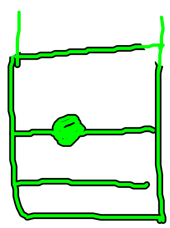
2 Grundschema einer statistischen Beschreibung

2.1. Quantentheoretischer Zugang

Gase, Festkörperelektronen etc. befinden sich in Kästen

2.1.1. Einteilchenzustände



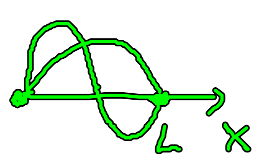
Kasten mit ∞ hohen Wänden

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{Kasten}$$

Zustände

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right)$$

(n_x, n_y, n_z)



L ist die Länge

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

(n_x, n_y, n_z) $\qquad n_x, n_y, n_z : 1, 2, 3 \dots \infty$

Diracschreibweise $\quad \varphi_n(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} \,|\, n \rangle \longrightarrow |n\rangle$

Darstellg. $\quad$ Quantenzahl

$$|n\rangle = |n_x, n_y, n_z\rangle$$

interessant ist $L \to \infty$, großer Kasten

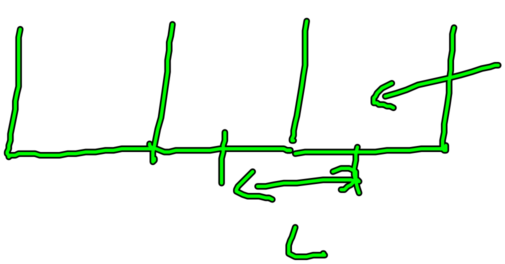
2.1.2. Großer Kasten, dichtliegende Zustände

typischerweise makroskop. Systeme

makroskopische Länge L

Idee: Rechng. zu vereinfachen, weil Randbedingungen nicht so wichtig sind, daher: egal welche RB.

einfachster Ansatz: periodische RB



freie Teilchen mit: $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{L})}$

Wellenfkt.

$$\vec{L} = (L, L, L)$$

$m_i = \pm 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$

$$\to e^{i\vec{k}\cdot\vec{L}} = 1 \to k_i = \frac{2\pi}{L} m_i$$

gilt f.

bestimmte $k_i = (k_x, k_y, k_z)$

$\rightarrow$ Quantisierung für die k's:

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L} \longrightarrow \Delta^3 k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$$

$\uparrow$ Abstand zwischen 2 benachbarten k-Werten.

Später müssen wir Zustandssummen ausrechnen

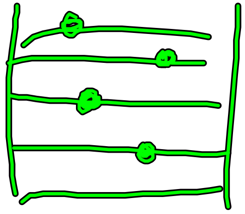
$$\sum_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta^3 k}{\Delta^3 k} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{\vec{k}} \Delta^3 k \Rightarrow \underbrace{\sum_{\vec{k}} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k}_{\substack{L \to \infty \\ \Delta k \to 0}}$$

$\uparrow$ summe über alle mögl. Zuständen, summiert über die mögl. k-Werte

$$\Delta^3 k = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$$

2.1.3. Vielteilchenzustände

zunächst: jedes bekommt jedes Teilchen in Kasten ein Index i „i-tes Teilchen"



Modelle <u>nichtwechselwirkender</u> Teilchen.

z.B. Coulomb-WW $\rightarrow 0$

Wie kann man Zustände beschreiben:

- Teilchenzahl N (wie viele haben wir?)
- Konfiguration $n = \{ n_x(i), n_y(i), n_z(i) \}$

$\uparrow$ Quantenzahl der Teilchen

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{Kasten}}$$

Summe über alle Teilchen

$$H \Psi_{nN} = E_{nN} \Psi_{nN}, \quad \Psi_{nN}(\{\vec{r}_i\})$$

Lösg. für nicht-WW Teilchen:

$$\Psi_{nN} = \varphi_{n(1)}(\vec{r}_1)\, \varphi_{n(2)}(\vec{r}_2) \dots \varphi_{n(N)}(\vec{r}_N)$$

1 Teilchen in Kasten

(gilt vorläufig!)

$$E_{kin} = \sum_i \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL} \left(n_x^2(i) + n_y^2(i) + n_z^2(i) \right)$$

Für nichtww Teilchen sind Produkte der Einteilchenlösungen die Lsg. für die Wellenfunktion und die Energie sind die Σ der Einteilchenenergien.

<u>aber</u>: Bahnkurven sind aber nicht wohldefiniert (QM)

daher bei Wellenfunktion überhaupt keine Nummerierung mögl.! kann repariert werden:

Fordg. an Wellenfkt:

Koordinaten 2er Teilch. austauschbar ohne eine Ändg. v. Observable, insbesondere Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\left| \psi(x_1 \cdots x_i \cdots x_j \cdots x_N) \right|^2 =$$

$$\left| \psi(x_1 \cdots x_j \cdots x_i \cdots x_N) \right|^2 \quad (*)$$

$x_i = (\vec{r}_i, \vec{s}_i)$, wobei Spinkoord. s_i eingeführt das kann sicher gestellt werden durch:

$$\boxed{\Psi(x_1 \cdots x_i \cdots x_j \cdots x_N) = \pm \Psi(x_1 \cdots x_j \cdots x_i \cdots x_N)}$$

beide erfüllt (*)

Wellenfunktion sind symmetrisch oder antisymm. wenn 2 Koordinaten vertauscht werden.) symm: $+$, antisymm: $-$

Spin-Statistik Theorem v. Pauli

- Fermionen sind Teilchen mit halbzahligem Spin und erfüllen die Antisymmetriebedingung $(-)$ Elektronen, Quarks, Neutronen

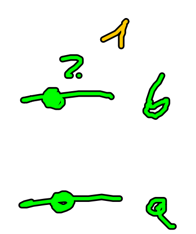
- Bosonen sind Teilchen mit ganzzahligem Spin und erfüllen die Symmetriebedingung. $(+)$ Atome (He^4), α-Teilchen, Cooperpaare Photonen, Phononen

die Welt zerfällt in 2 Klassen v. Teilchen

an Beispiel symmetrisieren der Wellenfunktion:

2 Teilchen: (vorläufig!)

$$\Psi = \varphi_a(x_1)\,\varphi_b(x_2)$$



a, b : Kastenzustände, Teilchen Koordinaten x_1, x_2 $\quad {}^1{}_2$

wenn man diese tauscht $x_1 \leftrightarrow x_2$ hat man eine

andere Wellenfunktion u. andere $| \ |^2$

<u>separieren und Ansatz :</u>

$$\psi_{F/B} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_a(x_1) \, \varphi_b(x_2) \mp \varphi_a(x_2) \, \varphi_b(x_1) \right)$$

Normierg. sichergestellt, wenn man von bereits normierte

Einteilchenwellenfkt. ausgeht.

<u>Interpretation</u> : • wenn $a = b$ — $\rightarrow$ existiert nicht f. F, denn 0

$\rightarrow$ 2× WF für B, existiert

$\rightarrow$ 2 Fermionen können nicht in ein und denselben Zustand

sein, bei Bosonen geht das (Bose-Einstein-Kondensation)

<u>Allgem. Formel f. Symmetrisierg.</u> :

$$\psi_F = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum \operatorname{sign}(P) \; P \left(\varphi_{n_1}(x_1) \cdots \varphi_{n_i}(x_i) \cdots \varphi_{n_N}(x_N) \right)$$

über alle Permutationen — Vorzeichen der Permutation — Permutation der Koordinaten

$$\Psi_B = \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{\sqrt{\prod_i^k N_i!}} \sum_P P\left(\varphi_{n_1}(x_1) \cdots \varphi_{n_i}(x_i) \cdots \varphi_{n_N}(x_N)\right)$$

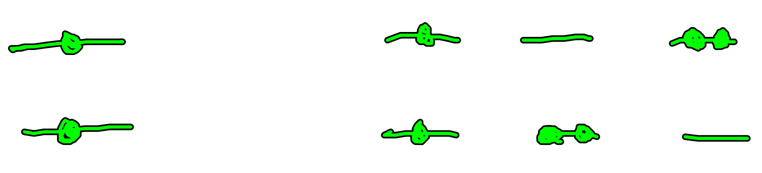
Sind in Ψ_B $k < N$ verschied. Orbitale besetzt, so steht N_i für die Zahl der Teilchen die sich im i-ten Orbital befinden

Bsp: $\Phi_7 = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{3!}} \frac{1}{\sqrt{2!}}}_{\frac{1}{\sqrt{12}}} P\left(\varphi_{n_1}(x_1)\, \varphi_{n_4}(x_2)\, \varphi_{n_4}(x_3)\right)$

$N_i = 2$

im 4. Orbital sind 2 Teilchen

Bsp für Fermi. / Bose f. 2 Teilchen



1 3

aus der unterschiedlichen Zahl der Zustände
wird unterschiedliche makroskopische
Eigenschaft begründet (später!)

etwas abstrakter in Diracschreibweise

$$|n\rangle_F = |N_1, N_2, N_3 \dots\rangle \qquad (N_i = 0, 1)$$

Zahl der Teilchen in erstem Zustand usw

$$|n\rangle_B = |N_1, N_2, N_3 \dots\rangle \qquad (N_i = 0, 1, 2, 3 \dots)$$

Bemerkung: • Fermion. Wellenfkt. können über Slaterdeterminante dargestellt werden

$$\Psi_F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) \end{vmatrix}$$

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}$$

• Bosonen: masselose und massive Bosonen

$\partial_\nu H = 0$ $\qquad\qquad$ $\partial_\nu H \neq 0$

Phonon $\qquad\qquad$ Abomon System

Photon