Nachbemerkung zum Austauschoperator

$$\psi(1,\ldots,i,\ldots,j,\ldots,N)$$

$$\longrightarrow |\varphi^{(1)}_{\alpha_1}\,\varphi^{(2)}_{\alpha_2}\,\cdots\,\varphi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle = |\varphi_N\rangle$$

Teilchenindex

Index für Quantenzahl

Austauschoperator

$$\hat P_{ij}\,\underbrace{|\ldots\,\varphi^{(i)}_{\alpha_i}\,\ldots\,\varphi^{(j)}_{\alpha_j}\,\ldots\rangle}_{|\varphi_N\rangle} = |\ldots\,\varphi^{(j)}_{\alpha_i}\,\ldots\,\varphi^{(i)}_{\alpha_j}\,\ldots\rangle$$

Teilchen i jetzt in Zustand α_j und umgekehrt

man stellt:

① $\hat P_{ij}\hat P_{ij} = \hat 1$ Einheitsoperator

2-malige Anwendung führt zurück auf den Ausgangszustand

Forderung: Norm des Zustands (bzw. die Aufenthalts-W.) soll ~~erhalten~~ invariant sein unter Permutation.

$$\langle \varphi_N | \varphi_N \rangle \overset{!}{=} \langle \hat{P}_{ij} \varphi_N | \hat{P}_{ij} \varphi_N \rangle \qquad \left[\langle \varphi_1 | \hat{A} \varphi_2 \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi_1 | \varphi_2 \rangle \right]$$

$$= \langle \varphi_N | \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} | \varphi_N \rangle \Longrightarrow \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} \overset{!}{=} 1 \quad (2)$$

aus (1) $\Longrightarrow$ $\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$

aus (2) $\Longrightarrow$ $\hat{P}_{ij}^+ = \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$

$\Longrightarrow$ $\hat{P}_{ij}$ hermitesch!

$\Longrightarrow$ reelle Eigenwerte

$\Longrightarrow$ Eigenwerte $\lambda_{1,2} = \pm 1$

Wh.: $\Longrightarrow$ mögliche Besetzungszahlen von Einteilchenzuständen:

Fermionen: $n_\alpha = 0, 1$ (Pauli-Prinzip)

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

⋮

Großkanonische Zustandssumme

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

daraus das großkanon. Potential

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

VII.4 Statistiken, thermodyn. Größen

betrachte die mittlere Besetzungszahl des Zustands mit Energie ε_α

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{Z_{GK}} \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \underbrace{Z_K(N)}_{\text{kanonische Zustandssumme}} n_\alpha$$

$$= \dots = \frac{1}{Z_{GK}} \prod_{\alpha'} \sum_{n_{\alpha'}} e^{-\beta(\varepsilon_{\alpha'} - \mu)n_{\alpha'}} n_\alpha$$

Nur der Term mit $\alpha = \alpha'$ trägt bei, Rest kürzt sich weg!

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{\sum_{n_\alpha} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha} n_\alpha}{\sum_{n_\alpha} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha}} \quad (*)$$

Fermionen: $n_\alpha = 0, 1$

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}}$$

umschreiben: $\Rightarrow$

$$\boxed{\langle n_\alpha \rangle^{FD} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} + 1}}$$

FD: Fermi-Dirac

Bosonen: $n_\alpha = 0, \dots, \infty$

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{\sum_{n_\alpha = 0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha} n_\alpha}{\sum_{n_\alpha = 0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha}}$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial}{\partial y} \ln \sum_{n_\alpha=0}^{\infty} \left(e^{-y}\right)^{n_\alpha}$$

nehme an: mit $y = \beta(\varepsilon_\alpha - \mu)$

$$y > 0 \Leftrightarrow e^{-y} < 1 \qquad (\mu < \varepsilon_\alpha \;\; \forall \alpha)$$

$$\Rightarrow \langle n_\alpha \rangle = -\frac{\partial}{\partial y} \ln \frac{1}{1-e^{-y}}$$

garantiert: Konvergenz geometrische Reihe

$$= \frac{\partial}{\partial y} \ln (1 - e^{-y})$$

$$= \ldots = \frac{e^{-y}}{1-e^{-y}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle n_\alpha \rangle^{BE} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} - 1}}$$

BE: Bose-Einstein

Zusammengefasst:

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \mp 1}$$

Besetzungszahl-statistik

"$-$" : BE

"$+$" : FD

Weitere Größen:

Gesamt-Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = \sum_\alpha \langle n_\alpha \rangle = \sum_\alpha \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \mp 1}$$

mittlere Energie: $\langle E \rangle = \sum_\alpha \langle n_\alpha \rangle \epsilon_\alpha$

VII.5. Besetzungszahlen im klass. Grenzfall

betrachte Teilchen im Kasten, nicht wechselwirkend

Einteilchenenergien: $\epsilon_\alpha = \frac{p^2}{2m}$

integers

$$p = \hbar k = \frac{\hbar 2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$$

diskretisiert

jeder Energieeigenwert ist $\underbrace{(2s+1)}_{2 \text{ für Elektronen } (s=\frac{1}{2})}$-fach entartet ist

Damit

$$\langle n_\alpha \rangle \longrightarrow \langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)} \mp 1}$$

$$x = e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)}$$

$$\Rightarrow \langle n_p \rangle = \frac{x}{1 \mp x}$$

<u>Klassischer Grenzfall</u>:

Fugazität $e^{\beta\mu} \ll 1$

<u>Begründung</u>:

Klass. Fall : mittlerer Teilchenabstand $\gg \lambda_T$

$$\rho^{-1/3} \gg \lambda_T$$

$$\rho \lambda_T^3 \ll 1$$

Ideale Gas:

$$\rho \lambda_T^3 = e^{\beta\mu}$$

erfüllt bei kleinen Dichten, hohen Temperaturen, großen Massen

$$e^{\beta\mu} \ll 1$$

Folgerung:

$$e^{\beta\mu} \ll 1 \Rightarrow x = e^{\beta\mu} e^{-\beta p^2/2m} \ll 1$$

Taylorentwicklung von $\langle n_p \rangle$ um $x = 0$

$$\langle n_p \rangle = \frac{x}{1 \mp x} = 0 + x + O(x^2)$$

$\approx x$

Im klass. Grenzfall: $\langle n_p \rangle \approx e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)}$ sowohl für Fermionen als auch für Bosonen!

Folgerung:

$$\langle N \rangle = \sum_p \langle n_p \rangle$$

diskrete Niveaus werden kontinuierlich

$$\longrightarrow \frac{\overbrace{L^3}^{V}}{(2\pi\hbar)^3} \int dp\, e^{-\beta\frac{p^2}{2m}} e^{\beta\mu}$$

$$= \frac{V}{\lambda_T^3} e^{\beta\mu}$$

$p = \hbar k$
$= \hbar \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$

$$\Longrightarrow \frac{\langle N \rangle}{V} \lambda_T^3 = \rho \lambda_T^3 = e^{\beta\mu}$$

entspricht dem klass. idealen Gas!

VII.6 Fermionen bei tiefen Temperaturen

betrachte weiterhin nichtrelativistische, nicht-wechselwirkende Fermionen $\Longrightarrow \varepsilon_\alpha = \varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$

$$\langle n_\alpha \rangle^{FD} = \frac{1}{e^{\beta \frac{p^2}{2m} - \beta\mu} + 1}$$

$$\Leftrightarrow \quad \langle n(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \qquad \text{mit } \varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

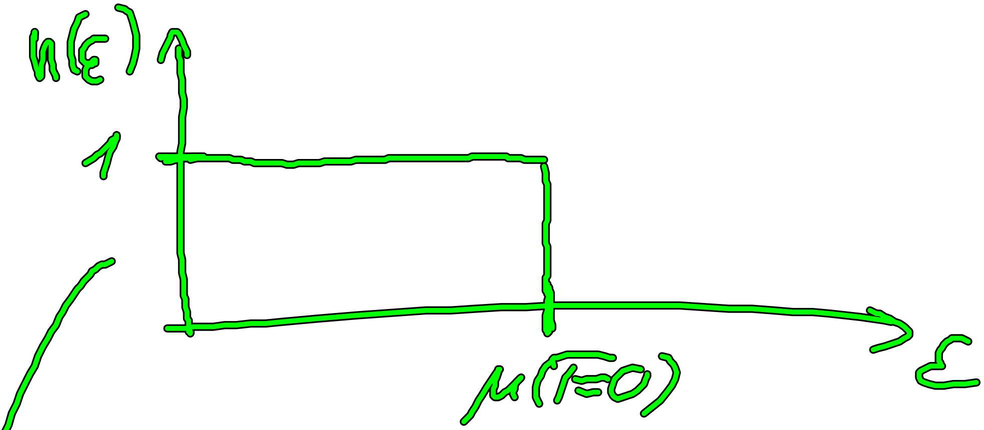
VII.6.1. Grundzustand

$$T \to 0 \quad \Leftrightarrow \quad \beta \to \infty$$

$$\lim_{\beta \to 0} e^{\beta(\varepsilon - \mu)} = \begin{cases} \infty, & \varepsilon > \mu(T=0) \\ 0, & \varepsilon < \mu(T=0) \end{cases}$$

beachte: μ ist Funktion der Temperatur

$$\Rightarrow \langle n(\varepsilon) \rangle_{T \to 0} = \begin{cases} 1, & \varepsilon < \mu(T=0) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$



Stufenfunktion! $\underbrace{\langle n(\varepsilon)\rangle_{T=0}}_{n(\varepsilon)|_{T=0}} = \vartheta(\mu_{(T=0)}-\varepsilon)$

mit $\vartheta(x) = \begin{cases} 1, & x>0 \\ 0, & x<0 \end{cases}$

es gibt keine thermische Fluktuation!

<u>Interpretation</u>

Im Grundzustand ("entartetes" Fermigas) sind alle Zustände mit $\varepsilon<\mu(T=0)$ mit je einem Teilchen besetzt!

... alle anderen $(\varepsilon>\mu(T=0))$ sind unbesetzt!

Folge des Pauli-Prinzips
(ansonsten würde alle Fermionen im Zustand mit der niedrigsten Energie sein!)

$\mu(T=0)$: Grenzenergie, Fermi-Energie (Fermikante)

$$\varepsilon_F := \mu(T=0)$$

zugehörige Impuls $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$ Fermi-Impuls

Folgerungen für Dichte, Grundenergie etc.

(bzw. Gesamtteilchenzahl)

$$N \overset{!}{=} \underbrace{(2s+1)}_{\substack{=2 \\ \text{mit } s=\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{p} \text{ mit } |\vec{p}| \le p_F} 1$$

$$= (2s+1)\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\int_{p \le p_F} d\vec{p} = (2s+1)\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^{p_F} dp\, p^2$$

$$= (2s+1)\frac{V}{6\pi^2}\frac{p_F^3}{\hbar^3}$$

auflösen:

$$p_F = \left(\frac{6\pi^2}{2s+1}\right)^{1/3} \hbar \, \rho^{\frac{1}{3}}$$

$$\rho = \frac{N}{V}$$

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \left(\frac{6\pi^2}{2s+1}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}$$

$\parallel$

$\mu\,(T=0)$

Grundzustandsenergie

$$E = \sum_{\substack{p \\ |p| \le p_F}} \varepsilon(p) \Longrightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int\limits_{|p| \le p_F} dp \, \frac{p^2}{2m}$$

$$= \dots = \frac{V}{20\pi^2 \hbar^3 m} p_F^5$$

Kombiniere das mit Def. von ε_F und N als Fkt. von p_F

$$\rightarrow \boxed{E\Big|_{T=0} = \frac{3}{5}\varepsilon_F N}$$

$E\Big|_{T=0}$ ist also ungleich Null!

vergleiche mit klass. idealen Gas

$$E^{klass}\Big|_{T=0} = \frac{3}{2} N k_B T\Big|_{T=0} = 0$$

Grundzustandsdruck

benutze: $pV = \frac{2}{3}E$

$$\Rightarrow p\Big|_{T=0} = \frac{2}{3}E(T=0)V^{-1}$$

$$= \frac{2}{5}\varepsilon_F \rho \quad \text{Fermionen}$$