Hochschule RheinMain
Prof. Dr. D. Lehmann SS 2023

6. Übungsblatt zur Vorlesung
Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Aufgabe 1: **a)** Zeigen Sie die folgende Identität: Mit $\beta = 1/(k_B T)$ und $\hbar = h/(2\pi)$ mit dem Planck'schen Wirkungsquantum h gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{-\beta\,\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3p}{h^3}\, e^{-\beta\,\frac{p^2}{2m}} \;=\; \frac{1}{\lambda^3}$$

mit der sogenannten thermischen Wellenlänge

$$\lambda \;:=\; \frac{h}{\sqrt{2\pi\, m\, k_B T}}$$

b) Berechnen Sie den numerischen Wert der thermische Wellenlänge eines Helium-4-Atoms bei $T = 1\,\mathrm{K}$ und $T = 300\,\mathrm{K}$. Helium-4-Atome haben 2 Protonen und 2 Neutronen im Kern und sind Bosonen. Daneben gibt es noch Helium-3 mit 2 Protonen und 1 Neutron im Kern, das sind dann Fermionen.

Aufgabe 2: Wir betrachten die kanonische Zustandssumme für das ideales Bose-Gas gegeben durch

$$Z_N \;=\; Tr_{L^2_s(\Gamma^N_x)}\left[e^{-\beta H_N}\right]$$

mit dem Hamilton-Operator

$$H_N \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N} \Delta^\Gamma_{x_i} \;:\; L^2_s(\Gamma^N_x) \;\to\; L^2_s(\Gamma^N_x)$$

und den normierten Eigenzuständen

$$\psi^s_{\{n_k\}} \;=\; \left[\tfrac{N!}{\Pi_k\, n_k!}\right]^{1/2} e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_N} \;=:\; \left[\tfrac{N!}{\Pi_k\, n_k!}\right]^{1/2} |\,\{n_k\}\,\rangle_s$$

mit den Besetzungszahlen

$$n_k \;:=\; \text{Anzahl von } k_r \text{ in } \{k_1, \cdots, k_N\} \text{ mit } k_r = k$$

Zeigen Sie:

a) Das Z_N hat die Darstellung

$$Z_N \;=\; \sum_{\{n_k\}\in I_N} e^{-\beta\sum_k n_k\,\varepsilon_k} \;=\; \sum_{\{n_k\}\in I_N} \tfrac{N!}{\Pi_k\, n_k!}\, e^{-\beta\sum_k n_k\,\varepsilon_k}\;{}_s\langle\,\{n_k\}\,|\,\{n_k\}\,\rangle_s$$

mit

$$I_N \;:=\; \left\{\,\{\,n_k\,\}_{k\in\Gamma_k} \in \mathbb{N}_0^{|\Gamma_k|} \;\middle|\; \textstyle\sum_k n_k \;=\; N\,\right\}$$

b) Anstatt über die Besetzungszahlen $\{n_k\} \in I_N$ wollen wir jetzt direkt über Impulse $(k_1, \cdots, k_N) \in \Gamma_k^N$ summieren. Zeigen Sie, dass sich das Z_N folgendermassen schreiben lässt:

$$Z_N \;=\; \sum_{k_1,\cdots,k_N \in \Gamma_k} e^{-\beta \sum_{i=1}^N \varepsilon_{k_i}} \left(e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_N} \,,\, e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_N} \right)$$

c) Folgern Sie aus Teil (b): Das Z_N hat die Darstellung

$$Z_N \;=\; \tfrac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \sum_{x_1,\cdots,x_N \in \Gamma_x} \prod_{i=1}^N \Big\{ \sum_{k_i \in \Gamma_k} e^{-\beta \varepsilon_{k_i}} \, \bar{e}_{k_i}(x_i) \, e_{k_i}(x_{\pi i}) \Big\}$$

d) Zeigen Sie: Im Limes $\Delta x \to 0$ und $L \to +\infty$ gilt mit der thermischen Wellenlänge λ aus Aufgabe 1:

$$\frac{\sum_{k \in \Gamma_k} e^{-\beta \varepsilon_k} \, \bar{e}_k(x) \, e_k(y)}{\sum_{k \in \Gamma_k} e^{-\beta \varepsilon_k}} \;\approx\; \tfrac{1}{|\Gamma|} \, e^{-\pi \frac{(x-y)^2}{\lambda^2}} \;=:\; \tfrac{1}{|\Gamma|} \, f_\lambda(x-y)$$

e) Folgern Sie: Im Limes $\Delta x \to 0$ und $L \to +\infty$ ist das Z_N gegeben durch

$$Z_N \;\approx\; \tfrac{1}{N!} \tfrac{1}{h^{dN}} \int_{[-L,L]^{dN}} d^d x_1 \cdots d^d x_N \int_{\mathbb{R}^{dN}} d^d p_1 \cdots d^d p_N \, e^{-\beta \frac{p_1^2 + \cdots + p_N^2}{2m}} \;\times$$

$$\sum_{\pi \in S_N} f_\lambda(x_1 - x_{\pi 1}) \cdots f_\lambda(x_N - x_{\pi N})$$

Insbesondere gilt im Limes $T \to \infty$ oder $\lambda \to 0$:

$$Z_N \;\approx\; \tfrac{1}{N!} \tfrac{1}{h^{dN}} \int_{[-L,L]^{dN}} d^d x_1 \cdots d^d x_N \int_{\mathbb{R}^{dN}} d^d p_1 \cdots d^d p_N \, e^{-\beta \frac{p_1^2 + \cdots + p_N^2}{2m}}$$

$$= \;\tfrac{1}{N!} \left(\tfrac{V}{\lambda^d} \right)^N$$

mit dem Volumen $V = (2L)^d$.

Bemerkung: Macht man klassische statistische Mechanik, also nicht quantenstatistische Mechanik, dann gibt es ebenfalls eine kanonische Zustandssumme. Für ein N-Teilchensystem, was durch eine klassische Hamilton-Funktion (also nicht Hamilton-Operator)

$$H_N \;=\; H_N(x_1, \cdots, x_N, p_1, \cdots, p_N)$$

beschrieben wird, ist diese Zustandssumme dann definiert durch

$$Z_N \;:=\; \Lambda_N \int_{[-L,L]^{dN}} d^d x_1 \cdots d^d x_N \int_{\mathbb{R}^{dN}} d^d p_1 \cdots d^d p_N \, e^{-\beta H_N(x_1,\cdots,x_N,p_1,\cdots,p_N)}$$

mit dem Vorfaktor

$$\Lambda_N \;:=\; \tfrac{1}{N!} \tfrac{1}{h^{dN}}$$

Dieser Vorfaktor lässt sich nicht klassisch motivieren, sondern der Grund für das Vorhandenseins dieses Faktors ist genau die Rechnung, die wir in dieser Aufgabe gemacht haben.