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 $\quad |a_1, a_2, \dots, a_N\rangle$

a_1 = Satz von 1-Teilchen-Quantenzahl

Permutationsoperator $\quad \hat{P}_{(ij)} |a_1 \dots a_i \dots a_j \dots a_N\rangle = |a_1 \dots a_j \dots a_i \dots a_N\rangle$

vertauscht

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

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

$$P_{(ij)} \psi = \lambda_{ij} \psi$$

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

$$\Rightarrow \boxed{\lambda_{ij} \pm 1}$$

Charakteristikum des Zustandes bzw. der Teilchensorte

2-Teilchen-System

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

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

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

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

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

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

N – Teilchensystem

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

$\hat{P}_{(ij)} \longleftrightarrow \hat{P}_{(kl)}$ i.a. kommutieren nicht

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

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

	Bosonen	Fermionen
Zustände	symm.	antisymm.
Spin	ganzzahlig $s = 0, 1, 2 ..$ Bsp. Photonen, Phononen, ^4He	halbzahlig $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, ...$ Bsp. Elektronen, Proton, Neutron, ^3He
Statistik	Bose - Einstein	Fermi - Dirac
Hilbertraum	$\mathcal{H}_N^+ = \hat{S}\,\mathcal{H}_N = \frac{1}{N!}\sum_{\varsigma=1}^{N!} \hat{P}_{(\varsigma)}\,\mathcal{H}_N$ ς-te Permutation von $(1 ...... N)$	$\mathcal{H}_N^- = A\,\mathcal{H}_N = \frac{1}{N!}\sum_{\varsigma=1}^{N!} (-1)^P\,\hat{P}_{(\varsigma)}\,\mathcal{H}_N$
Besetzungzahl N_j "EW des Besetzungszahl-operators"	$0, 1, 2, ...$	$0, 1$ Pauli - Prinzip: Wellenfkt. total antisymm. $\Rightarrow$ 2 identische Fermionen können nicht im gleichen Einteilchenzustand sein

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

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

Ideales Gas (WW-freie, identische Teilchen):
Übergang zur Besetzungszahldarstellung

$$|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle \longrightarrow |N_1 \dots N_i \dots N_e\rangle \hat{=} |\alpha\rangle$$

Teilchen Nr. 1 im 1-Teilchenzustand α

Besetzungszahl des 1-Teilchen Zustands $|i\rangle$

5.2. Das ideale Fermigas

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

großkan. statistischer Operator

$$\hat{\varrho} = \Xi^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$$

P_α Wahrscheinlichkeit das System im Vielteilchenzustand $|\alpha\rangle$ zu finden, wobei $E_\alpha^{ges} = \sum_{j=1}^{e} E_j N_j$

E_j 1-Teilchen Energie

N_j Besetzungszahl

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

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

großkan. Zustandssumme:

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

$\Big\downarrow$ da e-Fkt. faktorisiert

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

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

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

$$p(N_1, \dots N_\ell) = \prod_{j=1}^{\ell} \frac{t_j^{N_j}}{(1 + t_j)} = \prod_{j=1}^{\ell} p(N_j)$$

separiert!

Wahrscheinlichkeit, das System mit der Besetzung $N_1, N_2 \dots$ zu finden.

Mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchen-Zustand E_j:

Wegen $N_j = 0, 1, \dots$ gilt $\underbrace{\langle N_j \rangle = p(N_j = 1)}_{\text{gilt nicht für Bosonen!}} = \frac{t_j}{1 + t_j}$

Andere Ableitung:

aus $p(N_j) = e^{\Psi_j - \beta E_j - \alpha N_j}$

$\alpha = -\beta\mu$

$$\langle N_j \rangle = \frac{\partial \Psi_j}{\partial \alpha} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \mu}\ln \Xi_j$$

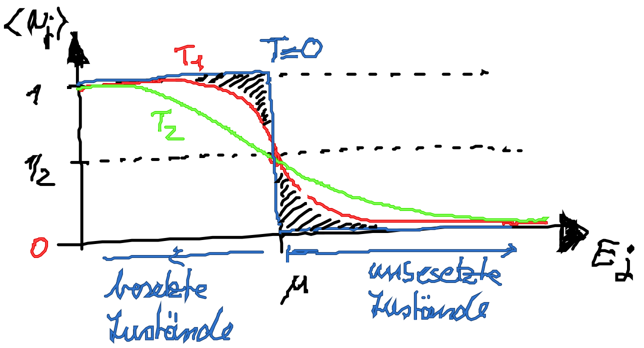
$\Psi_j = -\ln \Xi_j$
$= -\ln(1+t_j)$

numeriert Energiezustände

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

$$\boxed{\langle N_j \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_j-\mu}{kT}}+1}}$$

Fermi-Verteilung



$T_2 > T_1$

$T \to 0$: $\langle N_j \rangle \longrightarrow \Theta(\mu - E_j)$ Stufenfunktion (Quantenlimes)

$T > 0$: „Aufweichungszone" bei $E_j = \mu$ der Breite $\approx kT$

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

klass. Grenzfall

(Maxwell-Boltzmann Verteilung)

Thermische Zustandsgleichung

$$pV = kT \ln \Xi = kT \sum_{j=1}^{\ell} \ln \Xi_j = kT \sum_{j=1}^{\ell} \ln\left(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_j)}\right)$$

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 $\psi_j(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{r}}$ $k_\alpha L = 2\pi n_\alpha$

$(n_\alpha = \pm 1, \pm 2, \ldots)$

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

1 Zustand im k-Raum beansprucht das „Volumen"

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

Im thermodyn. Limes (großes V)

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

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

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

Spinentartung (Spin $\hbar S$): $(2S+1)$ fach entartet

Kugelsymm.

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

<u>zu berechnen:</u>

$$\ln \Xi = \sum_j \ln\left(1 + e^{\beta\mu} e^{-\beta E_j}\right) \qquad \begin{bmatrix}\text{Fugazität} \\ \zeta = e^{\beta\mu}\end{bmatrix}$$

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

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