

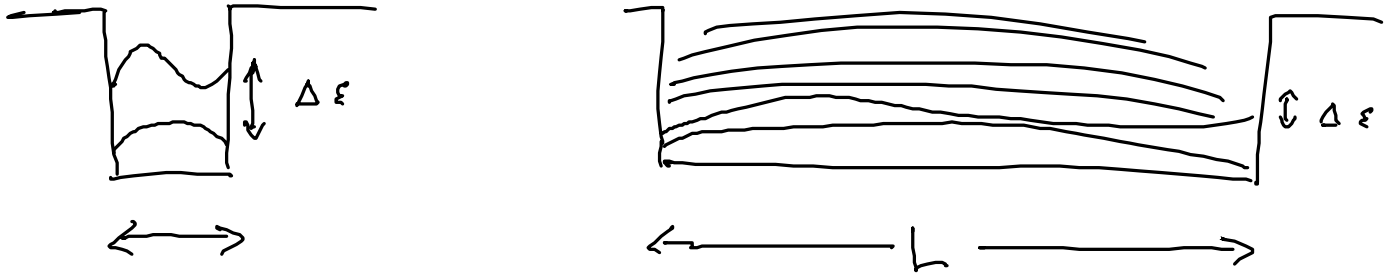
2. Grundlagen der statistischen Beschreibung

2.1. Quanten theoretischer Zugang

2.1.1. Einteilchen zustände in Kasten

Betrachte Gas, also Teilchen in Kasten, auch sogl.

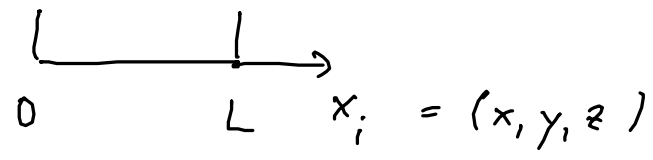
Modell für Festkörper:



L : Kastenlänge
 $V = L^3$ (Volumen)

Die Dichte des Energielevels ist bestimmt durch L .

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{Kasten}}(\vec{r}) \quad \text{f. } \infty \text{ hohe Wände}$$



Einfachfunktionen

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

$$n = (n_x, n_y, n_z) ; n_i = 1, 2, 3 \dots$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Dirac Schreibweise : Zustand nun durch Quanten -

Zahl charakterisiere $\psi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n \rangle \rightarrow |n\rangle$
↑
 3 Quantenzahl

2.1.2. Großer Kasten, dichtliegende den Zustände

in einem großen Kasten sollten die Randbedingungen nicht so wichtig sein, Modell für makroskopische Körper, nehmen periodische Randbedingungen:

$$\psi_n(x=0, y, z) = \psi_n(x=L, y, z) \quad \forall x_i$$

periodisch angeordnete Kästen übereinander

Ansatz: freie Teilchen im Kasten: $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

$$\rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{L})}, \quad \vec{L} = (L, L, L)$$

$$\rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{L}} = 1 \quad \text{wähle}$$

$$\rightarrow \text{für } \vec{k}_i = (k_x, k_y, k_z) : \quad k_i = \frac{2\pi}{L} n_i$$
↑

ganze Zahl

Damit sind die Quantenzahlen k_i

in große (makroskopischen) Kasten

festgelegt:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad k_i = \frac{2\pi}{L} n_i$$

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = \sum_i k_i \cdot x_i$$

man kann mit den ebenen Wellen besser als mit den Sinusfunktionen rechnen, weil:

man oft Quantenzahl bzw. Zustände zählen muss (wie in der klassischen Statistik beim Würfel = 6)

k 's zu zählen ist oft leichter als n 's:

$$\text{z.B.: } \sum_{\text{Zustände}} \stackrel{\triangle}{=} \sum_{k\text{'s}}$$

$$\sum_{\vec{k} \in 3\text{dim Raum}} = \sum_k \frac{\Delta^3 k}{\Delta^3 k} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_k \Delta^3 k \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3 k$$

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

Δk sind dicht $\sim \frac{1}{L} \rightarrow$ Integral

Summe über die k -Quantenzahlen werde also

so übersetzt:

$$\sum_k \stackrel{!}{=} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3 k \quad \text{günstiger zu berechnen!}$$

2.1.3. Vielteilchenzustände

Kasten mit viele Teilchen,

wo von wird Gesamtzustand abhängen?

- N -Teilchenzahl, • wie sind die Teilchen auf die Einteilchenzustände verteilt

\rightarrow um Quantenzahlen der Einteilchenzustände

vorwende wenn Wechselwirkungsfrei für

Hamiltonfunktion, Eigenwertproblem:

$$H = \sum_i H_i \quad ; \quad H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{Kash}}(\vec{r}_i)$$

i - Teilchennummer

$$H \psi_{n,N}(\{\vec{r}_i\}) = E_{n,N} \psi_{n,N}(\{\vec{r}_i\})$$

↑

↑

Quantenzahl n

alle Koordinaten

$n = (\dots)$

→ in einem nicht-w.w. System sind die Lösungen dem Produktzustand aus N Teilchen wellenfkt. gegeben, die Energie ist gegeben durch die

Summe aller beteiligten Zustände (Quantenzahlen)

N

$$E_{N,n} = \sum_{i=1}^n E_n(i)$$

↑
Teilchenenergie mit 3 Quantenzahlen

$$\Psi_{n,N}(\{\vec{r}_i\}) = \Psi_{n(1)}(\vec{r}_1) \Psi_{n(2)}(\vec{r}_2) \cdots \Psi_{n(N)}(\vec{r}_N)$$

(vorläufig!)

aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen sollte

$$|\Psi(X_1 \cdots X_i \cdots X_j \cdots X_N)|^2 =$$

$$|\Psi(X_1 \cdots X_j \cdots X_i \cdots X_N)|^2$$

die Invarianz von Messgrößen gegen Vertauschung von Teilchenkoordinaten gegeben sein

$$X_i = (\vec{r}_i, \vec{s}_i)$$

Das geht für:

$$\Psi(X_1 \cdots X_i \cdots X_j \cdots X_N)$$

$$= \begin{matrix} + \\ - \end{matrix} \Psi(x_1 \dots x_j \dots x_i \dots x_N)$$

Beide Lösungen werden realisiert und als
symmetrisch (+) bzw. antisymmetrisch (-)

bezeichnet:

- Fermionen (-) : antisymm. sind Teilchen mit halbzahligem Spin
- Bosonen (+) : symm. sind Teilchen mit ganzzahligem Spin

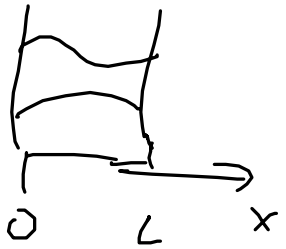
Spin-Statistik Theorem

(W Pauli 1940)

Das heißt: wenn man mit Vielteilchen System arbeitet
muß man immer die richtige Symmetrie
der Wellenfunktion gewährleisten.

(Klassik: Grenzfall beides $T \rightarrow \infty$)

2 Teilchen: $i = 1, 2$; $n = a, b$



vorläufig: $\Psi = \psi_a(x_1) \psi_b(x_2)$

erfüllt Schrödingergleichg., aber nicht Symmetrie

Symmetrie / Antisymmetrie wird durch

$$\Psi^{F/B} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \mp \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right)$$

↑ Normierungsfaktor

Sicher gestellt. ÜA: 3 Teilchen

Interpretation:

- In einem fermionisch System 2 Teilchen nicht in den selben Zustand sein können ($a=b$).

→ Pauliprinzip

- In einem bosonisch System kann man denselben

unber Teilchen in dem selbe Zustand haben

(besonderses Fall $k_i = 0 \Rightarrow$ Bose Kondensation)

\rightarrow völlig unterschiedliches Verhalten (!)

der makroskopisch Größe, weil die
mikroskopische Verteilungen anders sind.

- allgemein Ansatz für N -Teilchen:

$$Z_B = \frac{1}{N!} \frac{1}{\sqrt{\prod_k N_k!}} \sum_P \prod_{i=1}^N \psi_{a_i}(x_i)$$

\nearrow Teilzahl
wegen Normierung.

\downarrow wenn nur
die Orbital ψ_k

\nwarrow Summ über alle
Vertauschungen der Koordinaten
(Permutationen)

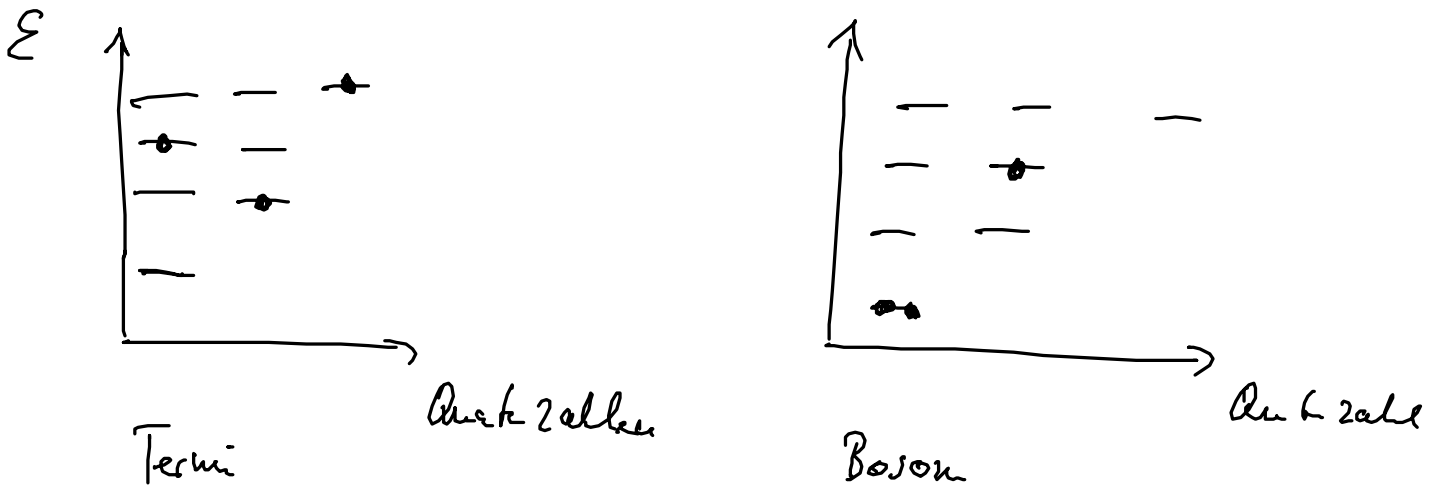
$K < N$ beschränkt weil unber Teilchen in
einem Orbital sitzen, sonst N_k für
die Zahl der Teilchen in dem Orbital

$$\Psi_F = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sign}(P) \Psi_{a_1}(x_1) \dots \Psi_{a_k}(x_k) \dots \Psi_{a_N}(x_N)$$

(-1) (Anzahl der Vertauschungen um die Permutation zu konstruieren)

sehr komplizierte Schreibweise: mehr Dirac Schreibweise für eine übersichtliche Darstellung.

Jeden möglichen Zustand als Konfiguration vorstellen



Aus einer Konfiguration kann man dann den Zustand im Diracbild schreiben:

$$\Psi_{a_N}(\{\vec{r}_i\}) = \langle \vec{r}_i | N, \psi \rangle \rightarrow |N, \psi\rangle$$

$|N, u\rangle = ?$ ist gekennzeichnet durch

1) die Gesamtteilchenzahl N

2) wo man die Teilchen sitzen hat u

$$|N, u\rangle = \left| \begin{array}{cccccc} n_1 & n_2 & n_3 & n_k & & n_N \\ N_1 & N_2 & N_3 & N_k & \dots & N_N \end{array} \right\rangle \equiv |N_1, N_2, \dots, N_N\rangle$$

n_k als QZ mit N_k Teilchen

Fermion: $N_k = 0, 1$

Boson: $N_k = 0, 1, 2, 3, \dots, N$

Bsp: 2 Fermion in 2 Zustandsystem $|1, 1\rangle$

2 Boson in 2 Zustandsystem $|1, 1\rangle, |0, 2\rangle, |2, 0\rangle$

\Rightarrow verschiedene Symmetrie / Spin ergibt verschiedene Zustandszahlen, die in Analogie mit klassischen Würfeln (6) die makroskopische Eigenschaften bestimmen

Es gibt 2 Sorten von Bosonen:

a) massive Bosonen: Masse-behaftet

- Atome, Moleküle, α -Teilchen

b) masselose Bosonen:

- Photon, Phononen, etc.

Quantenanregung von Feldern

man kann sich H anschauen:

$$\frac{\partial H}{\partial N} \neq 0 \rightarrow (a); \quad \frac{\partial H}{\partial N} = 0 \rightarrow (b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial N} \equiv \mu, \text{ chemisches Potential}$$

muß am Beispiel später klargestellt werden

masselose Bosonen: $\mu = 0$

masselohftige Bosonen: $\mu \neq 0$