Universität Regensburg

THEORETISCHE PHYSIK IV:

Quantenstatistik



gesetzt von uns

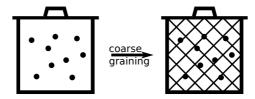
22. April 2020

Inhaltsverzeichnis

1	Stat	tistisch	e Mechanik und Thermodynamik	
	1.1	Fragestellung		
		1.1.1	Viele mikroskopische Freiheitsgrade - Mi-	
			krozustände	
		1.1.2	Beobachtungsgrößen - Makrozustände .	
	1.2	Statistische Theoriebildung		
		1.2.1	Das Versagen des idealtypischen Vorge-	
			hens	
		1.2.2	Mikrozustände, Makrozustände, Repro-	
			duzierbarkeit und Course gaining	
	1.3	Ensen	Ensemble	
		1.3.1	Wie Ensemble zu bilden sind - Beispiel:	
			kinetische Gastheorie	
		1.3.2	Course-graining	

1 Statistische Mechanik und Thermodynamik

1.1 Fragestellung



Obwohl durch mikroskopische Theorien, wie der Quantenmechanik, die Beschreibung von Systeme exakt gelingt, ist diese Methode nur für wenige Teilchen sinnvoll. Einen praxistauglichen Ansatz liefert die statistische Mechanik. Hierbei wird von einer mikroskopischen Beschreibung, links im Bild dargestellt durch einzelne Teilchen im Topf, zu einer Makroskopischen, rechts durch große Untersysteme, die selbst einige Millionen Teilchen beinhalten, übergegangen. Der Schritt hin zu makroskopischen Messgrößen, die diese Untersysteme charakterisieren, soll nun die erste Unternehmung sein.

1.1.1 Viele mikroskopische Freiheitsgrade - Mikrozustände

klassische Mechanik: $\{\overrightarrow{r}_i, \overrightarrow{p}_i\}$ $i=1,\ldots,N$ \rightarrow 6N Freiheitsgrade

$$\vec{r}_{j} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_{j}} (\{\vec{r}_{i}, \vec{p}_{i}\}) \quad j = 1, \dots, N$$

$$\vec{p}_{j} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_{j}} (\{\vec{r}_{i}, \vec{p}_{i}\})$$

Beispiel: freies Gas hat 6N-Freiheitsgrade Quantenmechanik: $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$

$$i\hbar\partial_t\Psi\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_n\right) = \hat{H}\Psi\left(\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_n\right)$$

Bemerkung: Ein Mikrozustand ist durch Ψ nur auf einen Eichfreiheitsgrad bestimmt.

Mikrozustand: Ein Mikrozustand wird durch die Angabe aller Werte festgelegt, welche die angenommenen Freiheitsgrade einnehmen. In der klassischen Mechanik durch einen Vektor, der Orts- und Impulskoordinaten aller Teilchen enthält. In der Quantenechanik durch eine Vielteilchenwellenfunktion.

Beobachtung: Physikalische Observable sind oft Beschreibungen von Systemen und Phänomenen, die sehr viele Teilchen umfassen: $N \approx 10^{23}$. So viele Teilchen/Freiheitsgrade kann man in den mikroskopischen Theorien in der Praxis nicht handhaben. Das will man aber auch gar nicht!

1.1.2 Beobachtungsgrößen - Makrozustände

Bei einer makroskopischen Betrachtung unserer Systeme, gibt es einige wichtige Größen:

N Teilchenzahl (ΔN) V Volumen (ΔV) T Temperatur (ΔT) p Druck (Δp) E Energie (ΔE)

Beobachtet werden:

- Druck-Temperatur-Kurve
- Energiedichten

weitere Größen: Magnetisierung, supraleitende Energielücke, Phasendiagramme, etc.

Makrozustand: Der Makrozustand wird durch die Angabe eines vollständigen Satzes makroskopischer Beobachtungsgrößen definiert. Die Aufgabe der statistischen Physik ist es, die Dynamik/das Verhalten der makroskopischen Observablen aus den mikroskopischen Gesetzen heraus zu verstehen und womöglich herzuleiten.

1.2 Statistische Theoriebildung

1.2.1 Das Versagen des idealtypischen Vorgehens

Gehen wir nun zunächst klassisch vor: Wir betrachten jedes Teilchen einzeln und bilden die Summe, um das Gesamtsystem zu beschreiben.

$$\begin{split} Impuls & \overrightarrow{p} = \sum_{i} \overrightarrow{p}_{i} \\ Teilchendichte & n(\overrightarrow{r}) = \sum_{i} \delta(\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}_{i}) \\ Stromdichte & \overrightarrow{j}(\overrightarrow{r}) = \sum_{i} \dot{\overrightarrow{r}}_{i} \delta(\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r}_{i}) \end{split}$$

Bedenken wir nun, dass wir so von 10^{23} Teilchen den Impulsvektor bestimmen müssten, um den Gesamtimpuls beschreiben zu können, wird schnell klar, wieso das klassische Vorgehen nicht zielführend ist. Die mikroskopischen Bewegungsgleichungen sind in der Praxis nicht handhabbar.

1.2.2 Mikrozustände, Makrozustände, Reproduzierbarkeit und Course gaining

Wir stellen uns nun folgendes Szenario vor: unsere Arbeitsgruppe führt ein thermodynamisches Experiment durch. Wir komprimieren ein Gas mit einer festen Kraft F und messen das Volumen V mit dem Messfehler ΔV , die Teilchenzahl N mit dem Fehler ΔN , etc. Einige Kollegen überprüfen unser Experiment und erhalten die selben Werte. Was im ersten Moment intuitiv klingt, sollte nach den letzten Kapiteln verwundern. Alle 10^{23} Teilchen der Systeme können unmöglich in beiden Experimenten die selben Mikrozustände eingenommen haben. Dennoch ist der makroskopische Befund unserer Kollegen eine Bestätigung unserer Befunde. Offenbar können verschiedene Mikrozustände zum selben Makrozustand führen.

1.3 Ensemble

Eine ganze Klasse - ein "Ensemble" - von Mikrozuständen kann gefunden werden, sodass jeder dieser Zustände auf makroskopischer Skala innerhalb der experimentellen Auflösung genau das gleiche Verhalten zeigen.

1.3.1 Wie Ensemble zu bilden sind - Beispiel: kinetische Gastheorie

Gleichgewicht: Ein physikalisches System, das über sehr viele (gekoppelte) Freiheitsgrade verfügt und dessen makroskopische Beobachtungsgrößen nicht über die Zeit schwanken, befindet sich im Gleichgewicht.

Zustandsgröße: Zustandsgrößen sind makroskopische Beobachtungsgrößen, die Sätze bilden können, die dahingehend vollständig sind, dass sie einen Makrozustand von jedem anderen Makrozustand unterscheiden können, wenn sie genügend genau gemessen werden. Makroskopische Zustandsgrößen für Gase sind:

- Teilchenzahl $N, \Delta N$
- Gesamtenergie E, ΔE
- Volumen des Behältnisses V

Weitere makroskopische Zustandsgrößen können sein: Magnetisierung, Drehimpuls - allgemein können weitere Erhaltungsgrößen mit ihren Zahlenwerten benötigt werden, um den Systemzustand im Gleichgewicht eindeutig zu charakterisieren.

1.3.2 Course-graining



Messgrößen lösen Phasenraumtrajektorien nur bis auf eine Unschärfe auf. Diese Unschärfe ermöglicht die Beschreibung auf grober Skala.