

Statistische Physik

Blatt 11

Wintersemester 2023/24

Abgabe: Montag, **08.01.2024**, 10:00 Uhr

Besprechung: Dienstag, 09.01.2024

Webseite: <https://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2023-StatPhys.shtml>

Aufgabe 37: BEC in Atomfallen (6 + 5 Punkte)

Bei den ersten experimentellen Nachweisen eines Bose-Einstein-Kondensats durch Cornell und Wieman am NIST Labor in Boulder sowie Ketterle am MIT (beides 1995 und Nobelpreis 2001) wurden Alkali-Atome in optischen Fallen abgekühlt. Diese Fallen erzeugen ein i.A. asymmetrisches Oszillatorpotential

$$V(x, y, z) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (1)$$

Die Einteilchen-Energien sind dann durch

$$E_{\vec{n}} = E_{\{n_x, n_y, n_z\}} = \hbar \left[\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} + \right) + \omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} + \right) + \omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} + \right) \right] \quad (2)$$

gegeben, wobei $n_i \in \mathbb{N}$. Die Grundzustandsenergie ist $E_0 = \frac{\hbar}{2} (\omega_x + \omega_y + \omega_z)$.

- Betrachten Sie den im Bose-Einstein-Kondensat makroskopisch besetzten Zustand. Welche Wellenfunktion hat dieser in Orts- und Impulsdarstellung? Welches Volumen \mathcal{V} nimmt das Kondensat in diesem Zustand ein? Worin besteht der qualitative Unterschied zu der Wellenfunktion des uniformen Bose-Gases?
- Wir betrachten jetzt N Bosonen im Potential $V(x, y, z)$. Zeigen Sie, dass

$$N = \frac{\tilde{z}}{1 - \tilde{z}} + \sum_j \tilde{z}^j \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} e^{-j\beta \tilde{E}_{\vec{n}}} \quad (3)$$

gilt, wobei die Grundzustandsenergie E_0 mit in die Fugazität gezogen wurde, also $\tilde{z} = ze^{-\beta E_0}$ und $\tilde{E}_{\vec{n}} = E_{\vec{n}} - E_0$. Der zweite Summand beschreibt die Anzahl der Teilchen in angeregten Zuständen. Werten Sie die Summe durch Übergang zum Integral,

$$\sum_{n_x, n_y, n_z} \rightarrow \int_0^\infty dn_x \int_0^\infty dn_y \int_0^\infty dn_z \quad (4)$$

aus, um $N - N_0$ als Funktion der Temperatur zu finden. Gehen Sie anschließend analog zu Aufgabe 26c) und d) vor, um zu zeigen, dass $\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3$ gilt. Berechnen Sie die kritische Temperatur T_c . Begünstigt oder erschwert ein äußeres Potential das Auftreten von Bose-Einstein-Kondensation? *Hinweise:* Benutzen Sie die abkürzende Schreibweise $g_3(x) = \sum_{j=1}^\infty \frac{x^j}{j^3}$. In Experimenten gilt für die Teilchendichte üblicherweise $\frac{N}{\mathcal{V}} \ll 1$.

- c) **Zusatzaufgabe:** Kondensiert das Bose-Gas in beliebigen Dimensionen? Betrachten Sie zunächst das *uniforme* Bose-Gas aus Aufgabe 26. Zeigen Sie analog zur Herleitung von Gl. 1 in A.26, dass die Anzahl der Bosonen in angeregten Zuständen in d Dimensionen durch

$$N - N_0 = V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} g_{d/2}(z), \quad (5)$$

gegeben ist, wobei

$$g_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^\nu}. \quad (6)$$

Begründen Sie, warum das uniforme Bose-Gas für $d = 2$ *nicht* bei endlichen Temperaturen kondensiert. *Hinweise:* Benutzen Sie den Zusammenhang $\Gamma(\frac{d}{2})\Omega_d = 2\pi^{d/2}$ zwischen dem d -dimensionalen Raumwinkel Ω_d und der Γ -Funktion. In Aufgabe 24a) haben Sie gezeigt, dass für die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ des uniformen Bose-Gases in d Dimensionen gilt

$$D(\epsilon) = \frac{V}{\Omega_d} 2 \left(\frac{m}{2\pi^2\hbar^2} \right)^{\frac{d}{2}} \epsilon^{\frac{d}{2}-1}. \quad (7)$$

Für $z = 1$ wird $g_\nu(z)$ zur Riemannschen ζ -Funktion $\zeta(\nu)$. Für welche ν ist $\zeta(\nu)$ endlich?

- d) **Zusatzaufgabe:** Zeigen Sie, dass das Bose-Gas in der harmonischen Falle auch für $d = 2$ bei einer Temperatur $T_c > 0$ kondensiert. *Hinweis:* Wiederholen Sie die Auswertung der Integrale in b) für $d = 2$ und identifizieren Sie in Ihrem Ergebnis $g_\nu(\tilde{z})$.

Aufgabe 38: Zweiatomiges Molekül (8 + 4 Punkte)

Wir betrachten ein ideales Gas aus zweiatomigen, hantelförmigen Molekülen. Ein solches Molekül besitzt Translations-, Vibrations-, und Rotationsfreiheitsgrade. Jeder dieser Freiheitsgrade trägt zur spezifischen Wärme $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$ bei. Insgesamt ergibt sich der in Abbildung 1 skizzierte Verlauf der Wärmekapazität $c_V = \frac{C_V}{N}$ als Funktion der Temperatur T . Ziel dieser Aufgabe ist es, diesen charakteristischen Verlauf mit seinen Sprüngen und Plateaus zu verstehen.

- a) Der Beitrag der Translationsbewegung, C_V^{tr} , kann für alle hier relevanten Temperaturen klassisch behandelt werden. Bestimmen Sie C_V^{tr} aus dem Gleichverteilungssatz.
- b) Die möglichen Energien der Vibrationszustände sind

$$E_n^{\text{vib}} = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (8)$$

wobei sich ω_0 aus der harmonischen Näherung des Morsepotentials der Molekülbindung ergibt. Bestimmen Sie zunächst aus der kanonischen Zustandssumme Z_{vib} den Beitrag der Vibrationsfreiheitsgrade zur spezifischen Wärme C_V^{vib} . Wir definieren jetzt eine für die Vibration charakteristische Temperatur über die Relation $k_B T_{\text{vib}} = \hbar\omega_0$. Erläutern Sie kurz die Bedeutung von T_{vib} . Diskutieren Sie die Grenzfälle hoher ($T \gg T_{\text{vib}}$) und tiefer Temperaturen ($T \ll T_{\text{vib}}$). *Hinweis:* Sie können Teile der Rechnung aus Aufgabe 17 übernehmen. Finden Sie Näherungen für $[\sinh(x)]^{-2}$ um das Hoch- und Tieftemperaturverhalten von C_V auszuwerten. Für große T ist die Laurent-Reihe von $[\sinh(x)]^{-2}$ um $x = 0$ nützlich.

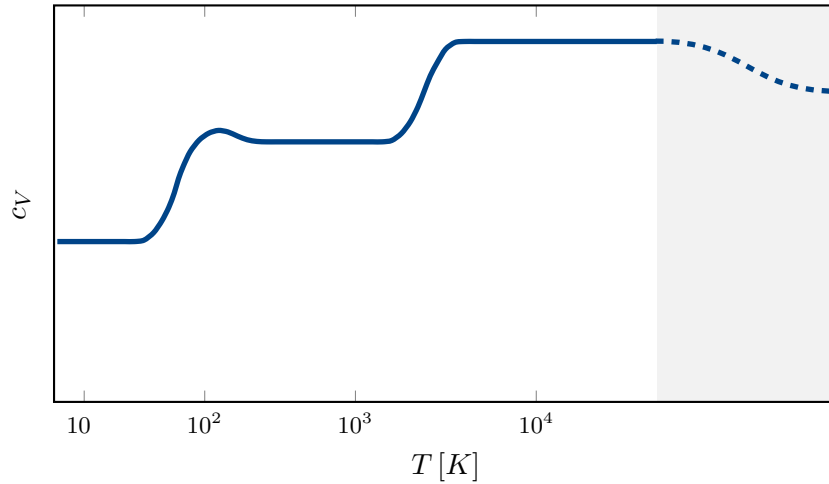


Abbildung 1 – Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme $c_V = \frac{C_V}{N}$ für ein Gas aus zweiatomigen Molekülen. In dieser Aufgabe soll der charakteristische Verlauf hergeleitet werden.

- c) Die möglichen Energien der Rotationszustände sind

$$E_\ell^{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad (9)$$

wobei I das Trägheitsmoment ist. Der Entartungsgrad der Energie E_ℓ^{rot} ist $2\ell + 1$. Bestimmen Sie zunächst die Zustandssumme Z_{rot} . Nutzen Sie aus, dass diese faktorisiert, $Z_{\text{rot}} = (z_{\text{rot}})^N$, wobei z_{rot} die Zustandssumme eines einzelnen Gasmoleküls ist. Auch der Rotationsbewegung ordnen wir eine charakteristische Temperatur über $k_B T_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{I}$ zu. Erläutern Sie die Bedeutung von T_{rot} . Werten Sie die Zustandssumme Z_{rot} für Temperaturen $T \ll T_{\text{rot}}$ aus, indem Sie nur die zwei Beiträge zu z_{rot} mit der niedrigsten Energie berücksichtigen. Berechnen Sie daraus den Rotationsbeitrag zur spezifische Wärme C_V^{rot} für tiefe Temperaturen. Approximieren Sie für hohe Temperaturen ($T \gg T_{\text{rot}}$) die Zustandssumme mit der Euler-Maclaurin-Formel,

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) \approx \int_0^{\infty} dx f(x) + \frac{1}{2} f(0) - \frac{1}{12} f'(0) + \frac{1}{720} f'''(0), \quad (10)$$

und geben Sie auch für $T \gg T_{\text{rot}}$ den Beitrag der Rotation zur spezifische Wärme an.

Hinweis: Schreiben Sie z_{rot} als Ableitung nach ℓ um Gl. (10) anwenden zu können. Es genügt, wenn Sie den ersten Summanden der rechten Seite von Gl. (10) berücksichtigen.

- d) **Zusatzaufgabe:** Verbessern Sie Ihre Hochtemperaturnäherung aus Teil c), indem Sie alle gegebenen Summanden der Euler-Maclaurin-Formel in Gl. (10) auswerten. Welche der in Abbildung 1 gezeigten Eigenschaften können Sie jetzt erklären?
- e) Für ein Gas aus Wasserstoffmolekülen ergeben sich die Temperaturen $T_{\text{vib}} \approx 6000$ K und $T_{\text{rot}} \approx 85$ K. Der Siedepunkt molekularen Wasserstoffs liegt bei $T_s \approx 20$ K. Beschriften Sie in Abbildung 1 die x - und y -Achse. Bei welchen Werten von c_V liegen die Plateaus? Was passiert in dem grau unterlegten Hochtemperaturbereich? Im Experiment beobachtet man für Wasserstoffmoleküle tatsächlich einen zu Abbildung 1 ähnlichen Verlauf. Was würde man für Kohlenmonoxid erwarten, mit $T_{\text{rot}} \approx 5.54$ K und $T_s \approx 80$ K?

Aufgabe 39: Maxwell-Relationen (6 Punkte)

- a) Zeigen Sie ausgehend von den Differentialen der Energie E und der freien Energie F die Maxwell-Relationen

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V, \quad (11)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T. \quad (12)$$

- b) Verifizieren Sie die beiden Maxwell-Relationen (11) und (12) explizit für das ideale Gas. *Hinweis:* Benutzen Sie die thermische Zustandsgleichung. Die Entropie des idealen Gases ist $S = \frac{3}{2}Nk_B \ln T + Nk_B \ln V + f(N)$. Um die Ableitung nach V bei fester Entropie zu berechnen ist die Adiabaten Gleichung $pV^{5/3} = \text{const}$ hilfreich.