

UNIVERSITÄT REGENSBURG

THEORETISCHE PHYSIK IV:

# Quantenstatistik



/home/jonas/Dokumente/Studium/logo\_ur/ur-logo-bildmar

gesetzt von uns

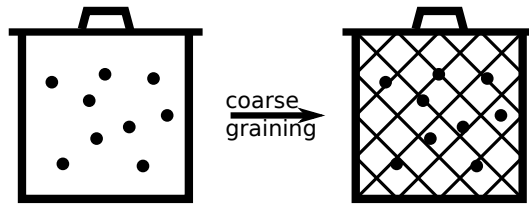
6. Mai 2020

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Statistische Mechanik und Thermodynamik</b>	<b>3</b>
1.1	Fragestellung . . . . .	3
1.1.1	Viele mikroskopische Freiheitsgrade - Mikrozustände	3
1.1.2	Beobachtungsgrößen - Makrozustände . . . . .	4
1.2	Statistische Theoriebildung . . . . .	5
1.2.1	Das Versagen des idealtypischen Vorgehens . . . . .	5
1.2.2	Mikrozustände, Makrozustände, Reproduzierbarkeit und Course gaining . . . . .	6
1.3	Ensemble . . . . .	6
1.3.1	Wie Ensemble zu bilden sind - Beispiel: kinetische Gastheorie . . . . .	6
1.3.2	Course-graining . . . . .	7
1.4	Exkurs: Emergenz der Entropie . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Grundlegende Konzepte der Statistik und der Wahrscheinlichkeitstheorie</b>	<b>9</b>
2.1	Klassische Statistik . . . . .	9
2.1.1	Motivation für die Einführung der Phasenraum-dichte: . . . . .	11
2.1.2	Generische Eigenschaften von $\rho(p, x)$ . . . . .	11
2.1.3	Korrelation . . . . .	12
2.2	Quantenstatistik . . . . .	14
2.2.1	Quanten-Mittelwerte . . . . .	14
2.2.2	Dichteoperator . . . . .	15

# 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:  $\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\} \quad i = 1, \dots, N$   
→ 6N Freiheitsgrade

$$\begin{aligned}\vec{r}_j &= \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_j}(\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\}) \quad j = 1, \dots, N \\ \vec{p}_j &= -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_j}(\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\})\end{aligned}$$

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

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

**Bemerkung:** Ein Mikrozustand ist durch  $\Psi$  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 Impulskordinaten 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	$(\Delta N)$
V	Volumen	$(\Delta V)$
T	Temperatur	$(\Delta T)$
p	Druck	$(\Delta p)$
E	Energie	$(\Delta E)$

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.

<i>Impuls</i>	$\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i$
<i>Teilchendichte</i>	$n(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$
<i>Stromdichte</i>	$\vec{j}(\vec{r}) = \sum_i \dot{\vec{r}}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$

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  $\Delta V$ , die Teilchenzahl  $N$  mit dem Fehler  $\Delta N$ , 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

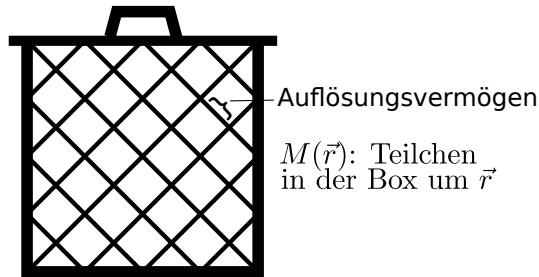
**Gleichgewicht:** Ein physikalisches System, das über sehr viele (gekoppelte) Freiheitsgrade verfügt und dessen makroskopische Beobachtungsgrößen nicht über die Zeit schwanken, befindet sich im Gleichgewicht.

**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  $E$ ,  $\Delta E$
- Volumen des Behältnisses  $V$

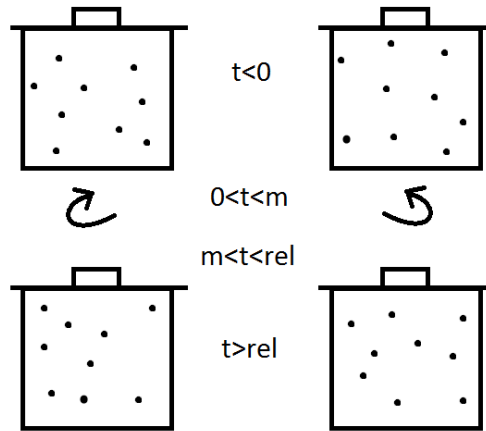
Weitere makroskopische Zustandsgrößen können sein: Magnetisierung, Drehimpuls - allgemein können weitere Erhaltungsgrößen mit ihren Zahlenwerten benötigt werden, um den Systemzustand im Gleichgewicht eindeutig zu charakterisieren.

### 1.3.2 Course-graining



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

## 1.4 Exkurs: Emergenz der Entropie



Man stelle sich zwei mit Gas gefüllte Behälter in zwei verschiedenen Laboratorien vor. Beide besitzen -innerhalb einer gewissen Fehler-toleranz- die gleichen charakteristischen Zustandsgrößen und lassen sich anhand dieser zum Zeitpunkt  $t < 0$  nicht unterscheiden. Im Zeit-intervall  $0 < t < m$  werden die beiden Behälter nun in unterschiedliche Richtungen gerührt und sind im folgendem  $m > t > rel$  voneinander unterscheidbar. Nach einer gewissen Relaxationszeit  $rel$  befinden sich die beiden Gase wieder im Gleichgewicht und sind makroskopisch nicht mehr voneinander zu unterscheiden. Die makroskopische Beschreibung hat das Rühren "vergessen".



# 2 Grundlegende Konzepte der Statistik und der Wahrscheinlichkeitstheorie

**klassische Mechanik:** Mittelwert, Varianz, Verteilungsfunktionen, Korrelationen ect.

**QM:** analoge Bildungen.

## 2.1 Klassische Statistik

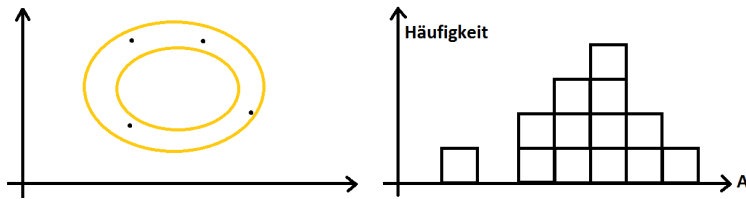


Abbildung 2.1: Links: bildliche Darstellung der Menge aller Ensemble im  $6N$ -Dimensionalen Raum mit Achsen  $p$  und  $x$ . Rechts: Histogramm (oft  $\frac{\text{Häufigkeit}}{\text{Anzahl}}$ , so dass dieses normiert ist.)

Aus der Abb. 2.1 folgt intuitiv die Definition des Mittels. Um dieses zu erhalten summiert man alle Werte  $A(p^{(j)}, x^{(j)})$  des betrachteten Ensembles  $\{p^{(j)}, x^{(j)}\}, j = 1, \dots, J$  und teilt durch die Anzahl der Ele-

mente des selbigen.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J A(p^{(j)}, x^{(j)})$$

Durch den Übergang zu beliebig genauen Messgenauigkeiten, wird die diskrete Verteilung in Abb. 2.1 zu einer kontinuierlichen Kurve. (Übergang zum Kontinuumslimites.)

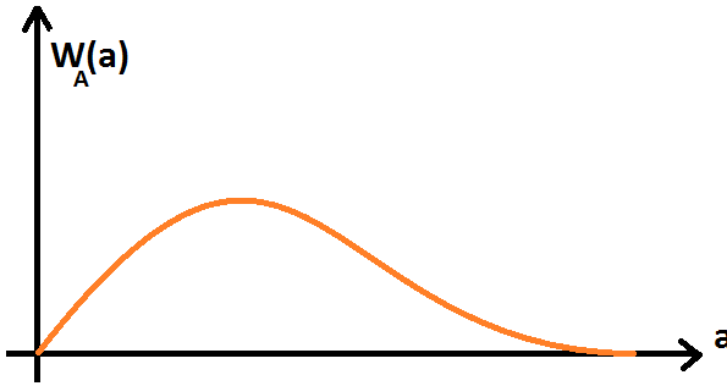


Abbildung 2.2: Übergang zum "Kontinuumslimites" mit Wahrscheinlichkeit  $W_A(a)$ .

Wie oben ist auch diese Kurve normiert. Die Häufigkeit wird ersetzt durch  $W_A(a)$ , welche die Wahrscheinlichkeit angibt, für ein gegebenes Ensemble, eine Messgröße  $A$  mit dem Wert  $a$  zu Messen.

Im Folgenden sollen nun noch kurz einige wichtige Begrifflichkeiten aus der Statistik definiert werden.

**Varianz:**

$$\langle [A - \langle A \rangle]^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

**Weitere Momente:** <sup>1</sup>

$$\langle A^k \rangle = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J (A(p^{(j)}, x^{(j)}))^k$$

**Phasenraumdichte:** <sup>2</sup>

$$\rho(p, x) = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \delta(p - p^{(j)}) \delta(x - x^{(j)})$$

Mithilfe der Phasenraumdichte lässt sich jetzt der Mittelwert auch mithilfe eines Integrals beschreiben:

$$\langle A \rangle = \int dp^{3N} dx^{3N} \rho(p, x) A(p, x)$$

### 2.1.1 Motivation für die Einführung der Phasenraumdichte:

Zum einen erlaubt die Einführung durch Produktbildung die Trennung der Eigenschaften von Beobachtungsgrößen und Ensemble, zum anderen ist dies die mathematische Umsetzung des Übergangs vom mikroskopischen zum makroskopischen (Coarse-Graining).

### 2.1.2 Generische Eigenschaften von $\rho(p, x)$

1.  $\rho(p, x)$  ist reell
2.  $\rho(p, x) \geq 0$
3.  $\int dp^{3N} dx^{3N} \rho(p, x) = 1$

---

<sup>1</sup>Definition und mehr auch im Bronstein "Taschenbuch der Mathematik"

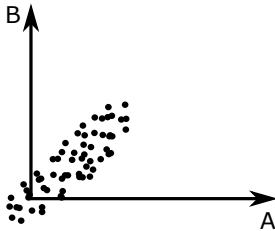
<sup>2</sup> $\delta(p - p^{(j)}) = \delta(p_{1x} - p_{1x}^{(j)}) \cdot \delta(p_{1y} - p_{1y}^{(j)}) \cdot \dots \cdot \delta(p_{Nz} - p_{Nz}^{(j)})$ .

**Bemerkung:** Wir können  $\rho(p, x)$  als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren.

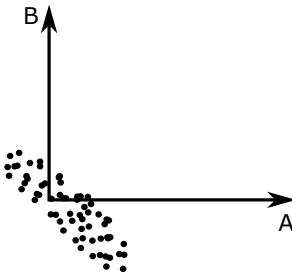
$$\langle A \rangle = \int dp^{3N} dx^{3N} \rho(p, x) A(p, x)$$

$$W_A(a) = \langle \delta(a - A) \rangle = \int dp^{3N} dx^{3N} \rho(p, x) \delta(a - A(p, x))$$

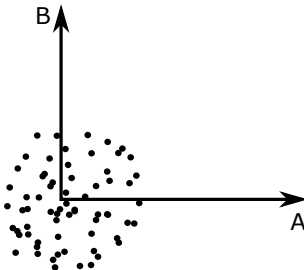
### 2.1.3 Korrelation



A und B sind korreliert



A und B sind antikorreliert



A und B sind nicht korreliert/  
unkorreliert

**Bemerkung:** Neben Mittelwerten von Observablen sind auch deren Korrelationen ein wichtiges Charakteristikum eines physikalischen Zu-

stands.

→ Fluktuations-Dissipations-Theorem

$$\begin{aligned} K_{AB} &= \langle (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \rangle \\ &= \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J (A^{(j)} - \langle A \rangle)(B^{(j)} - \langle B \rangle) \\ A^{(j)} &= A(p^{(j)}, x^{(j)}) \end{aligned}$$

**Paarwahrscheinlichkeit:**

$$\begin{aligned} W_{AB}(a, b) &= \langle \delta(a - A) \delta(b - B) \rangle \\ &= \int dp^{3N} dx^{3N} \rho(p, x) \delta(a - A) \delta(b - B) \end{aligned}$$

**Eigenschaften:**

$$\begin{aligned} 1. \quad W_A(a) &= \int db W_{AB}(a, b) \\ W_B(b) &= \int da W_{AB}(a, b) \\ 2. \quad K_{AB} &= \int da db (a - \langle A \rangle)(b - \langle B \rangle) W_{AB}(a, b) \end{aligned}$$

**Definition: statistisch unabhängig**

$$W_{AB}(a, b) = W_A(a) \cdot W_B(b)$$

Beispiel für statistisch unabhängige Größen, sind die einzelnen Würfe beim Münzwurf.

**Anwendung:** Betrachten wir zwei komplett getrennte Gase und wollen deren Eigenschaften untersuchen, so gilt:

$$\begin{aligned} \rho(p, x) &= \rho(p_1, x_1) \rho(p_2, x_2) \\ p &= (p_1, p_2) \quad x = (x_1, x_2) \end{aligned}$$

## 2.2 Quantenstatistik

### 2.2.1 Quanten-Mittelwerte

**Beispiel:** Fock-Raum als Analogon zum klassischen Phasenraum für  $N$  Fermionen

Vielteilchenwellenfunktionen von Fermionen sind vollständig antisymmetrisiert („Slater-Determinante“), Bosonen haben dagegen eine vollständig symmetrisierte Wellenfunktion

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{d\hat{r}_i^2} + V_{ex}(\hat{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} N v(\hat{r}_i - \hat{r}_j)$$

$$\text{z.B.: } v(\vec{r}) = \frac{R^2}{|\vec{r}|}$$

**Zeitentwicklung:**

$$i\partial_r \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$$

Zum Phasenraum für Fermionen: Dieser Phasenraum wird aufgespannt durch alle möglichen Slaterdeterminanten, die man bilden kann:

$$|SD_1\rangle |SD_2\rangle \dots$$

Eine Wellenfunktion wird in diesem Raum durch einen Punkt dargestellt. Sei nun  $|j\rangle$  eine Menge/Ensemble von Mikrozuständen der QM (Wellenfunktionen)  $j = 1, \dots, J$ . Die Zustände  $|j\rangle$  seien kompatibel mit den experimentellen Randbedingungen, z.B. Teilchenzahl, Gesamtenergieinhalt,...

Für einen Teilchenzustand  $|j\rangle$  ist sein Beitrag zum Ensemble:

$$A^{(j)} := \langle j | \hat{A} | j \rangle$$

$$\langle \hat{A} \rangle := \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \langle j | \hat{A} | j \rangle \quad (\text{Mittelwert})$$

## 2.2.2 Dichteoperator

**Vollständigkeit:**  $\mathbb{1} = \sum_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu|$ ,  $\mu$  ist ein Basisvektor im Vektorraum

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \langle j|A|j \rangle = \frac{1}{J} \sum_j \sum_{\mu} \langle j|\mu \rangle \langle \mu|\hat{A}|j \rangle \\ &= \frac{1}{J} \sum_j \sum_{\mu} \langle \mu|\hat{A}|j \rangle \langle j|\mu \rangle \\ \hat{\rho} &= \frac{1}{J} \sum_j |j\rangle \langle j| \quad \text{Dichteoperator der QS} \\ \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{\mu} \langle \mu|\hat{A}\hat{\rho}|\mu \rangle = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})\end{aligned}$$

**Anwendung im mikroskopischen System:**

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| + |\leftarrow\rangle \langle \leftarrow|)$$

Die Zusammensetzung der Ensembles soll in der Übung behandelt werden.

**Eigenschaften von  $\hat{\rho}$ :**

1. Hermitizität:  $\langle \mu|\hat{\rho}|\nu \rangle = \langle \nu|\hat{\rho}|\mu \rangle^*$
2. Positivität:  $\langle \dots|\hat{\rho}|\dots \rangle \geq 0$  für jedes  $|\dots\rangle$
3. Normierung:  $\sum_{\mu} \langle \mu|\hat{\rho}|\mu \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} = 1$