

5. Quantenmechanische Modellsysteme

Grenzen der klassischen Modelle:

- tiefe Temperaturen
- hohe Dichten \Rightarrow Quantenstatistik

5.1. Ununterscheidbarkeit der quantenmech. Teilchen

Betrachte N identische Teilchen

N -Teilchenzustand $|a_1, a_2, \dots, a_N\rangle$

Permutationsoperator $\hat{P}_{(ij)} |a_1 \dots a_i \dots a_j \dots a_N\rangle = |a_1 \dots a_j \dots a_i \dots a_N\rangle$
 $a_i =$ Satz von 1-Teilchen-Quantenzahl
 \curvearrowright vertauscht

insbesondere gilt $[\hat{H}, \hat{P}_{(ij)}] = 0 \rightarrow \hat{P}_{(ij)}$ Erhaltungsgröße

$$\hat{P}_{(ij)}^2 = 1 \rightarrow \text{Eigenwerte } \lambda_{ij}$$

$$\hat{P}_{(ij)} \psi = \lambda_{ij} \psi$$

$$\lambda_{ij}^2 = 1$$

$$\hookrightarrow \boxed{\lambda_{ij} = \pm 1}$$

Charakteristikum des Zustandes bzw. der Teilchensorte

2-Teilchen-System

Sei $|a, b\rangle = |a\rangle_1 |b\rangle_2 \in \mathcal{H} \times \mathcal{H}$

Dann ist $|a, b\rangle_s := \frac{1}{2} (1 + \hat{P}_{(12)}) |a, b\rangle$
(symmetrisch)

Eigenzustand
von $\hat{P}_{(12)}$ zum
Eigenwert $+1$.

$$\text{denn } \hat{P}_{(12)} |a, b\rangle_s = \frac{1}{2} (\hat{P}_{(12)} + \hat{P}_{(12)}^2) |a, b\rangle = |a, b\rangle_s$$

sowie $|a, b\rangle_a := \frac{1}{2} (1 - \hat{P}_{(12)}) |a, b\rangle$ Eigenzustand
von $\hat{P}_{(12)}$ zum
Eigenwert -1

$$\text{denn } \hat{P}_{(12)} |a, b\rangle_a = \frac{1}{2} (\hat{P}_{(12)} - 1) |a, b\rangle = - |a, b\rangle_a$$

ν -Teilchensystem

alle $\hat{P}_{(ij)} \leftrightarrow \hat{H}$ kommutieren

$\hat{P}_{(ij)} \leftrightarrow \hat{P}_{(kl)}$ i.d. kommutieren nicht

- Komplizierte Symmetrieeigenschaften sind überflüssig.
Tatsächlich sind in der Natur nur Zustände realisiert,
die bei Vertauschung beliebiger ununterscheidbarer Teilchen
symmetrisch ($\lambda_{ij} = +1$) oder
antisymmetrisch ($\lambda_{ij} = -1$) sind.

→ Reduktion des Hilbertraumes $\mathcal{H} \times \dots \times \mathcal{H}$
auf einen symm. (\mathcal{H}_ν^+) und antisymm. (\mathcal{H}_ν^-) Teilraum
erlaubter Zustände.

	Bosonen	Fermionen
Zustände	symm.	antisymm.
Spin	ganzzahlig $s = 0, 1, 2, \dots$ Bsp. Photon, Phonon, ^4He	halbzahlig $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ Bsp. Elektron, Proton, Neutron, ^3He
Statistik	Bose - Einstein	Fermi - Dirac
Hilbertraum	$\mathcal{H}_N^+ = \hat{S} \mathcal{H}_N$ $= \frac{1}{N!} \sum_{g=1}^{N!} \hat{P}_{(g)} \mathcal{H}_N$ ↑ g-te Permutation von $(1, \dots, N)$	$\mathcal{H}_N^- = \hat{A} \mathcal{H}_N$ $= \frac{1}{N!} \sum_{g=1}^{N!} (-1)^P \hat{P}_{(g)} \mathcal{H}_N$
Besetzungszahl N_i	0, 1, 2, ...	0, 1
"BW des Besetzungszahl- operators"		<u>Pauli - Prinzip</u> Wellenfkt. total antisymm. \Rightarrow 2 identische Fermionen können nicht im gleichen Einteilchenzustand sein

Hilbertraum variable Teilchenzahl ($\hat{=}$ großkanon. Ensemble)

$$\mathcal{H} = \sum_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^{\pm} \quad \text{Fock Raum}$$

Ideales Gas (WW-freie, identische Teilchen) :

Übergang zur Besetzungszahldarstellung

$$\begin{array}{ccc}
 |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle & \longrightarrow & |N_1 \dots N_i \dots N_e\rangle \equiv |\alpha\rangle \\
 \uparrow & & \uparrow \\
 \text{Teilchen Nr. 1 im} & & \text{Besetzungszahl des} \\
 \text{1-Teilchenzustand } \alpha_1 & & \text{1-Teilchen Zustands } i
 \end{array}$$

5.2. Das ideale Fermigas

1-Teilchen-Zustände = Eigenzustände zur 1-Teilchen-Energie E_i

großkan. statistischen Operator

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$$

P_α Wahrscheinlichkeit das System im Vielteilchenzustand $|\alpha\rangle$

zu finden, wobei $E_\alpha^{\text{ges}} = \sum_{j=1}^e E_j N_j$

E_j 1-Teilchen
Energie

N_j Besetzungszahl

$$P_\alpha = \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle$$

$$P_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\beta \sum_{j=1}^e (E_j - \mu) N_j}$$

großkan. Zustandssumme:

$$\Xi = \sum_{N_1, \dots, N_L} e^{-\beta \sum_{j=1}^L (E_j - \mu) N_j}$$

↓ da e-Fkt
faktoriisiert

$$= \prod_{j=1}^L \left(\sum_{N_j} e^{-\beta (E_j - \mu) N_j} \right)$$

Fermisum

$$= \prod_{j=1}^L \left[\sum_{N_j=0}^1 t_j^{N_j} \right] \quad \text{wobei } t_j := e^{-\beta (E_j - \mu)}$$

$$= \prod_{j=1}^L [1 + t_j] = \prod_{j=1}^L \Xi_j$$

$$P(N_1, \dots, N_L) = \prod_{j=1}^L \frac{t_j^{N_j}}{1 + t_j} = \prod_{j=1}^L P(N_j)$$

↑
Wahrscheinlichkeit, das System mit der Besetzung N_1, N_2, \dots zu finden. separiert!

Mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchen-Zustand E_j :

Wegen $N_j = 0, 1, \dots$ gilt $\langle N_j \rangle = P(N_j = 1) = \frac{t_j}{1 + t_j}$

gilt nicht für
Bosonen!

Andere Ableitung:

aus $p(N_i) = e^{\psi_i - \beta E_i - \alpha N_i}$

$$\alpha = -\beta \mu$$

$$\begin{aligned} \psi_i &= -\ln \Xi_i \\ &= -\ln(1 + t_i) \end{aligned}$$

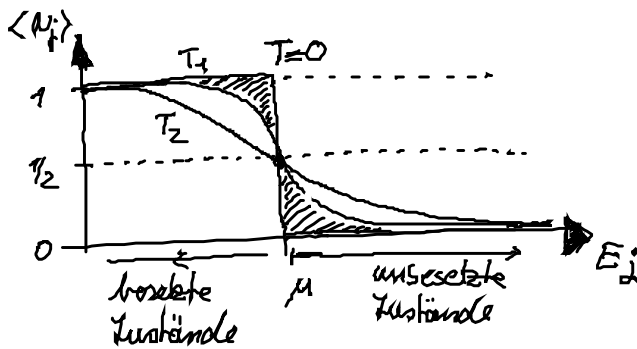
$$\langle N_i \rangle = \frac{\partial \psi_i}{\partial \alpha} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_i$$

numeriert
Energiezustände

$$= \frac{t_i}{1 + t_i} = \frac{1}{t_i^{-1} + 1}$$

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} + 1}$$

Fermi-Verteilung



$T_2 > T_1$

$T \rightarrow 0: \langle N_i \rangle \rightarrow \Theta(\mu - E_i)$ Stufenfunktion
(Quantenlimites)

$T > 0$: „Aufweichungszone“ bei $E_i = \mu$ der Breite $\approx kT$

$E_i - \mu \gg kT$ (hohe Energie): $\langle N_i \rangle \approx e^{\frac{-(E_i - \mu)}{kT}}$

klass. Grenzfall

(Maxwell-Boltzmann
Verteilung)

Thermische Zustandsgleichung

$$pV = kT \ln \Xi = kT \sum_{j=1}^L \ln \Xi_j = kT \sum_{j=1}^L \ln(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_j)})$$

Energie und Zustandsdichte freier Teilchen

• Energie-Eigenwerte $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ \underline{k} Wellenvektor

• Zustandsdichte freier Teilchen

System sei im Würfel $V = L^3$ eingeschlossen

Zykl. Randbedingungen $\psi_{\alpha}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ $k_{\alpha}L = 2\pi n_{\alpha}$

$$(n_{\alpha} = \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$(\alpha = 1, 2, 3)$$

1 Zustand im k -Raum beansprucht das „Volumen“

$$(\Delta k)^3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (\text{ohne Spin!})$$

Im thermodyn. Limes (großes V)

Übergang $\sum_j \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$

mit $p = \hbar \underline{k}$

$$\sum_j \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p$$

Spinentartung (Spin s): $(2s+1)$ fach entartet

Kugelsymm.

$$\sum_i \rightarrow (2S+1) \frac{V}{h^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 dp$$

Zu berechnen:

$$\ln \Xi = \sum_j \ln(1 + e^{\beta\mu} e^{-\beta E_j}) \quad \left[\begin{array}{l} \text{Fugazität} \\ \gamma = e^{\beta\mu} \end{array} \right]$$

$$\approx (2S+1) \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \ln\left(1 + \gamma e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}\right)$$

$\hookrightarrow pV = kT \ln \Xi$ to be continued...