a) <u>unterscheidbar:</u> $\varphi(x_1, x_2) = \varphi_a(x_1)\,\varphi_b(x_2)$

$$\Rightarrow \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\text{untersch.}}$$

$$= \int dx_1 \int dx_2\; \varphi_a^*(x_1)\,\varphi_b^*(x_2)\,(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2)\,\varphi_a(x_1)\,\varphi_b(x_2)$$

$$= \underbrace{\int dx_1\, \varphi_a^*(x_1)\, x_1^2\, \varphi_a(x_1)}_{= \langle a|\hat{x}^2|a\rangle =: \langle x^2\rangle_a}\; \underbrace{\int dx_2\, \varphi_b^*(x_2)\, \varphi_b(x_2)}_{=1}$$

$$+ \underbrace{\int dx_1\, \varphi_a^*(x_1)\, \varphi_a(x_1)}_{=1}\; \underbrace{\int dx_2\, \varphi_b^*(x_2)\, x_2^2\, \varphi_b(x_2)}_{= \langle x^2\rangle_b}$$

$$- 2 \underbrace{\int dx_1\, \varphi_a^*(x_1)\, x_1\, \varphi_a(x_1)}_{= \langle x\rangle_a}\; \underbrace{\int dx_2\, \varphi_b^*(x_2)\, x_2\, \varphi_b(x_2)}_{= \langle x\rangle_b}$$

$$= \langle x^2\rangle_a + \langle x^2\rangle_b - 2\langle x\rangle_a \langle x\rangle_b$$

b) <u>ununterscheidbare Bosonen / Fermionen:</u>

$$\varphi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_a(x_1)\,\varphi_b(x_2) \pm \varphi_b(x_1)\,\varphi_a(x_2)\right)$$

Eine analoge Rechnung liefert (→ Übung)

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\substack{B \\ F}} = \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\text{untersch.}} \mp 2\,|\langle x\rangle_{ab}|^2$$

mit $\langle x\rangle_{ab} = \int dx\, \varphi_a^*(x)\, x\, \varphi_b(x) \equiv \langle a|\hat{x}|b\rangle$

$\Rightarrow$ • Bosonen rücken durch die Symmetrisierung näher zusammen ($\hat{=}$ „Anziehung")

• Fermionen rücken durch die Anti-Symmetrisierung voneinander ab ($\hat{=}$ „Abstoßung") z. im Einklang mit dem Pauli-Prinzip

Berücksichtigung des Spins

Bislang haben wir den Spin-Freiheitsgrad vernachlässigt. Wenn wir ihn mit berücksichtigen, muss die Gesamtwellenfunktion bei gleichzeitiger Vertauschung der Teilchenorte und -Spins

für Bosonen symmetrisch

und für Fermionen antisymmetrisch

sein.

Beispiel: zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Fermionen

$$\Psi_{ges}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)\, \chi(t)$$

S = 0 - Singulett:

$$|s=0, m_s=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle \right)$$

antisymmetrisch

$\Rightarrow$ Ortswellenfkt. $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ symmetrisch

$S = 1$ - Triplett:

$$\left.\begin{aligned} |S=1, m_s=+1\rangle &= |\uparrow,\uparrow\rangle \\ |S=1, m_s=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle\right) \\ |S=1, m_s=-1\rangle &= |\downarrow,\downarrow\rangle \end{aligned}\right\} \text{ symmetrisch}$$

$\Rightarrow$ Ortswellenfkt. antisymmetrisch

Bsp.: H_2 - Molekül

$S = 0$ - Singulett $\Rightarrow$ Ortswellenfkt. symmetrisch

$\Rightarrow$ „Austauschkraft": Elektronen rücken zusammen

und ziehen Protonen hinter sich her

$\Rightarrow$ „kovalente Bindung".

6.2 Mehr-Teilchen-Systeme

Analog zu den Zwei-Teilchen-Systemen müssen die Wellenfunktionen von n identischen Bosonen / Fermionen total symmetrisch / antisymmetrisch bzgl. gleichzeitiger Vertauschung der Orte und Spins jeweils zweier Teilchen sein.

Bsp.: drei identische Bosonen / Fermionen mit gleichem Spin:

$$\begin{aligned} \varphi_{B/F}(\vec{x}_1,\vec{x}_2,\vec{x}_3) = N \Big\{ & \varphi_a(\vec{x}_1)\,\varphi_b(\vec{x}_2)\,\varphi_c(\vec{x}_3) + \varphi_b(\vec{x}_1)\,\varphi_c(\vec{x}_2)\,\varphi_a(\vec{x}_3) \\ & + \varphi_c(\vec{x}_1)\,\varphi_a(\vec{x}_2)\,\varphi_b(\vec{x}_3) \\ & \pm \varphi_c(\vec{x}_1)\,\varphi_b(\vec{x}_2)\,\varphi_a(\vec{x}_3) \pm \varphi_b(\vec{x}_1)\,\varphi_a(\vec{x}_2)\,\varphi_c(\vec{x}_3) \\ & \pm \varphi_a(\vec{x}_1)\,\varphi_c(\vec{x}_2)\,\varphi_b(\vec{x}_3) \Big\} \end{aligned}$$

7. Statistische Quantenmechanik

7.1 Grundlagen am Beispiel des harmon. Oszillators

drei nicht-wechselwirkende Teilchen A, B, C im eindim. harmonischen Oszillator (gleiches ω)

$\rightarrow$ Gesamtenergie:

$$E = E_A + E_B + E_C = \hbar\omega(n_A + n_B + n_C + \tfrac{3}{2}),$$

$$n_A, n_B, n_C \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \ldots\}$$

Annahme:

Die Gesamtenergie sei $E = \hbar\omega(3 + \frac{3}{2}) = \frac{9}{2}\hbar\omega$

$\Leftrightarrow n_A + n_B + n_C = 3$

Wie viele und welche Zustände gibt es?

i) <u>unterscheidbare Teilchen</u>

(z.B. drei Spin-1-Teilchen mit <u>festen</u> Quantenzahlen $m_A = -1$, $m_B = 0$, $m_C = +1$)

$\Rightarrow |n_A, n_B, n_C\rangle =$

$|3,0,0\rangle$, $|0,3,0\rangle$, $|0,0,3\rangle$

$|2,1,0\rangle$, $|1,0,2\rangle$, $|0,2,1\rangle$, $|0,1,2\rangle$, $|1,2,0\rangle$, $|2,0,1\rangle$

$|1,1,1\rangle$

$\rightarrow$ 10 unterschiedliche Zustände mit $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$

ii) <u>ununterscheidbare Bosonen</u>
(ohne Spin oder mit gleichem Spin)

→ symmetrisiere:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{|3,0,0\rangle + |0,3,0\rangle + |0,0,3\rangle\right\}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\left\{|2,1,0\rangle + |1,0,2\rangle + \dots + |2,0,1\rangle\right\}$$

$$|\psi_3\rangle = |1,1,1\rangle$$

nur 3 unterschiedliche Zustände!

iii) <u>ununterscheidbare Fermionen</u>
(mit gleichem Spin)

→ antisymmetrisiere

→ nur ein erlaubter Zustand:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\left\{|2,1,0\rangle + |1,0,2\rangle + |0,2,1\rangle - |0,1,2\rangle - |1,2,0\rangle - |2,0,1\rangle\right\}$$

<u>Besetzungszahldarstellung</u>

Bei ununterscheidbaren Teilchen genügt es zu wissen, welcher Zustand wie oft besetzt ist:

$$|\psi\rangle = |N_0, N_1, N_2, \dots\rangle$$

mit N_i = Zahl der Teilchen im Ein-Teilchen-Zustand $|i\rangle$

<u>Bosonen</u>: $N_i \in \mathbb{N}_0$

in unserem Beispiel:

$$
\begin{array}{l}
\qquad\quad\; N_0\; N_1\; N_2\; N_3 \\
|\psi_1\rangle = |2, 0, 0, 1, 0, 0, \ldots\rangle \\
|\psi_2\rangle = |1, 1, 1, 0, 0, \ldots\rangle \\
|\psi_3\rangle = |0, 3, 0, 0 \ldots\rangle
\end{array}
$$

<u>Fermionen</u>: $N_i \in \{0, 1\}$

in unserem Beispiel: $|\psi\rangle = |1, 1, 1, 0, 0, \ldots\rangle$

- Die Gesamtheit der möglichen Zustände eines physikal. Systems unter bestimmten Nebenbedingungen (hier: drei Teilchen mit Gesamtenergie $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$) nennt man „<u>statistisches Ensemble</u>".
  (In unserem Beispiel ist das statist. Ensemble also eine Menge von 10 bzw. 3 bzw. 1 Zuständen für unterscheidbare Teilchen bzw. ununterscheidbare Bosonen bzw. Fermionen.)

- <u>Grundannahme der statistischen Physik</u>:

  Alle Zustände eines statistischen Ensembles werden im Laufe der Zeit mit <u>gleicher Wahrscheinlichkeit</u> besetzt (= „<u>thermisches Gleichgewicht</u>")

Der „Motor" dieser Gleichbesetzung sind Wechselwirkungen zwischen den Teilchen, die ausreichend stark sind, die Energie zwischen den Teilchen häufig umzuverteilen, aber schwach genug, dass sie die Zahl und Eigenschaften der möglichen Zustände nicht ändern.

Wie groß ist in unserem Beispiel die Wahrscheinlichkeit $P(n)$, ein Teilchen im Zustand $|n\rangle$ (Energie $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$) zu finden?

<u>unterscheidbare Teilchen:</u>

3 von 10 Zust. mit 2 von 3 Teilchen im Zust. $|0\rangle$

$$
\left.\begin{aligned}
P(0) &= \frac{3}{10}\cdot\frac{2}{3} + \frac{6}{10}\cdot\frac{1}{3} = \frac{4}{10}\\
P(1) &= \frac{6}{10}\cdot\frac{1}{3} + \frac{1}{10}\cdot 1 = \frac{3}{10}\\
P(2) &= \frac{6}{10}\cdot\frac{1}{3} = \frac{2}{10}\\
P(3) &= \frac{3}{10}\cdot\frac{1}{3} = \frac{1}{10}\\
P(n>3) &= 0
\end{aligned}\right\} \quad \sum_n P(n) = 1 \checkmark
$$

<u>ununterscheidbare Bosonen:</u>

$$
\left.\begin{aligned}
P(0) &= \frac{1}{3}\cdot\frac{2}{3} + \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3} = \frac{1}{3}\\
P(1) &= \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\cdot 1 = \frac{4}{9}\\
P(2) &= \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3} = \frac{1}{9}\\
P(3) &= \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3} = \frac{1}{9}\\
P(n>3) &= 0
\end{aligned}\right\} \quad \sum_n P(n) = 1 \checkmark
$$