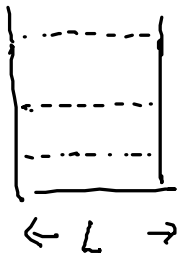


## 2. Vielteilchen Zustände nicht wechselwirkender Teilchen

- Gase, Festkörperschleifen, etc. befinden sich typischerweise in eingeschlossener Geometrie (Kasten)
- Keine WW heißt keine Coulomb-WW, Stöße, etc.  
(später)

### 2.1. Einteilchenzustände im Kasten



Kasten mit  $\infty$  hohen Wänden  
QM-Problem aus QM I

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_{\text{Kasten}} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{Kasten}} \quad i = x, y, z$$

Kastenpotential, wird über Randbedingungen realisiert:

Wellenfunktion verschwindet auf Rand

QM I

Zustände:

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

1 Dimension

Produktansatz weil  $H$  in  
Summand zerfällt (Separation)

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

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$$

$$n \rightarrow \vec{n} = (n_x, n_y, n_z) \equiv \underline{\underline{n}}$$

Diracschreibweise  $\psi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n \rangle \rightarrow |n\rangle$

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

## 2.2. Große Kasten: dicht liegende Zustände

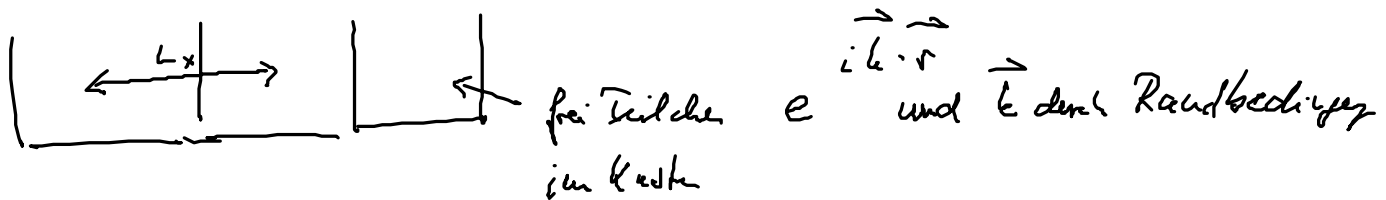
typischerweise makroskopisches System,  $L$  groß

Idee: Rechnung vereinfachen durch günstige Randbedingungen

Hoffung: RB spielt f. große Kästen keine Rolle,

Ergebnisse sollten nicht davon abhängen

→ einfacher Ansatz: periodische RB



Fordg. an Periodizität:  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \stackrel{!}{=} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{L})}$

in all Kästen passiert dasselbe

→ →

$$\downarrow e^{i\vec{k}\cdot\vec{L}} = 1 \text{ mit } \vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

$$\downarrow \text{gilt nur für } \vec{k}\cdot\vec{L} = m \cdot 2\pi$$

↑  
ganze Zahl :  $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$

$$\downarrow \text{wähle } k_i = \frac{2\pi}{L_i} m_i$$

$i = x, y, z$

Man rechnet also mit eben Wellen im Kasten,  
läßt aber nur bestimmte  $\vec{k}$ -Werte zu

gilt ausnutzen der Kastengröße  $L \rightarrow \infty$   
zum späteren „Zustandszähler“

$$\Delta k_i = \frac{2\pi}{L_i} \text{ ist Abstand zwei ungl. } k_i\text{'s}$$

.....

$k$ 's - Zähler : nicht über Summe sondern Integral

$$\sum_{\vec{k}} \text{ mit } \sum_{\vec{k}} \hat{=} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z}$$

$$\sum_{\vec{k}} \frac{\Delta^3 k}{\Delta^3 k} = \frac{1}{\Delta^3 k} \sum_{\vec{k}} \Delta^3 k = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \int d^3 k$$

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

$$L \rightarrow \infty, \Delta k \rightarrow 0$$

$$L \cdot \Delta k = \text{konstant}$$

analytische Vereinfachung: Bestimmung v. Integralen an Stelle  
von Summen (für große  $K$ !)

### 2.3. "klassische" Vielteilchenzustände im Kasten

- vorläufig "klassische" Teilchen im Sinn:
  - jedes Teilchen bekommt einen Index  $i$  (hat damit Namen)
- Sind unterscheidbar, später in QM verboten:  
weil identische Teilchen mit Wellenfunktion überlappen  
nicht unterschieden werden können

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \underbrace{V_{\text{Kasten}}}_{\text{periodischer RB}} \rightarrow \text{eben Wellenf. f. die einzelnen Teilchen mit period. RB, weil Probleme separabel}$$

Anzahl d. Teilchen  $N$

$$H \psi_{Nn} = E_{Nn} \psi_{Nn} \quad \text{mit} \quad \psi_{Nn} = \psi_{Nn}(\{\vec{r}_i\})$$

Anzahl Teilchen  $\swarrow$   $\nwarrow$  Anzahl Zahlen  $\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{als Vielteilchenwellenfunktion}}$

$\swarrow$  gilt vorläufig

Produktzustand:  $\psi_{Nn} = \psi_{n(1)}(\vec{r}_1) \psi_{n(2)}(\vec{r}_2) \dots \psi_{n(N)}(\vec{r}_N)$

Summe der Energien:  $E_{Nn} = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2(i) + n_y^2(i) + n_z^2(i))$

weil im Produktzustand die Ununterscheidbarkeit gegeben,  
müß der Ansatz repariert werden (Balken können vertauscht sein).

## 2.4. Symmetrie f. Vielteilchenwellenfunktionen in der QM

Forderung an die Wellenfunktion identischer Teilchen,  
so daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  
sich nicht verändert, wenn 2 Teilchenkoordinaten ausgetauscht werden

$$|\psi(x_1, \dots, \overbrace{x_i, x_j}^{\text{ausgetauscht}}, \dots, x_N)|^2 \stackrel{!}{=} |\psi(x_1, \dots, x_j, x_i, \dots, x_N)|^2$$

Koordinate:  $(\vec{r}_i, \vec{s}_i) = x_i$   
Ort  $\nearrow$  Spin d. i-ten Teilchens  $\nwarrow$

kann sichergestellt werden durch:

$$\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = \pm \psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)$$

+  $\hat{=}$  symmetrische Wellenfunktion

-  $\hat{=}$  antisymmetrische Wellenfunktion

## Spin-Statistik Theorem v. Pauli

• Fermionen sind Teilchen mit halbzahligen Spin und

erfüllt immer die Antisymmetrisierung (-)

(Elektronen, Neutronen, Quarks)

• Bosonen sind Teilchen mit ganzzahligen Spin und

erfüllt immer die Symmetrisierungsbedingung (+)

( $\alpha$ -Teilchen, Cooperpaar, Photonen, Phonon,  $He^4$ )

die Welt erfüllt in 2 Arten v. Teilchen die verschiedene Eigenschaften in der Statistik haben (spins)

Bsp. f. 2 Teilchen:  $\longrightarrow$  b Teilchen  
① + ② sind zu verteilen  
 $\longrightarrow$  a auf 2 Zustände a, b

$$\psi_{\text{klassisch}} = \varphi_a(x_1) \varphi_b(x_2)$$

reparieren mit Ansatz:

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

(Fermion / Boson)  $\uparrow$  stellt Normierung sicher  $\uparrow$  stellt (Erweiterung) Symmetrisierung / Antisymmetrisierung sicher

Interpretation:

$a = b$  beide Teilchen im selben Niveau

Fermion:  $\psi_F = 0 \rightarrow$  Pauliprinzip

Boson:  $\psi_B =$  positive Interferenz = Verstärkung  
 $\rightarrow$  Boson "möge" es, in denselben Zustand zu sein

Allgemeine Formel f. Symmetrisierung / Antisymmetrisierung:

$$\psi_F = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{über alle Permutationen } P} \text{sign}(P) P(\psi_{u(1)}(x_1) \dots \psi_{u(i)}(x_i) \dots \psi_{u(N)}(x_N))$$

Normierung des WF  
 über alle Permutationen  $P$   
 Vorzeichen von  $P$   
 Permutation der Teilchenkoordinaten  
 gerade Zahl u. Vertauschungen "+"  
 ungerade "-"

$$\psi_B = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \frac{1}{\sqrt{\prod_k N_k!}} P(\psi_{u(1)}(x_1) \dots \psi_{u(i)}(x_i) \dots \psi_{u(N)}(x_N))$$

" $\prod$ " ist Produktzeichen

$\rightarrow$  Sind in  $\psi_B$   $K$  verschiedene Orbitale  $\{u(i)\}$  beteiligt,  
 so steht  $N_i$  f. die Zahl der Teilchen im  $i$ -ten Orbital:

Bsp:  $\phi_B = \frac{1}{\sqrt{3!}} \frac{1}{\sqrt{1!2!}} \sum_P (\varphi_a(x_1) \varphi_b(x_2) \varphi_b(x_3))$

$\frac{1}{\sqrt{3!}}$   $\frac{1}{\sqrt{1!2!}}$   $\sum_P$   $\varphi_a(x_1)$   $\varphi_b(x_2)$   $\varphi_b(x_3)$

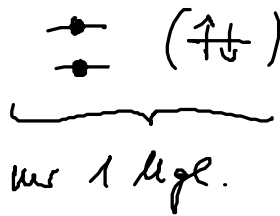
$\frac{1}{\sqrt{12}}$   $N_a = 1$   $N_b = 2$

Orbitale hat 1 Teilchen  $N_a = 1$    
 Orbitale hat 2 Teilchen  $N_b = 2$

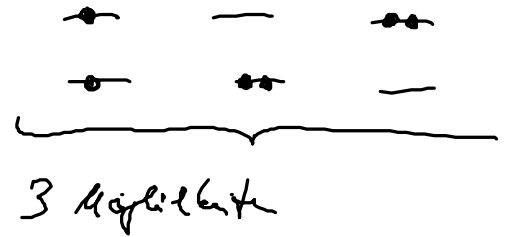
Bemerkung:

a) Zahl d. mögl. Zustände  $\mathcal{H}_F / \mathcal{H}_B$  ist f. Fermion / Boson unterschiedlich, am Bsp. 2 Teilchen, 2 Zustände

Fermion:



Boson:



Später wird daran unterschiedliche Eigenschaften begründet

b) Darstellung d. Vielteilchenzustand in Dirac:

$$|n\rangle_{F/B} = |N_1, N_2, N_3, \dots\rangle$$

in Zustand  $n(i) \equiv n_i$  gibt es  $N_i$  Teilchen

$N_i = 0, 1$  f. Fermionen

$N_i = 0, 1, 2, 3, \dots$  f. Bosonen



c) Fermion wellenfunktion können Slaterdeterminanten dargestellt werden

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

$$\psi_F(x_1 \dots x_i \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(x_1) & \varphi_{n_2}(x_2) & \dots & \varphi_{n_N}(x_N) \\ \varphi_{n_2}(x_1) & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \varphi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

d) Boson  $\rightarrow$  masselos  $\partial_N H = 0$   
 $\rightarrow$  massiv  $\partial_N H \neq 0$