VII. Quantenstatistik

VII 1. Symmetrien

Betrachte System aus N quantenmechan. Teilchen

$\Rightarrow$ Zustand des Systems wird durch Vielteilchen-Wellenfunktion beschrieben

$$\psi(q_1, \ldots, q_N) = \psi(1, 2, \ldots, N)$$

Teilchenkoordinaten: z.B. Ort und Spin

QM:
Betrachtete Teilchen sind
ununterscheidbar !

Folge der Unschärferelation:
Bahnen der Teilchen können nicht simultan verfolgt werden !

Folgerung:

Physikalische Größen wie die Aufenthaltswahrsch. (oder die Gesamtenergie) müssen invariant sein gegenüber dem Austausch zweier Teilchen!

Konsequenz

~~Wah~~ Aufenthaltswahrsch.

$$\psi(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N)\,\psi^*(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N)$$

$$\overset{!}{=} \psi(1,\dots,j,\dots,i,\dots,N)\,\psi^*(1,\dots,j,\dots,i,\dots,N)$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(1,\dots,j,\dots,i,\dots,N) = \pm\,\psi(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N)}$$

Def. des Austauschoperators.

$$\hat{P}_{ij}\,\psi(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N)$$
$$= \psi(1,\dots,j,\dots,i,\dots N)$$

Kombiniere mit (*)

Eigenwert-Gleichung

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij}\,\psi(1,\dots,i,\dots j,\dots N)$$
$$= \pm\, \psi(1,\dots,i,\dots j,\dots,N)$$
$$= \lambda_{1,2}\, \psi(1,\dots,i,\dots j,\dots,N)$$

Dieser N-Teilchen-Zustand ist eine Eigenfunktion des Austauschoperators ~~wobei~~ mit den Eigenwerte

$\lambda_1 = 1$; "total symmetrischer Zustand"

$\lambda_2 = -1$; "total antisymmetrischer Zustand"

→ Vorzeichenwechsel
bei Vertauschung

Beachte:

- Der Symmetriecharakter der Wellenfunktion ist eine Eigenschaft der zugehörigen Teilchen

- Es gibt Zusammenhang zw. Symmetrie und dem Spin der Teilchen ("Spin-Statistik-Theorem von Pauli)

  - Teilchen mit halbzahligem Spin haben total antisymmetr. Wellenfunktionen ($s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$) Spin-Quantenzahl
    „Fermionen" (Elektron, Proton, Neutron, Myon, ...)

- Teilchen mit ganzzahligem Spin
  ($s = 0, 1, 2, \dots$)
  haben symmetrische Wellenfunktion

"Bosonen" (z.B. Photon)

Der Symmetriecharakter des Systems ist eine Erhaltungsgröße!

$$[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0$$

mit $\hat{H}\, \psi(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N) = E\, \psi(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N)$
$\hat{H}\, \psi(1,\dots,j,\dots,i,\dots,N) = E\, \psi(1,\dots,j,\dots,i,\dots,N)$

VII.2. Symmetrie und Besetzung von Quantenzuständen

Sowohl für Fermionen als auch für Bosonen:

Der Mikrozustand des Gesamtsystems kann statt $\psi(\dots)$ auch durch die Besetzungszahlen n_α der "Einteilchenzustände ψ_α charakterisiert werden

$\{n_\alpha\} \hat{=}$ Besetzungszahlen aller Einteilchenzustände

z.B. Teilchen im Kasten: $\varepsilon_\alpha = \frac{2\pi}{L}(n_x^\alpha, n_y^\alpha, n_z^\alpha)$
n_x, n_y, n_z ganze Zahlen

α umfaßt n_x, n_y, n_z
und Spin

Es gilt:

$$\sum_\alpha n_\alpha = N \quad \text{Gesamtteilchenzahl}$$

$$\sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha = E \quad \text{Gesamtenergie}$$

Summe statt einem Integral, da Energien in der Quantenmechanik diskretisiert sind!

Unterschied zw. Fermionen und Bosonen:

mögliche Werte der Besetzungszahlen n_α

Bosonen

$\Rightarrow$ total symmetrische Wellenfunktion

$\hat{=}$ Jeden Quantenzustand kann beliebig oft besetzt werden: $n_\alpha = 0, 1, 2, \dots, N$
für alle α

Fermionen

$\Rightarrow$ total antisymmetr. Wellenfunktion

„Slater-Determinante"

$$|\psi\rangle_{(N)} = \sqrt{\frac{1}{N!}} \begin{vmatrix} |\varphi_{1,\alpha_1}\rangle & \dots & |\varphi_{N,\alpha_1}\rangle \\ \vdots & & \\ |\varphi_{1,\alpha_N}\rangle & \dots & |\varphi_{N,\alpha_N}\rangle \end{vmatrix}$$

Einteilchenzustände

Teilchenindex

Quantenzustand

Vertauschung zweier Spalten
$\hat{=}$ Vertauschung von 2 Teilchen
$\Rightarrow$ Vorzeichenwechsel von $|\psi\rangle_{(N)}$!

- 2 Quantenzahlen ~~gleich~~ gleich

$\hat{=}$ 2 Zeilen in der Determinante sind gleich

$\Longrightarrow$ Determinante verschwindet !!

Folgerung:

Für Fermionen darf jede Quantenzahl höchstens einmal vorkommen!

$\Longrightarrow$ Pauli-Prinzip

$$\Longrightarrow \boxed{n_\alpha = 0, 1}$$

VII.3. Großkanonische Zustandssumme

Ziel:

Statistische Beschreibung des Vielteilchensystems

- für den Fall, dass keine Wechselwirkungen zw. den Teilchen vorliegen!

Zunächst: kanonische Zustandssumme des Systems

$$Z_N = \sum_l e^{-\beta E_l} \quad \text{mit } E_l = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha$$

$\sum_l \ldots$ $\hat{=}$ Summe über alle möglichen Energie-Zustände des Gesamtsystems $\{n_\alpha\}_l$

Korrekt:

$$Z_N = \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} e^{-\beta \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha} = Z_N(T,N,V)$$

Summe über möglichen $\{n_\alpha\}$ so, dass die Nebenbedingung $\sum_\alpha n_\alpha = N$ erfüllt ist

Durch die Einschränkung der Summation ist Z_N schwer zu handhaben

$\Rightarrow$ gehen ins großkanon. Ensemble (N nicht fest!)

$$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z_K(T,N,V)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} e^{-\beta \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha}$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} e^{-\beta(\sum_\alpha (\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha)}$$ benutze $N = \sum_\alpha n_\alpha$

$$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} \prod_\alpha e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha}$$

Da in Z_{GK} über alle möglichen Werten von N summiert wird, können die Summen ~~ü~~ über $\{n_\alpha\}$ auch unabhängig durchgeführt werden!!!

also Trick: $\sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} \dots \longrightarrow \sum_{\{n_\alpha\}} \dots\dots$

nicht eingeschränkte Summe!

Trick nicht mögl. im kanonischen Fall!

$$\rightarrow Z_{GK} = \sum_{\{n_\alpha\}} \prod_\alpha e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)n_\alpha}$$

$$= \sum_{n_1=0}^{n_1^{max}} \sum_{n_2=0}^{n_2^{max}} \cdots \prod_\alpha e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)n_\alpha}$$

Fermionen: $n_1^{max} = n_2^{max} = \ldots = 1$

Bosonen: $n_1^{max} = n_2^{max} = \ldots = \infty$

da großkanonisch!

Beachte noch.

Summen und Produkt in Z_{GK} können vertauscht werden!

Zeige das explizit für 2 Fermionen mit Zuständen $\alpha = 1, 2$

$$x_\alpha^{n_\alpha} = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)n_\alpha}$$

mögliche Wert: $x_1^0 = 1 = x_2^0$

$x_1^1 = x_1 \; , x_2^1 = x_2$

$= e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)} \quad = e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)}$

$$\sum_{\{n_\alpha\}} \prod_\alpha x_\alpha^{n_\alpha}$$

$$= \sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_2=0}^{1} x_1^{n_1} x_2^{n_2}$$

$$= 1 + x_1 + x_2 + x_1 x_2$$

$$\prod_\alpha \sum_{n_\alpha} x_\alpha^{n_\alpha} = (1+x_1)(1+x_2)$$

$$= 1 + x_1 + x_2 + x_1 x_2$$

$$\boxed{Z_{GK} = \prod_\alpha \sum_{n_\alpha} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)n_\alpha}}$$

allg. für Fermionen und Bosonen

Auswertung für Fermionen

$$n_\alpha = 0,1$$

$$\Rightarrow Z_{GK}^{\text{Fermion}} = \prod_\alpha \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}\right)$$

Bosonen

$$n_\alpha = 0, 1, \dots, \infty$$

Annahme: $e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} < 1$

$\Leftrightarrow \mu < \varepsilon_\alpha$ für alle Zustände α

In diesem Fall kann man schreiben

$$x = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}$$

$\cancel{Z_{GK}}$

$$Z_{GK}^{Boson} = \prod_\alpha \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} x^n}$$

Konvergente geometrische Reihe, falls $x<1$

benutze $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$

$$\Rightarrow Z_{GK}^{Boson} = \prod_\alpha \left(\frac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}} \right)$$

Großkanonisches Potential

$$J = -k_B T \ln Z_{GK}$$

$$= \pm k_B T \sum_\alpha \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\right)$$

oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres Vorzeichen: Fermionen