Institut für Biologische Physik
J. Berg
U. Michel, S. Kleinbölting

**Wir wünschen ihnen schöne Feiertage
und einen guten Rutsch ins neue Jahr!**

1 Zustandsgleichung idealer Quantengase (40 P) Im Falle eines klassischen Gases kennen wir das ideale Gasgesetz $\frac{pV}{NT} = 1$. Wir untersuchen nun wie die Quantenkorrekturen für Bosonen und Fermionen dieses Gesetz verändern.

Die Größe $z \equiv e^{\beta\mu}$ nennt man *Fugazität*. Sie übernimmt die zentrale Rolle in der folgenden Analyse.

Schlussendlich sind wir am *thermodynamischen Limes* interessiert, also dem Grenzfall in dem wir $V, N \to \infty$ schicken, dabei aber die Dichte N/V konstant halten.

Wir dürfen daher annehmen, dass das Volumen des Systems so groß ist, dass wir Summen über Impulse durch entsprechende Integrale nähern dürfen:

$$\sum_{\mathbf{p}} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p.$$

Wir definieren außerdem die Familie von Funktionen (s. *Fermi-Integral*)

$$g_s(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{t^{s-1}}{1 + z^{-1}e^t} \,\mathrm{d}t$$

da Ausdrücke dieser Art für verschiedene Parameter s immer wieder in solchen Rechnungen vorkommen.

Wir betrachten Bosonen und Fermionen gleichzeitig. Die Ausdrücke unterscheiden sich lediglich durch einige Vorzeichen. Die Teilchen mögen Spin S haben. Die Energien mögen nicht von der Spin-Einstellung abhängen und sind durch $\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2m}$ gegeben.

Im kanonischen Ensemble hatten wir die freie Energie als $F(T, V, N) = -T \ln Z_{\text{kanonisch}}$ definiert und gezeigt (s. Blatt 9) wie sich thermodynamische Größen als Ableitungen bestimmen lassen. Für das großkanonische Ensemble führen wir analog das *großkanonische Potential*

$$J(T, V, z) = -T \ln Z_{\text{großkanonisch}}(T, V, z)$$

ein. In der Vorlesung wurde schon gezeigt, wie sich mittlere Energie und Teilchenzahl durch Ableitungen von $\ln Z$ nach T bzw. z bestimmen lassen: $N = z\partial_z \ln Z$ und $E = -\partial_\beta \ln Z$.

a) (8 P) Vollziehen Sie die Rechnungen nocheinmal für J nach (achten Sie auf den zusätzlichen Faktor T) und zeigen dass i.)

$$\partial_T J(T,V,z) = \frac{J}{T} - \frac{\langle H\rangle}{T}$$

ii.)

$$z\partial_z J(T,V,z) = T\partial_\mu J(T,V,\mu) = -T\,\langle N\rangle$$

iii.)

$$p \equiv \left\langle \frac{\partial H}{\partial V}\right\rangle = -\partial_V J(T,V,z)$$

Machen Sie sich die obigen Relationen im Kontext der thermodynamischen Potentiale bewusst, indem Sie vom Differential der Helmholtz freien Energie $\mathrm{d}F = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}N$ ausgehen und per Legendre-Transformation von N nach μ übergehen. Es sollte sich dann als neues Potential $J \equiv E - TS - \mu N$ ergeben.

N.B. Wie im Falle des kanonischen Ensembles können wir also gemäß i.) $-\partial_T J(T,V,z) = S(T,V,z)$ mit der Entropie identifizieren

b) (2 P) Zeigen Sie, dass das großkanonische Potential für nicht-wechselwirkende Fermionen bzw. Bosonen mit Einteilchen-Energien ϵ_r im Allgemeinen durch

$$J = \mp T\sum_r \ln\left(1 \pm ze^{-\beta\epsilon_r}\right)$$

berechnet werden kann. Die Summe erstreckt sich dabei über alle Einteilchen-Zustände (meistens Impulse und Spins). Das obere Vorzeichen gilt für Fermionen, das untere für Bosonen.

c) (8 P) Zur Berechnung einer Observablen hat man typischerweise Integrale über alle möglichen Impulse zu berechnen. Da die Observable und die Energien oft nur vom Betrag des Impulses abhängen, kann man gleichwertig auch über Energien integrieren[1]. Sei f also eine integrierbare Funktion die nur vom Betrag des Impulses abhängt, dann ist

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int f(\|\mathbf{p}\|)\mathrm{d}^3p = \int D(\epsilon)f(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon$$

mit *Zustandsdichte* $D(\epsilon)$.

Gehen Sie wie oben besprochen von der Summe über Impulse zu einem Integral über. Berechnen Sie die Zustandsdichte des Systems in $d = 1,2,3$ Dimensionen.

Zwischenergebnis:

$$D(\epsilon) \sim \begin{cases} \sqrt{\epsilon}^{-1} & d=1 \\ \text{const} & d=2 \\ \sqrt{\epsilon} & d=3 \end{cases}$$

[1] vgl. die Rechnung zur spektralen Energiedichte des Photonengases auf Blatt 10.

d) (10 P) Stellen Sie das großkanonische Potential in drei Dimensionen auf und drücken dieses mithilfe von g_s aus.

Zeigen Sie dazu, dass gilt $g_s(z) = \frac{1}{\Gamma(s-1)} \int_0^\infty t^{s-2} \ln(1 + ze^{-t}) \mathrm{d}t$.

Zwischenergebnis:

$$\frac{J}{T} = \mp(2S+1) \frac{V}{\lambda(T)^3} g_{5/2}(\pm z)$$

wobei das obere Vorzeichen für Fermionen und das untere für Bosonen gilt. $\lambda(T) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mT}}$ ist die *thermische de-Broglie-Wellenlänge.*

Berechnen Sie mittels J die Teilchenzahl und den Druck. Stellen Sie außerdem die Zustandgleichung pV/NT auf.

Zwischenergebnis:

$$\frac{pV}{NT} = \frac{g_{5/2}(\pm z)}{g_{3/2}(\pm z)}. \tag{1}$$

Es ist nützlich die Identität $z\partial_z g_s(z) = g_{s-1}(z)$ zu zeigen und zu verwenden.

An dieser Stelle haben wir nun die Teilchendichte $n = N/V$ als Funktion von Temperatur und Fugazität (bzw. des chemischem Potential) gefunden. Typischerweise hat man es jedoch mit gegebener Dichte zu tun. Wir sollten daher – zumindest näherungsweise – die Relation $n(T, z)$ nach $z(T, n)$ invertieren. Haben wir dies geschafft, können wir uns mit den Grenzfällen $|z| \ll 1$ und $|z| \gg 1$ beschäftigen, die sofort eine physikalische Interpretation haben. Dazu bedienen wir uns folgender Technik.

e) (6 P) Sei $f = \sum_{k=1}^\infty a_k x^k$ eine analytische, invertierbare Funktion (z.B. $g_{3/2}$ aus der vorherigen Teilaufgabe). Wir suchen nach einer Potenzreihendarstellung der Umkehrfunktion $g(y) = \sum_{m=1}^\infty b_m y^m$.

Gehen Sie von $x = g(f(x))$ aus und werten die Reihe bis zur zweiten Ordnung in x aus um die Koeffizienten b_1, b_2 zu bestimmen.

Zwischenergebnis: $b_1 = a_1^{-1}, b_2 = -a_2/a_1^3$.

Zeigen Sie damit, dass

$$z(T, n) = \frac{n\lambda^3}{2s+1} \left[1 \pm \frac{1}{2^{3/2}} \frac{n\lambda^3}{2s+1} + \mathcal{O}((n\lambda^3)^2) \right]$$

f) (6 P) Der klassische Grenzfall $|z| \ll 1$ tritt also ein, wenn die thermische Wellenlänge wesentlich kürzer als der durchschnittliche Teilchenabstand ist ($\lambda \ll n^{-1/3}$). Entwickeln Sie (1) bis zur ersten Ordnung in z und nutzen Sie das Ergebnis aus der vorherigen Teilaufgabe um die rechte Seite in den Größen n, T auszudrücken.

Zeigen Sie erst die Reihenentwicklung ($|z| < 1$) $g_s(z) = \sum_{n=1}^\infty \frac{(-z)^n}{n^s}$.

Welchen Effekt hat nun die Quantennatur der Teilchen?

2 Bonusaufgabe: Gittergas mit Wechselwirkung numerisch (20 P) Die Aufgabenstellung finden Sie im Jupyter-Notebook unter `http://www.thp.uni-koeln.de/~skleinbo/teaching/StatPhys2019/material/sheets/Gittergas.zip`