3.2.4. Bosonische Oszillatoren

untersuchen, motiviert durch die Darstellung von Photonen, Phononen

masselose bosonische Oszillatoren

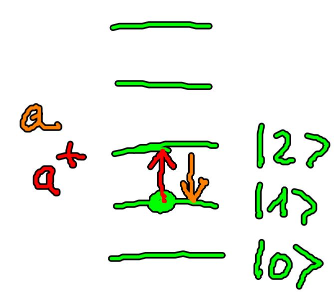
$\left(|\{n_i\}\rangle \right.$, mit $n_i : 0, 1, 2 \dots \infty \left. \right)$

Oszillatoren seien ungekoppelt
(Normalkoordinaten sind eingeführt)

3.2.4.1. Hamiltonian und Zustände

Hamilton v. Oszillatoren

$$H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$$

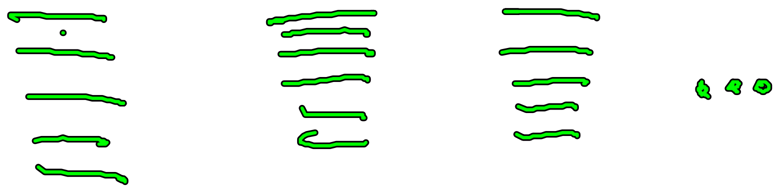


(1 Oszillator)

$$H = \sum^{M} \hbar\omega_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right)$$

$k=1$

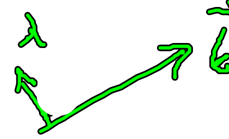
(viele (M) ungekoppelte Oszillatoren)



$k=1$ $\qquad$ $k=2$ $\qquad$ $k=3$

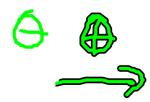
zunächst Zustandssumme allgemein berechnen,
später dann anwend. auf Photon / Phonon:

<u>Photon</u>: $\quad k=\{\vec{k},\ \lambda(\vec{k})\}$



$\vec{k}$ = Wellenvektor
λ = Polarisation

<u>Phonon</u>: $\quad k=\{\vec{k},\ \lambda\}$

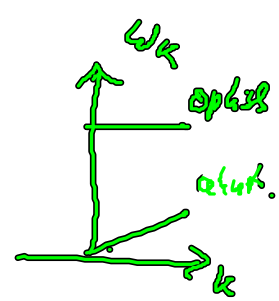


1 Normalschwing. in Zelle

$\vec{k}$ = Wellenvektor
λ = Normalschwing. (akustisch, optisch)

$$\omega_k^{\text{Photon}} = c\,|\vec{k}|$$

$$\omega_k^{\text{Phonon}} = \begin{cases} \text{konstant} & \text{optische Phonon} \\ v_s\,|\vec{k}| & \text{akustische Phonon} \end{cases}$$

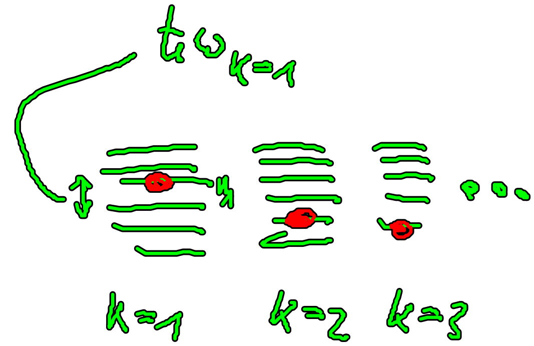


Energie des Oszillators:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$|n\rangle$ (ein Oszillator)

$$\varepsilon_n = \sum_k \hbar\omega_k\left(n_k + \frac{1}{2}\right)$$



masselose Bosonen: $\mu = 0$

kanonisches = großkanonisches Rechnen

fallen zusammen

kanonisches Ensemble:

$$E = -\partial_\beta \ln Z_k \quad , \quad p = -\frac{\partial F}{\partial V} = kT\,\frac{\partial \ln Z_k}{\partial V}$$

kalorische und thermische Zustandssumme sind

durch die kanonische Zustandssumme Z_k bestimmt

3.2.4.2 Zustandssumme von ungekoppelten Oszillatoren

(i) 1 Oszillator – Zustandssumme

$$Z_k = \sum_{\text{alle Zustände } |n\rangle} e^{-\beta E_n} =$$

$|n=2\rangle$, $|n=1\rangle$, $|n=0\rangle$

die Zustände mit QZ n sind die Oszillatorzustände

$\beta = \frac{1}{kT} \rightarrow$ legt das Wärmebad fest

$$= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

Bosonen, da Quant.anregg. von $0, 1, \cdots \infty$ mögl.
(Zahl der Quasiteilchen die in einem Oszillator angeregt werden)

$$= \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar\omega}}_{\text{geometrische Reihe}} e^{-\beta \frac{\hbar\omega}{2}}$$

$$Z_K = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}} = \frac{1}{e^{\beta\frac{\hbar\omega}{2}} - e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}}$$

Erinnere uns $\ln Z_k$ ist gefragt $\rightarrow E, p$ zu bekommen:

$$\ln Z_k = -\beta \frac{\hbar\omega}{2} - \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)$$

kalorische Zstgl.: $E = -\partial_\beta \ln Z_k$

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$\boxed{\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}}$$

kalorische Zstgl. des harmon. Oszillators

Bemerkungen:

a) setzt sich aus Grundzustandsenergie und Anteil der thermisch Anregg. durch Umgebg. (kT) zusammen

b) kalter Umgebung: $T \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow \infty$

$E = \frac{\hbar\omega}{2}$, d.h. wenn thermische Energie nicht zur Verfügung steht, dann ist System im Grundzustand (angeregte Zustände nicht besetzt)

c) mittlere Zahl der Oszillatorquanten als Funktion v. T:

$$\langle n \rangle = \underbrace{\sum_n n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z_K}}$$

Mittelwert d. Oszillatorquanten $\langle N \rangle = sp(N \underset{\overset{\shortparallel}{R_K}}{\rho})$

$$= \sum_n n\, e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} \frac{1}{Z_K}$$

$$= \frac{1}{Z_K \hbar\omega}\left(-\partial_\beta \underbrace{\sum_n e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}}_{Z_K} - \frac{1}{2}\underbrace{\sum_n \frac{e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}}{\hbar\omega}}_{Z_K}\right)$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(-\partial_\beta \ln Z_K - \hbar\omega\frac{1}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

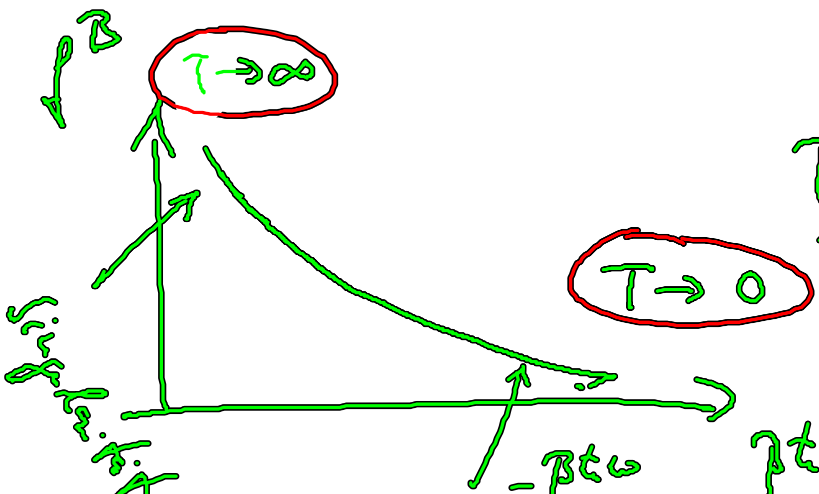
$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}}$$

mittlere Anzahl der angeregten Quasiteilchen als Funktion der Temperatur ($\beta = \frac{1}{kT}$).

Diese Funktion heißt Boseverteilung

Die Boseverteilung gibt an welche mittlere Zahl von Quasiteilchen bei einer festen Temperatur T im System angeregt sind.

Abkürzung: $\langle n \rangle \equiv f^B(\beta\hbar\omega)$



$\beta \to \infty,\ T \to 0$

$\beta \to 0,\ T \to \infty$

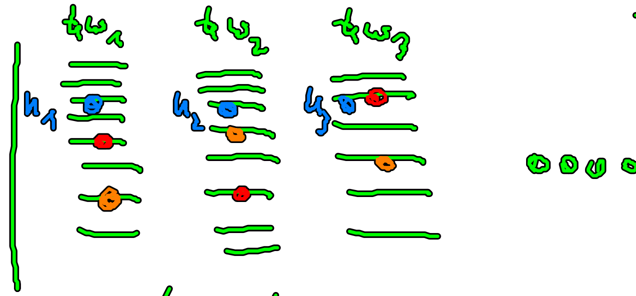
(1 weglassen im Nenner)

Singularität: zeigt hohe Besetzg. an für große thermische Energie

(ii) Viel Oszillator Zustandssumme

Index k (nummeriert später die Photon/Phonon-Indizes durch)

$$Z_k = \sum_{\text{alle mögl. Zustände } j} e^{-\beta \varepsilon_j} =$$



ungekoppelt, verschied. Frequenz mögl.

alle Kombination sind Zustände $\{j\}$:

$$\varepsilon_j = \sum_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_k$$

Quantenzahl/Besetzungszahl d. k-ten Oszillators

Energie des k-ten Oszillators

j: bezeichnet 1 Konfiguration (zB ● ● ● ...)

Zustände $|n_1, n_2, n_3 \dots \rangle$

$$Z_k = \underbrace{\sum_{n_1 n_2 n_3 \dots}}_{\sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \sum_{n_3=0}^{\infty} \dots} e^{-\beta \sum_k \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right)}$$

alle j ● ● ● ...

$$= \sum^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)} \sum^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)} \dots$$

$u_1 = 0$ $u_2 = 0$

Produkt v. Summe über einzelne Oszillatoren

$$= \prod_{k=1} \frac{e^{-\beta\frac{\hbar\omega_k}{2}}}{\underbrace{1-e^{-\beta\hbar\omega_k}}}$$

1 Oszillatorzustandssumme für allerdings verschiedene Oszillatoren k.

$\ln Z_K$ = gerecht wegen Zustandsgleichungen =

$$\ln Z_K = \sum_k \left(-\beta\frac{\hbar\omega_k}{2} - \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega_k}\right)\right)$$

kalorische Zustandsgleichung:

$$E = -\partial_\beta \ln Z_K = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} + \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{e^{\beta\hbar\omega_k}-1}$$

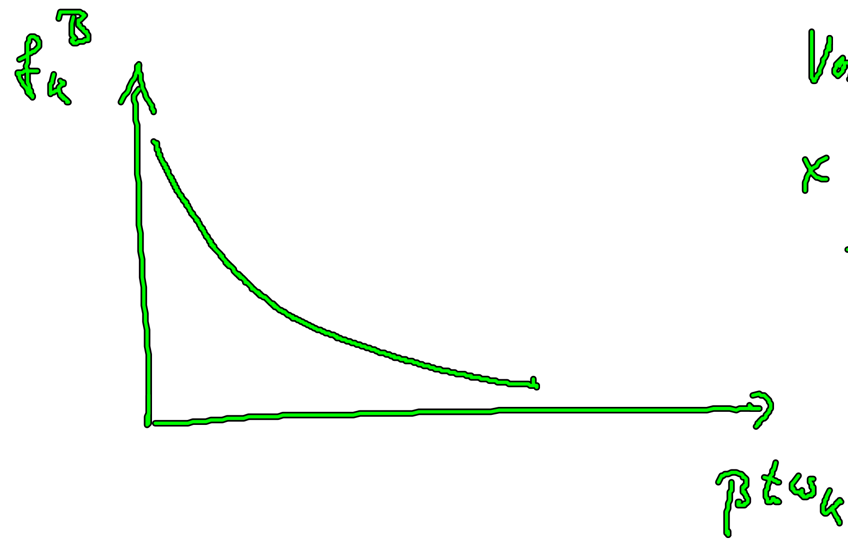
Summe über alle Grundzustandsenergien

Anteil der thermisch angeregten Energie

$$\sum_k \hbar\omega_k \, f_k^B(\beta\hbar\omega_k)$$

mittlere Besetzungszahl des k-ten Oszillators

Interpretation der Boseverteilung bei vielen Oszillatoren:



Vorstellung: $T =$ konstant

x-Achse läuft über $\hbar\omega_k$ (Energie der verschiedenen Oszillatoren)

$\longrightarrow$ Singularität tritt bei $\hbar\omega_k \to 0$, also den tiefstgelegenen Oszillator auf!

man kann auch f_k^B auch über $\langle n_k \rangle$ herleiten (analog zu $\langle n \rangle$).

Interpretation als mittlere Besetzungszahl des k-ten Oszillators damit gesichert.