

Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Prof. Dr. Albrecht Klemm
Christoph Nega, Fabian Fischbach

Abgabe: Di. oder Mi. 09./10.01.2018 (in den Übungen)

<http://www.th.physik.uni-bonn.de/klemm/statphyws1718/index.php>

–HAUSAUFGABEN–

H.10.1 Zustandsdichte und thermodynamische Größen (8 Punkte)

Die Zustandsdichte ist definiert durch

$$\nu(\varepsilon) = \frac{gJV}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}}) . \quad (1)$$

Somit gilt für eine Funktion f , die nur von der Einteilchenenergie $\varepsilon_{\vec{p}}$ abhängt

$$\int d^3p f(\varepsilon_{\vec{p}}) = \int d\varepsilon \int d^3p f(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{p}}) = \frac{(2\pi\hbar)^3}{gJV} \int d\varepsilon \nu(\varepsilon) f(\varepsilon) . \quad (2)$$

a) Zeigen Sie, dass für das ideale Fermi-Gas gilt

$$\nu_I(\varepsilon) = \frac{3}{2} N \varepsilon_F^{-\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon} \quad \text{mit} \quad \varepsilon_F = \left(\frac{N}{V} \frac{6\pi^2}{gJ} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} . \quad (3)$$

Hinweis: Verwenden Sie dabei

$$\delta(f(x)) = \sum_{\{i|f(x_i)=0, f'(x_i) \neq 0\}} \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) . \quad (4)$$

(2 Punkte)

Für die Erwartungswerte der Teilchenzahl und Energie gilt bei allgemeiner Zustandsdichte $\nu(\varepsilon)$

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) n(\varepsilon) , \quad E = \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) n(\varepsilon) \varepsilon , \quad (5)$$

wobei

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (6)$$

die Fermi-Verteilungsfunktion ist. Die Fermi-Energie ist gegeben durch die maximale Einteilchenenergie der besetzten Zustände bei $T = 0$, d.h.

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \nu(\varepsilon) . \quad (7)$$

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass für niedrige Temperaturen näherungsweise

$$\int_0^\infty d\varepsilon n(\varepsilon)f(\varepsilon) = \int_0^\mu d\varepsilon f(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 f'(\mu) + \mathcal{O}\left((k_B T)^4\right) \quad (8)$$

gilt¹.

b) Zeigen Sie zunächst mit Hilfe von (8), dass für niedrige Temperaturen näherungsweise

$$\mu - \varepsilon_F = -\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\nu'(\varepsilon_F)}{\nu(\varepsilon_F)} (1 + \mathcal{O}(T^2)) \quad (9)$$

gilt.

(2 Punkte)

c) Zeigen Sie (mit dem Ergebnis aus b)), dass für den Erwartungswert der Energie bei niedrigen Temperaturen näherungsweise

$$E = E_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \nu(\varepsilon_F) + \mathcal{O}(T^4) \quad \text{mit} \quad E_0 = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \nu(\varepsilon)\varepsilon \quad (10)$$

gilt.

(2 Punkte)

d) Zeigen Sie, dass hieraus

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \nu(\varepsilon_F) + \mathcal{O}(T^3) \quad (11)$$

folgt.

(1 Punkt)

e) Für homogene Systeme gilt für die isotherme Kompressibilität

$$\kappa_T = \frac{V}{N^2} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} . \quad (12)$$

Verwenden Sie diese Relation, um zu zeigen, dass

$$\kappa_T = \frac{V}{N^2} \nu(\varepsilon_F) + \mathcal{O}(T^2) \quad (13)$$

gilt.

(1 Punkt)

Diese Relationen zeigen, dass für das Tieftemperaturverhalten thermodynamischer Größen nur der Wert der Zustandsdichte bei der Fermi-Energie maßgeblich ist.

¹Beachten Sie, dass es sich hierbei um eine asymptotische Reihe handelt.

H.10.2 Polylogarithmus, Riemannsche Zeta-Funktion und Sommerfeld-Methode (16 Punkte)

Hier möchten wir noch einmal einige Eigenschaften des Polylogarithmus analysieren, insbesondere für die Bose-Einstein-Verteilung, da diese für die Aufgabe H.10.3 nützlich sind. Abschließend möchten wir die Integrale berechnen, welche in der Sommerfeld-Methode auftauchen.

Zunächst wiederholen wir die Definition des Polylogarithmus

$$\left. \begin{array}{l} g_n(z) \\ f_n(z) \end{array} \right\} = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^x/z \mp 1}, \quad (14)$$

wobei diese Integraldarstellung für $\text{Re}(n) > 0$ und alle z , außer wenn z reell und ≥ 1 für Bosonen bzw. ≤ -1 für Fermionen ist, konvergiert.

a) Zeigen Sie, dass gilt

$$g_n(z) = -\frac{1}{\Gamma(n-1)} \int_0^\infty dx x^{n-2} \log(1 - ze^{-x}). \quad (15)$$

(2 Punkte)

b) Begründen Sie, warum der Polylogarithmus (14) auch verallgemeinerte Zeta-Funktion² genannt wird.

Hinweis: Entwickeln Sie hierfür den Polylogarithmus für $0 \leq z < 1$. Zur Erinnerung: Die Gammafunktion ist definiert durch

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty dx x^{n-1} e^{-x}. \quad (16)$$

(2 Punkte)

c) Berechnen Sie $g_1(z)$ und zeigen Sie folgende Identität für die Ableitung des Polylogarithmus

$$z \frac{\partial}{\partial z} g_{n+1}(z) = g_n(z). \quad (17)$$

(2 Punkte)

Nun möchten wir folgende Integrale berechnen

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{2n-1}}{e^x \mp 1} = \Gamma(2n) \cdot \left(\frac{g_{2n}(1)}{f_{2n}(1)} \right), \quad \text{für } n = 1, 2, \dots, \quad (18)$$

welche Polylogarithmen an der Stelle $z = 1$ darstellen und in der Sommerfeld-Methode verwendet werden.

Hierzu erinnern wir an die Definition der Bernoulli-Polynome³ $B_n(x)$ mit Hilfe der erzeugenden Funktion

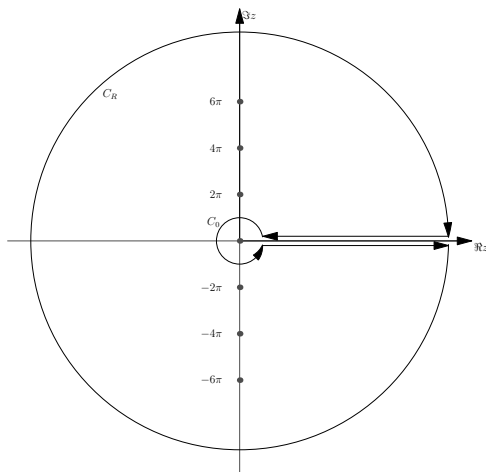
$$g(x, z) = \frac{ze^{xz}}{e^z - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(x) \frac{z^n}{n!}, \quad |z| < 2\pi. \quad (19)$$

Die Bernoulli-Zahlen sind dann durch $B_n = B_n(0)$ definiert.

²Zur Erinnerung: Die Riemannsche Zeta-Funktion ist definiert durch $\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s}$, für $s > 1$. Durch analytische Fortsetzung kann die Riemannsche Zeta-Funktion jedoch auch auf ganz \mathbb{C} definiert werden. Sie besitzt an der Stelle $s = 1$ einen Pol erster Ordnung.

³Wichtige Eigenschaften der Bernoulli-Polynome bzw. der Bernoulli-Zahlen wurden schon in A.2.1 betrachtet.

d) Überprüfen Sie, dass für die Bernoulli-Zahlen auch



$$B_n = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{C_0} dz \frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^{n+1}} \quad (20)$$

gilt, wobei C_0 eine positiv orientierte (geschlossene) Kurve um den Ursprung $z = 0$ ist, wobei für die Punkte auf der Kurve $|z| < 2\pi i$ gilt, damit die einfachen Pole des Integranden bei $z = 2\pi ip$, $p = \pm 1, \pm 2, \dots$ vermieden werden.

(2 Punkte)

e) Berechnen Sie mit Gleichung (20) B_0 und B_1 .

Hinweis: Entwickeln Sie hierzu $\frac{z}{e^z - 1}$ bis $\mathcal{O}(z^3)$.

(1 Punkt)

f) Überzeugen Sie sich davon, dass für $n \geq 2$

$$\oint_{C_0} dz \frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^{n+1}} = \lim_{R \rightarrow \infty} \oint_{C_R} dz \frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^{n+1}} \quad (21)$$

gilt und somit

$$\oint_{C_0} dz \frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^{n+1}} = -2\pi i \sum_{p=1}^{\infty} \left(\operatorname{res} \left[\frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^n}; 2\pi ip \right] + \operatorname{res} \left[\frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^n}; -2\pi ip \right] \right) \quad (22)$$

wobei

$$\operatorname{res} \left[\frac{z}{e^z - 1} \frac{1}{z^n}; \pm 2\pi ip \right] = \frac{(\pm 1)^n}{(2\pi ip)^n}. \quad (23)$$

Hier bezeichnet C_R die gesamte geschlossene Kurve in der obigen Abbildung, die aus der kleinen Kurve C_0 um den Nullpunkt, den beiden Geradenstücken entlang der positiven reellen Achse und dem großen Kreis mit Radius R besteht.

Hinweis: Eine heuristische Argumentation reicht hier aus.

(1 Punkt)

g) Schließen Sie aus der vorherigen Teilaufgabe

$$B_{2n+1} = 0, \quad B_{2n} = -2 \frac{(-1)^n (2n)!}{(2\pi)^{2n}} \zeta(2n), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (24)$$

wobei $\zeta(s)$ die Riemannsche Zeta-Funktion ist.

(1 Punkt)

h) Benutzen Sie

$$\int_0^{\infty} dx x^{s-1} e^{-\alpha x} = \frac{\Gamma(s)}{\alpha^s}, \quad (25)$$

um zu zeigen, dass

$$\frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} = \zeta(s) . \quad (26)$$

(1 Punkt)

i) Benutzen Sie

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k^s} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s} - 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l)^s} = (1 - 2^{1-s}) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s} , \quad (27)$$

um zu zeigen, dass

$$\frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{e^x + 1} = (1 - 2^{1-s}) \zeta(s) . \quad (28)$$

(1 Punkt)

j) Abschließend können wir nun die Integrale (18) berechnen. Zeigen Sie

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \frac{x^{2n-1}}{e^x + 1} &= \frac{(2^{2n-1} - 1) (-1)^{n+1} \pi^{2n} B_{2n}}{2n} , \\ \int_0^\infty dx \frac{x^{2n-1}}{e^x - 1} &= (-1)^{n+1} \frac{(2\pi)^{2n} B_{2n}}{4n} \end{aligned} \quad (29)$$

und berechnen Sie die folgenden Integrale

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \frac{x}{e^x + 1} &= \frac{\pi^2}{12} , & \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x + 1} &= \frac{7\pi^4}{120} \\ \int_0^\infty dx \frac{x}{e^x - 1} &= \frac{\pi^2}{6} , & \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} &= \frac{\pi^4}{15} . \end{aligned} \quad (30)$$

(3 Punkte)

H.10.3 Bose-Einstein-Kondensation in d Dimensionen (13 Punkte)

In dieser Aufgabe möchten wir die Bose-Einstein-Kondensation in d Dimensionen betrachten und untersuchen, in welchen Dimensionen Bose-Einstein-Kondensation auftreten kann.

a) Zeigen Sie, indem Sie die großkanonische Zustandssumme auswerten, dass für ein ideales Bosegas in d Dimensionen gilt

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{V} g_1(z) + \left(\frac{1}{\lambda}\right)^d g_{\frac{d}{2}+1}(z) \quad \text{und} \quad \frac{1}{v} := \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} + \left(\frac{1}{\lambda}\right)^d g_{\frac{d}{2}}(z) , \quad (31)$$

wobei $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$ die thermische Wellenlänge und $z = e^{\beta\mu}$ die Fugazität ist.

Hinweis: Verwenden Sie die Identitäten des Polylogarithmus aus Hausaufgabe H.10.2.

(3 Punkte)

- b) Welche Ungleichung müssen T und v in Abhängigkeit von d erfüllen, damit ein nicht-verschwindender Anteil der das System ausmachenden Teilchen sich im Grundzustand befindet? Bestimmen Sie die (volumenabhängige) kritische Temperatur T_c für diese Bose-Einstein-Kondensation im Grundzustand und ebenso das (temperaturabhängige) kritische spezifische Volumen v_c . In welchen Dimensionen d tritt Bose-Einstein-Kondensation auf, in welchen nicht?

(1 Punkt)

- c) Wie hängt der Anteil $\frac{\langle N_0 \rangle}{\langle N \rangle}$ der Teilchen im Grundzustand am Gesamtsystem innerhalb des Kondensationsbereichs $T < T_c$ von $\frac{T}{T_c}$ bzw. von $\frac{v}{v_c}$ ab?

(1 Punkt)

Ein Phasenübergang n -ter Ordnung ist dadurch gekennzeichnet, dass eine thermodynamische Größe in Abhängigkeit einer oder mehrerer Variablen $n - 1$ stetige Ableitungen besitzt und erst die n -te Ableitung unstetig ist. Da es sich bei der Bose-Einstein-Kondensation um einen Phasenübergang handelt, können wir mit Hilfe dieses Kriteriums genauer beschreiben, für welche Dimensionen die Bose-Einstein-Kondensation eintreten kann.

- g) Berechnen Sie aus dem großkanonischen Potential die Entropie S .

Hinweis: Verwenden Sie für $T > T_c$ nur die jeweils relevanten Terme zur Berechnung der Entropie. Ferner gilt für $T \rightarrow T_c$, dass $z \rightarrow 1$ geht.

(2 Punkte)

- h) Bestimmen Sie die Wärmekapazität C_V . Sie sollten folgende Temperaturabhängigkeit finden

$$C_V = \begin{cases} k_B \langle N \rangle \left[\frac{d}{2} \left(\frac{d}{2} + 1 \right) \frac{g_{\frac{d}{2}+1}(z(T))}{g_{\frac{d}{2}}(z(T))} - \left(\frac{d}{2} \right)^2 \frac{g_{\frac{d}{2}}(z(T))}{g_{\frac{d}{2}-1}(z(T))} \right] & , T > T_c \\ k_B \langle N \rangle \frac{d}{2} \left(\frac{d}{2} + 1 \right) v \left(\frac{1}{\lambda} \right)^d \zeta \left(\frac{d}{2} + 1 \right) & , T < T_c \end{cases} \quad (32)$$

(2 Punkte)

- i) In welchen Dimensionen d ist C_V nicht stetig in der Temperatur an der Stelle $T = T_c$?

(1 Punkt)

- j) Zeigen Sie, dass die Ableitung von C_V nach der Temperatur folgende Diskontinuität an der Stelle $T = T_c$ aufweist

$$\lim_{T \uparrow T_c} \left(\frac{\partial C_V}{\partial T} \right)_{V,N} - \lim_{T \downarrow T_c} \left(\frac{\partial C_V}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{k_B \langle N \rangle}{T_c} \left(\frac{d}{2} \right)^2 \left[\frac{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)}{\zeta \left(\frac{d}{2} - 1 \right)} + \frac{d}{2} \frac{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)^2 \zeta \left(\frac{d}{2} - 2 \right)}{\zeta \left(\frac{d}{2} - 1 \right)^3} \right]. \quad (33)$$

(3 Punkte)