

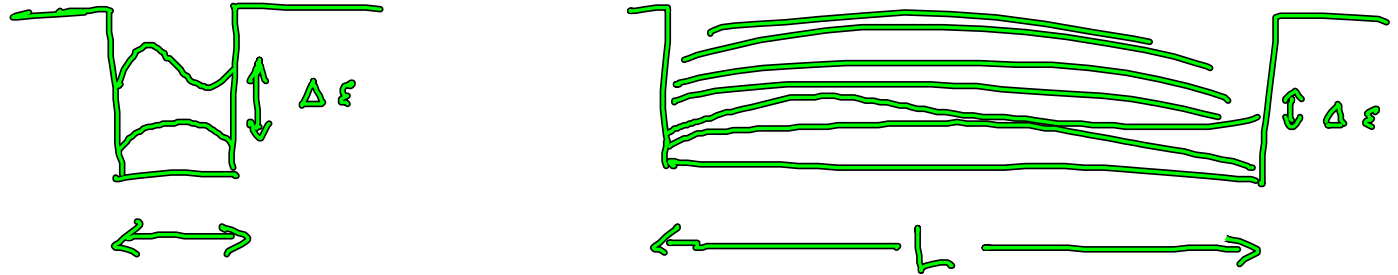
## 2. Grundlagen der statistischen Beschreibung

### 2.1. Quantitativer Zugang

#### 2.1.1. Einteilchenzustände im Kasten

Betrachte  $f$  Teilchen im Kasten, auch ungl.

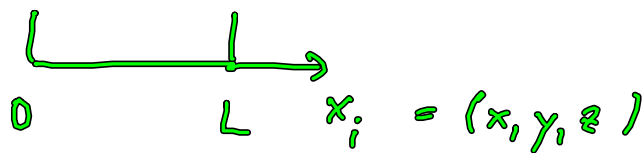
Modell für Festkörper:



$L$  : Kastenlänge  
 $V = L^3$  (Volumen)

Die Dichte des Energie niveaus 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 nur durch Quanten -

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

## 2.1.2. Große Kiste, distillieren der Zustände

In einer großen Kiste sollten die Randbedingungen  
nicht so wichtig sein, Modell für makroskopische  
Körper, nehmen periodische Randbedingungen:

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

periodisch angeordnete Kiste nebeneinander

Ansatz: freie Teilchen in Kiste:  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

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

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

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

↑

Damit sind die Quantenzahlen  $k_i$  ganze Zahl

in große (makroskopische) 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 eben erhaltenen Werten als  
mit den Sinusfunktionen rechnen, weil:

man oft Quantenzahl bzw Zustände zählen  
kann (wie in der klassischen Statistik beim Würfeln  
= 6)

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

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

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

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

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

Summe über die  $k$ -Quantenzahlen werde also

so übersetzt:

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

### 2.1.3. Vielteilchenzustände

Kasten mit viele Teilchen,

wovon wird Gesamtzustand abhängen?

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

$\rightarrow$  im Quantenzahlen der Einteilchenzustände

voraussetzungen wenn Wechselwirkungsfrei für

Hamiltonfunktion, Eigenwertproblem:

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

$i$  - Teilchen nummer

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



Quantenzahl  $n$

alle Koordinaten

$n = (0000)$

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

Summe aller besetzten Zustände (Quantenzahlen)  
 $N$

$$\varepsilon_{N,4} = \sum_{i=1} \varepsilon_n(i)$$

↑  
Teilchen energie mit 3 Quotenzeichen

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

( vorläufig! )

aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen sollte

$$|\psi(x_1 \dots x_i \dots x_j \dots x_N)|^2 =$$

$$|\psi(x_1 \dots x_j \dots x_i \dots x_N)|^2$$

die Invarianz von Messgröße gegen Vertauschung  
von Teilchen Koordinaten gegeben sein

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

Das gilt für :

$$\psi(x_1 \dots x_i \dots x_j \dots x_N)$$

$$= \pm \Psi(x_1 \dots x_j \dots x_i \dots x_N)$$

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

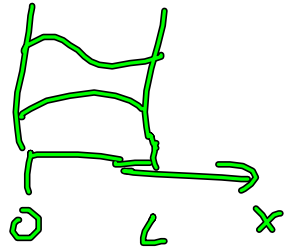
(W Pauli 1940)

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

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



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

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

↑ Normierungsfaktor

Sicher gestellt. Ü A: 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 dort an

unter Teilchen in dem selben Zustand haben

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

$\rightarrow$  völlig unterschiedliches Verhalten (!)

das makroskopisch Größe, weil die  
mikroskopische Verteilungen anders sind.

- allgemein Ansatz für  $N$ -Teilchen:

$$Z_B = \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{\sqrt{\prod_k N_k!}} \sum_P \mathcal{P}(\psi_{a_1}(x_1) \dots \psi_{a_k}(x_k) \dots \psi_{a_N}(x_N))$$

$\nearrow$  Teilchenzahl bzw. Normierung.

$\downarrow$  Summe über alle Vertauschungen der Koordinaten (Permutationen)

bezieht nur die Orbital  $\psi_k$

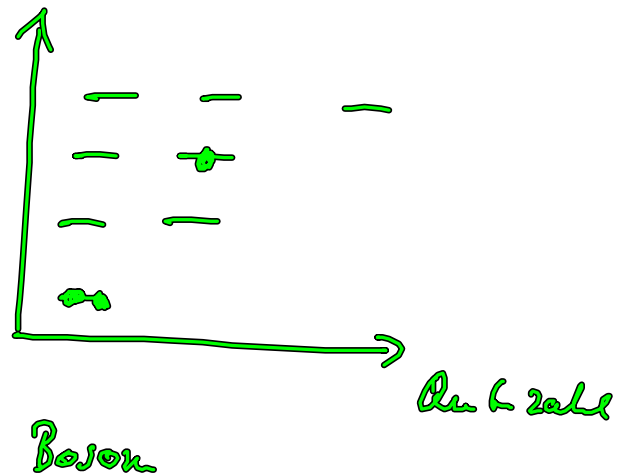
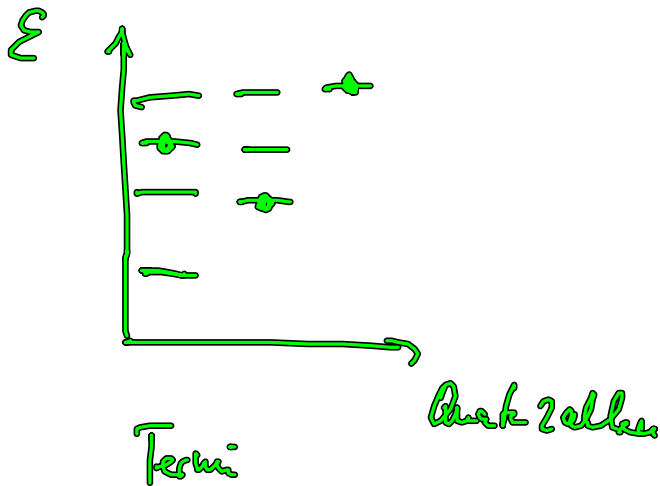
$k < N$  bezieht weil mehrere Teilchen in  
einem Orbital sitzen, sonst  $N_k$  für  
die Zahl der Teilchen in dem Orbital

$$\Psi_F = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sign}(P) \Psi_{n_1}(x_1) \dots \Psi_{n_k}(x_k) \dots \Psi_{n_N}(x_N)$$

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

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

jeder mögliche Zustand als Konfiguration vorstellen



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

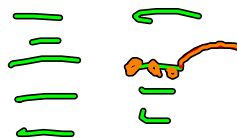
$$\Psi_{nN}(\{\bar{r}_i\}) = \langle \bar{r}_i | N, n \rangle \rightarrow | N, n \rangle$$

$|N, u\rangle = ?$  ist gegeben & zeichnet durch

1) die Gesamtteilchenzahl  $N$

2) wo man die Teilchenplätze hat  $u$

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

$\equiv$    $n_k$  als QZ mit  $N_k$  Teilchen

Fermionen:  $N_k = 0, 1$

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

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

2 Bosonen 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 kombinatorische Eigenschaften bestimmen

Es gibt 2 Sorten von Bosonen:

a) massives Boson: Massen-behaftet

- Atome, Moleküle,  $\alpha$ -Teilchen

b) masseloses Boson:

- Photon, Phononen, etc.

Quantenangeregung von Feldern

Man kann sich  $H$  anschauen:

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

$$\frac{\partial H}{\partial N} \equiv \mu, \text{ chemische Potentiale}$$

muß am Beispiel später klargestellt werden

masseloses Boson:  $\mu = 0$

massive Boson:  $\mu \neq 0$