3,\ \sigma = -S, \dots, S.$$

Die $\psi^{(\sigma)}_{\vec{n}}$ sind periodisch: $\psi^{(\sigma)}_{\vec{n}}(L\vec{n}) = \psi^{(\sigma)}_{\vec{n}}(0)$ und bilden in B eine Orthonormalbasis: $\int_V \mathrm{d}^3r(\psi^{(\sigma)}_{\vec{n}}(\vec{r}))^*\psi^{(\sigma')}_{\vec{n}'}(\vec{r}) = \delta_{\vec{n}\vec{n}'}\delta_{\sigma\sigma'}$. Die $N-$Teilchenzustände lauten in 2. Quantisierung $\frac{1}{\sqrt{N!}}(\prod_{i=1}^N a^+_{\vec{n}_i,\sigma_i})|0\rangle$. Teilchenzahl- und Energieoperator sind $N = \sum_{\vec{n},\sigma} a^+_{\vec{n},\sigma}a_{\vec{n},\sigma}$ und $H = \sum_{\vec{n},\sigma}\varepsilon(\vec{n})a^+_{\vec{n},\sigma}a_{\vec{n},\sigma}$. Der *statistische Operator* ϱ (oder *Dichteoperator*) lautet

$$\varrho = \frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta(H-\mu N)}, \quad Z = \mathrm{Spur}\ \mathrm{e}^{-\beta(H-\mu N)} \quad (\Rightarrow \mathrm{Spur}\ \varrho = 1).$$

Z heißt *Zustandssumme*, μ *chemisches Potential* und mit der *Temperatur* T und der *Boltzmannkonstanten* k gilt $\beta = \frac{1}{kT}$. Die beiden "Lagrangemultiplikatoren" μ und β stellen die Teilchenzahl bzw. die Energie ein. So ist μ die Energie, die es kostet (bringt), dem System ein Teilchen hinzuzufügen. Allgemein wird jede thermodynamische Größe durch den Erwartungswert $\langle\mathcal{O}\rangle := \mathrm{Spur}(\mathcal{O}\varrho)$ eines Operators $\mathcal{O}$ dargestellt.
Nach H7.2 gilt: $Z = \prod_{\vec{n}}(1\pm\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon(\vec{n})-\mu)})^{\pm g}$, $g = 2S+1$ und $\langle n_{\vec{n},\sigma}\rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon(\vec{n})-\mu)}\pm 1}$ für die mittlere Besetzung des Zustands $(\vec{n},\sigma)$, wobei "+" für Fermionen steht. Wir definieren damit die mittlere Teilchenzahl $\overline{N} = \sum_{\vec{n},\sigma}\langle n_{\vec{n},\sigma}\rangle$ und Energie $\overline{E} = \sum_{\vec{n},\sigma}\varepsilon(\vec{n})\langle n_{\vec{n},\sigma}\rangle$.

(1) Warum gilt $\mu \leq 0$ für Bosonen? Ist μ im fermionischen Fall auch eingeschränkt?

(2) Begründe die Ersetzung $\sum_{\vec{n},\sigma} \to g\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}^3p$ im Kontinuumslimes $V \to \infty$. Zeige, daß die Grenzwerte für $V \to \infty$ von $\frac{\overline{E}}{V}$, $\frac{\overline{N}}{V}$ und $\frac{\ln Z}{V}$ existieren und berechne sie für $\varepsilon(\vec{p}) = \frac{1}{2m}\vec{p}^2$. Verwende dabei die Fermi- bzw. Bosefunktionen

$$\left\{\begin{matrix} f_\nu(z) \\ g_\nu(z) \end{matrix}\right\} = \frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x\, x^{\nu-1}}{\frac{1}{z}\mathrm{e}^x \pm 1}.$$

Welche berühmte Funktion von $n \in \mathbb{N}$ aus der Zahlentheorie ist $g_n(z=1)$?

(3) Zeige $\overline{E} = \frac{3}{2\beta}\ln Z$ und berechne den klassischen Limes, der so definiert ist, daß die *Fugazität* $z := \mathrm{e}^{\mu/kT} \ll 1$ ist. Formuliere diese Bedingung um in $\lambda^3 \ll \frac{V}{\overline{N}}$ mit der *thermischen Wellenlänge* $\lambda = \hbar\sqrt{2\pi\beta/m}$ und interpretiere diese.

(4) Begründe, daß für das *großkanonische Potential* $\Phi := -\beta^{-1}\ln Z$ gilt: $\Phi = -pV$. Dabei ist $p := -\frac{\partial\overline{E}}{\partial V}$ der Druck. Zeige dazu $p = \frac{2\overline{E}}{3V}$, $V \to \infty$ noch nicht ausgeführt.

(5) Im fermionischen Fall sind bei $T = 0$ die untersten Energieniveaus jeweils einfach besetzt. Der maximal auftretende Impuls heißt *Fermiimpuls* $\vec{p}_F$, die Energie $\frac{|\vec{p}_F|^2}{2m}$ *Fermienergie* E_F. Zeige $\overline{N} = \frac{gV|\vec{p}_F|^3}{6\pi^2\hbar^3}$ und folgere $\overline{E} = \frac{3}{5}E_F\overline{N}$. Zeige $\mu = E_F$.

Als wichtige Anwendung der oben betrachteten allgemeinen Zusammenhänge betrachten wir ein nichtrelativistisches Bosegas mit Spin 0 für kleine Temperaturen T.

(6) Warum ist die Fugazität durch $z \leq 1$ beschränkt? Zeige $\frac{\lambda^3 \overline{N}}{V} = g_{3/2}(z)$.

(7) Zeige, daß $z = 1$ wird bei einer kritischen Temperatur T_c, definiert durch

$$kT_c = \frac{2\pi\hbar^2 \overline{N}^{2/3}}{m(g_{3/2}(1)V)^{2/3}}.$$

(8) Zeige durch besondere Betrachtung des Grundzustands, daß

$$\overline{N} = N_0 + N' = \frac{1}{\frac{1}{z} - 1} + \overline{N}\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)}.$$

(9) Folgere, daß für $T < T_c$ der Grundzustand *makroskopisch* besetzt ist, d.h.

$$\lim_{\overline{N}\to\infty,\ \frac{\overline{N}}{V}\ \text{fest}} \frac{N_0}{\overline{N}} \begin{cases} = 0 & T > T_c \\ > 0 & T < T_c \end{cases} \qquad (\text{“thermodynamischer Limes”}).$$

Zeige auch, daß die anderen Zustände nie makroskopisch besetzt sein können.

(10) Warum ist diese Kondensation nur für Raumdimensionen $d \geq 3$ möglich?

Dieser Effekt wurde 1924 von A. Einstein aufgrund statistischer Betrachtungen S. Boses vorhergesagt und erst 1995 experimentell an Alkaliatomen (meist Rubidium) in einer Quadrupolfalle bei $T = 0.17\mu K$ beobachtet, 1998 auch an atomarem Wasserstoff.

Hausaufgaben VIII

Abgabe vom 16. Dezember bis 18. Dezember in den Übungen

H8.1 *Bardeen/Cooper/Schrieffer–Theorie*

Diese Theorie (Nobelpreis 1972) erklärt die Supraleitung 1. Art durch sog. Cooperpaare, d.h. korrelierte Elektronenpaare mit Spin 0, für die der elektrische Widerstand verschwindet. Das Modell betrachtet Zweielektronanregungen $|\Phi\rangle$ des Vakuums $|0\rangle$. Der Hamiltonoperator eines Vielelektronensystems in einem Festkörper lautet

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon(\vec{k}) a^+_{\vec{k},\sigma} a_{\vec{k},\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{w},\sigma,\sigma'} v_{\vec{k},\vec{k}',\vec{w}}\ a^+_{\vec{k}+\vec{w},\sigma} a^+_{\vec{k}',\sigma'} a_{\vec{k}'+\vec{w},\sigma'} a_{\vec{k},\sigma}.$$

Dabei sind $\vec{k}, \vec{k}'$ Elektronenimpulse, σ, σ' ihre Spineinstellungen und $\vec{w}$ Phononenimpulse, das sind die zu den Gitterschwingungen korrespondierenden Quasiteilchen. $v_{\vec{k},\vec{k}',\vec{w}}$ gibt die durch die Wechselwirkung der Elektronen mit den Phononen induzierte Elektronen–Wechselwirkung an, d.h. ein Elektron mit Impuls $\vec{k}' + \vec{w}$ gibt den Impuls $\vec{w}$ an das Gitter ab, welcher von einem Elektron mit Impuls $\vec{k}$ aufgenommen wird. Der Spin bleibt dabei unverändert. Mit (reellen) Koeffizienten $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$, die schließlich unter Beachtung der Normierung $u^2_{\vec{k}} + v^2_{\vec{k}} = 1$ so bestimmt werden, daß der Energieerwartungswert von $|\Phi\rangle$ minimal wird, lautet der BCS–Ansatz für $|\Phi\rangle$:

$$|\Phi\rangle = \prod_{\vec{k}} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} a^+_{\vec{k},\uparrow} a^+_{-\vec{k},\downarrow})|0\rangle.$$

(1) Zeige $\langle\Phi|N|\Phi\rangle = 2\sum_{\vec{k}} v^2_{\vec{k}}$ für den Erwartungswert des Teilchenzahloperators. Da wir eine bestimmte Teilchenzahl haben wollen, muß N mit einem Lagrangemultiplikator, dem chemischen Potential μ, zu H addiert werden, also $H' = H - \mu N$.

(2) Zeige mit $V_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{v_{\vec{k},-\vec{k}',\vec{k}'-\vec{k}}+v_{-\vec{k},\vec{k}',\vec{k}-\vec{k}'}}{2}$, daß

$$E_0 := \langle\Phi|H'|\Phi\rangle = 2\sum_{\vec{k}}(\varepsilon(\vec{k})-\mu)v_{\vec{k}}^2 - \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}u_{\vec{k}'}v_{\vec{k}'}.$$

(3) Zeige: mit dem *Gap* $\Delta_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'}u_{\vec{k}'}v_{\vec{k}'}$ lautet die Minimalbedingung für (2):

$$\left\{\begin{matrix} u_{\vec{k}}^2 \\ v_{\vec{k}}^2 \end{matrix}\right\} = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\varepsilon(\vec{k})-\mu}{\sqrt{(\varepsilon(\vec{k})-\mu)^2+\Delta_{\vec{k}}^2}}\right).$$

Um diesen Gap besser zu verstehen, betrachten wir die Quasiteilchen dieses Systems.

(4) Zeige, daß der Ansatz $|\Phi\rangle$ für den Grundzustand jeweils vernichtet wird von:

$$A(\vec{k}) = u_{\vec{k}}a_{\vec{k},\uparrow} - v_{\vec{k}}a^+_{-\vec{k},\downarrow}, \quad B(\vec{k}) = u_{\vec{k}}a_{-\vec{k},\downarrow} + v_{\vec{k}}a^+_{\vec{k},\uparrow}$$

(5) Zeige, daß die einzigen nichtverschwindenden Antikommutatoren der so konstruierten Operatoren lauten: $\{A(\vec{k}), A^+(\vec{k}')\} = \{B(\vec{k}), B^+(\vec{k}')\} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$.

(6) Zeige, daß $H' - E_0\mathbb{1}$ diagonal in den Ein–Quasiteilchenzuständen $A^+(\vec{k})|\Phi\rangle$ und $B^+(\vec{k})|\Phi\rangle$ ist und die Quasiteilchenenergie $E(\vec{k}) = \sqrt{(\varepsilon(\vec{k})-\mu)^2+\Delta_{\vec{k}}^2}$ liefert:

$$\langle\Phi|A(\vec{k})(H'-E_0\mathbb{1})A^+(\vec{k}')|\Phi\rangle = \langle\Phi|B(\vec{k})(H'-E_0\mathbb{1})B^+(\vec{k}')|\Phi\rangle = E(\vec{k})\delta_{\vec{k}\vec{k}'},$$

d.h. die Quasiteilchen haben selbst für $\vec{k}$ an der Fermikante (was einem freien Teilchen ohne Impuls entspricht) noch eine nichtverschwindende Energie $\Delta_{\vec{k}}$.

Aber nun zurück zur Bestimmung von $\Delta_{\vec{k}}$, wofür wir ein einfaches Modell annehmen.

(7) Zeige, daß (3) zu $\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}'}\frac{V_{\vec{k}\vec{k}'}\Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{(\varepsilon(\vec{k}')-\mu)^2+\Delta_{\vec{k}'}^2}}$ äquivalent ist.

(8) Setze an: $V_{\vec{k}\vec{k}'} = V_0$ für $|\varepsilon(\vec{k})-\mu| < \hbar\omega$ und $|\varepsilon(\vec{k}')-\mu| < \hbar\omega$, in allen anderen Fällen Null, d.h. die Wechselwirkung findet nur in der Nähe der Oberfläche der Fermikugel (Radius=E_F=μ) statt. Folgere $\sum_{\vec{k}}\frac{1}{2\sqrt{(\varepsilon(\vec{k})-\mu)^2+\Delta^2}} = \frac{1}{V_0}$, wobei Δ der nun von $\vec{k}$ unabhängige Wert von $\Delta_{\vec{k}}$ für $|\varepsilon(\vec{k})-\mu| < \hbar\omega$ ist, sonst ist $\Delta_{\vec{k}} = 0$.

(9) Ersetze in (8) die Summe durch ein Integral. Setze dazu mit der Zustandsdichte $D(E-\mu)$ an: $\mathrm{d}^3k = \frac{(2\pi)^3}{V}D(E-\mu)\mathrm{d}(E-\mu)$. Nimm dabei an, daß $\hbar\omega \ll \mu$, d.h. $D(E-\mu) \approx D(0)$ und folgere $\Delta = \frac{\hbar\omega}{\sinh(\frac{1}{D(0)V_0})} \approx 2\hbar\omega \mathrm{e}^{-1/D(0)V_0}$ für $D(0)V_0 \ll 1$.

(10) Begründe, daß die Elektronen–Wechselwirkung die Energie um $\frac{1}{2}D(0)\Delta^2$ gegenüber der einer gefüllten Fermikugel absenkt (es sei $\Delta \ll \hbar\omega$).

(24 Punkte)

H8.2 *Squeezed States*

(1) Zeige durch Ableiten nach α, daß $(\mathrm{e}^{\alpha x\frac{\partial}{\partial x}}f)(x) = f(\mathrm{e}^{\alpha}x)$ für $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$.

(2) Betrachte für einen eindimensionalen harmonischen Oszillator den normierten Zustand $|\psi_\alpha\rangle = C_\alpha \mathrm{e}^{\frac{\alpha}{2}((a^+)^2-a^2-1)}|\varphi\rangle$, wobei $\varphi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Verwende (1) und die explizite Darstellung von a und a^+ im Ortsraum, um $\psi_\alpha(x)$ durch $\varphi(x')$ auszudrücken, genauer, finde den Zusammenhang $x'(x)$. Warum heißt $|\psi_\alpha\rangle$ "gequetscht"?

(3) Zeige, daß $S := \mathrm{e}^{z(a^+)^2-z^*a^2}$ für $z \in \mathbb{C}$ unitär ist. Was gilt daher für C_α?

(6 Punkte)