III. Quantenstatistik

III.1 Symmetrien

Betrachte System aus N quantenmechanischen Teilchen

→ Zustand des Systems wird durch Wellenfunktion

$$\psi(q_1, \ldots, q_N) = \psi(1, 2 \ldots N) \text{ beschrieben}$$

↑ Teilchenkoordinaten

Betrachte ununterscheidbare Teilchen (z.B. Elektronen)

Folgerung:

- Physikalische Größen wie Aufenthaltswahrscheinlichkeit und Gesamtenergie E müssen invariant gegenüber Teilchenaustausch sein! $i \leftrightarrow j$

Konsequenzen:

Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(1, \ldots i, \ldots j, \ldots N)\, \psi^*(1, \ldots, i, \ldots j \ldots N)$

$$\stackrel{!}{=} \psi(1, \ldots j \ldots i \ldots N)\, \psi^*(1, \ldots j, \ldots i \ldots N)$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(1, \ldots j, \ldots i \ldots N) = \pm \psi(1, \ldots i, \ldots j \ldots N)} \quad (*)$$

Führe Austausch-Operator ein

$$\hat{P}_{ij}: \psi(1, \dots i, \dots j \dots N) = \psi(1, \dots j \dots i, \dots N)$$

$$= \lambda_{1,2}\, \psi(1, \dots i \dots j \dots N)$$

Man sagt: Die N-Teilchen-Wellenfunktion ist eine Eigenfunktion des Austauschoperator mit den Eigenwerte

$\lambda_1 = 1$ "total symmetrische Zustände"

$\lambda_2 = -1$ "total antisymmetrische Zustände"

- Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion ist Eigenschaft der zugehörigen Teilchen

- Es gibt Zusammenhang zwischen Symmetrie und dem Spin ("Spin-Statistik-Theorem" von Pauli)

  - Teilchen mit halbzahligen Spin haben antisymmetrische Wellenfkt.

    "Fermionen" $\left(S_z = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \dots\right)$

    z.B. e^-, Proton, Neutron, Myon ^3He,

- Teilchen mit ganzzahligem Spin haben symmetrische Wellenfkt.

"Bosonen" $(s_z = 0, 1, \dots)$

z.B. Photon, π-Meson
$(s_z = 1)$ $(s_z = 0)$

- Der Symmetriecharakter ist eine Erhaltungsgröße

d.h. $[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0$ $\hat{H}\psi(1 \dots i, \dots j, N) = E\psi(1 \dots N)$

III.2. Symmetrie und Besetzung von Quantenzuständen

Sowohl für Fermionen als auch für Bosonen gilt

Der Zustand des Gesamtsystem kann, außer durch die Gesamt-Wellenfunktion ψ, auch durch die Angabe der Besetzungszahlen n_α der "Einteilchenzustände" ψ_α charakterisiert werden, also durch

$$(\{n_\alpha\}) = (n_1, n_2 \dots)$$ "Besetzungszahl-Darstellung"

Es gilt $\sum_\alpha n_\alpha = N$ Gesamtteilchenzahl

$$\sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha = E \qquad \text{Gesamtenergie}$$

Energie des Einteilchenzustand

Summe statt Integral
da Energiezustände in der QM diskret verteilt sind !!

Unterschied zwischen Fermionen & Bosonen

Bosonen → total symmetrische Wellenfunktion

→ $n_\alpha = [0, N]$ für alle α

Fermionen → total antisymmetrische Wellenfunktion ("Slater-Determinante")

Impliziert, dass jeder Quantenzustand **höchstens einmal** besetzt werden kann

$n_\alpha = [0,1]$ für alle α

III.3. Großkanonische Zustandssumme

Zunächst: kanonische Zustandssumme

$$Z_K = \sum_j e^{-\beta E_j} \qquad \text{mit} \quad E_j = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha$$

Summe über mögliche Energiezustände des Gesamtsystem

$$Z_K = \sum_{\{n_\alpha\}} e^{-\beta \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha}$$

Summe über alle möglichen Sätze $\{n_\alpha\}$
so, dass immer die Nebenbedingung $\sum_\alpha n_\alpha = N$ erfüllt ist!!
$\swarrow$
schwer zu handhaben

Daher besser großkanonisch, wo N nicht fest ist!

$$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z_K(N)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} e^{-\beta \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha}$$

benutze $N = \sum_\alpha n_\alpha$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\}} e^{-\beta\left(\sum_\alpha (\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha\right)}$$

$$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\}}^{*} \prod_\alpha e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha}$$

Beachte nun:

Da in Z_{GK} über alle Teilchenzahlen N summiert wird
können die Summen über die Besetzungszahlen auch <u>unabhängig</u> voneinander durchgeführt werden!

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

$$= \sum_{n_1=0}^{n_1^{max}} \sum_{n_2=0}^{n_2^{max}} \cdots\cdots \prod_\alpha e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha}$$

Fermionen $n_i^{max} = 1$

Bosonen $n_i^{max} = \infty$!

Beachte nun:

Summation und Produkt in Z_{GK} können vertauscht werden.

Zeige das explizit für Fermionen:

$x_\alpha^{n_\alpha} = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu) n_\alpha}$

$$\sum_{\{n_\alpha\}} \prod_\alpha x^{n_\alpha} = \sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_2=0}^{1} x_1^{n_1} x_2^{n_2} = 1 + x_1 + x_2 + x_1 x_2$$

$$\prod_\alpha \sum_{\{n_\alpha\}} x^{n_\alpha} = (1+x_1)(1+x_2) = 1 + x_1 + x_2 + x_1 x_2$$ q.e.d

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

Auswertung für Fermionen:

$n_\alpha = 0, 1$

$$\Rightarrow Z_{GK} = \prod_\alpha \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}\right)$$

Bosonen

$n_\alpha = 0, 1 \ldots \infty$

Annahme $e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} < 1 \iff \mu < \varepsilon_\alpha$ für alle Zustände α

In diesem Fall ist die Summe in Z_{GK} eine geometrische Reihe d.h.

$$\lim_{n \to \infty} \sum_{k=0}^{n} x^k = \frac{1}{1-x} \qquad \text{mit } x = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} < 1$$

$$Z_{GK}^{\text{Bosonen}} = \prod_\alpha \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}\right)^{-1}$$

$\Rightarrow$ Großkanonisches Potenzial

$$J = -kT \ln Z_{GK}$$

$$= \pm kT \sum_\alpha \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}\right)$$

oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres " Fermionen

III.4. Statistiken, thermodynamische Größen

betrachte die mittlere Besetzungszahl des Zustandes mit Energie ε_α

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

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

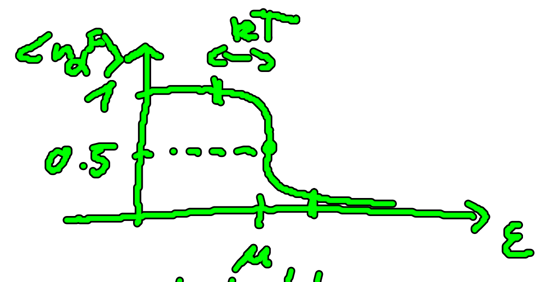
beachte: Nur Term mit $\alpha = \alpha'$ trägt bei, Rest kürzt sich heraus wegen der Produkte in Zähler und Nenner!

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

Fermionen $n_\alpha = 0, 1$

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

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



Fermi-Dirac Statistik

Bosonen: $n_\alpha = 0, 1, 2, \ldots, \infty$

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

$$=$$

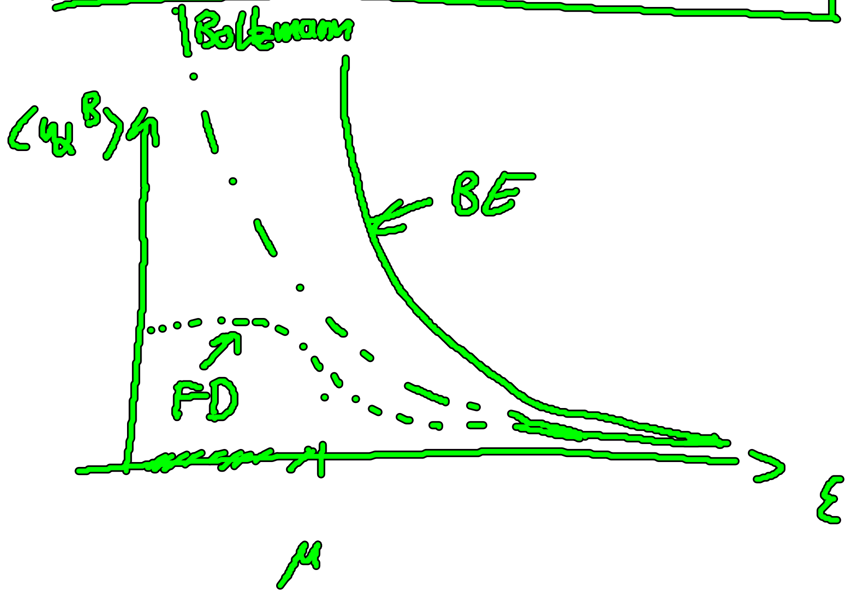
$$= -\frac{\partial}{\partial y} \ln \underbrace{\sum_{n_\alpha=0}^{\infty} \left(e^{-y}\right)^{n_\alpha}}_{\substack{\text{Konvergente geometrische Reihe} \\ \text{falls } e^{-y}<1 \iff \mu<\varepsilon_\alpha}} \qquad \text{mit } y=\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)$$

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

$$= \frac{1}{1-e^{-y}}\left(-e^{-y}\right)(-1) = \frac{e^{-y}}{1-e^{-y}}$$

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

"Bose-Einstein-Statistik"



$\mu < \varepsilon_\alpha$

Weitere Größen

mittlere gesamt-Teilchenzahl $\langle N \rangle = \sum_\alpha \langle n_\alpha \rangle$

$$= \sum_\alpha \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} \mp 1}$$

oberes Vorzeichen BE
untere " FD

mittlere Energie:

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

Entropie

$$S = -\left.\frac{\partial J}{\partial T}\right|_{\mu, V} \quad \ldots.$$