unununterscheidbare Fermionen:

$$\left.\begin{array}{l} P(0) = P(1) = P(2) = \frac{1}{3} \\ P(n > 2) = 0 \end{array}\right\} \sum_n P(n) = 1 \checkmark$$

## 7.2 Abzählen von N-Teilchen-Zuständen

Wir verallgemeinern nun die vorangegangenen Überlegungen und betrachten ein System mit Ein-Teilchen-Energien $E_1, E_2, E_3, \ldots$, die jeweils $d_1$-, $d_2$-, $d_3$- ... fach entartet sind
(z.B. Wasserstoff-Zustände $|n\, l\, m_l\, m_s\rangle$
$\Rightarrow E_n$ ist $d_n = 2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2$-fach entartet.)

Frage:
Wieviele Möglichkeiten $Q(N_1, N_2, \ldots)$ gibt es, $N$ Teilchen auf diese Zustände zu verteilen, so dass $N_1$ Teilchen die Energie $E_1$, $N_2$ Teilchen die Energie $E_2$, ... besitzen?

Die Antwort hängt wieder davon ab, ob unterscheidbare Teilchen oder ununterscheidbare Bosonen oder Fermionen haben. Wir interessieren uns speziell für sehr große $N$ (z.B. $N \sim 10^{23}$). Der Fall $N$ unterscheidbarer Teilchen kommt dann – selbst im Prinzip – nie vor. Wir beschränken uns daher auf ununterscheidbare Bosonen und Fermionen.

i) identische Fermionen

Wieviele Möglichkeiten gibt es, $N_k$ Fermionen auf $d_k$ Zustände zu verteilen?
- Jeder Zustand darf maximal einmal besetzt werden. ($\Rightarrow N_k \overset{!}{\leq} d_k$)
- Ununterscheidbarkeit $\Rightarrow$ Es spielt keine Rolle, „welches" Teilchen welchen Zustand besetzt.

$\rightarrow$ Problem äquivalent zum Lotto-Spiel
6 aus 49 $\rightarrow$ $N_k$ aus $d_k$
(Welche $N_k$ der $d_k$ Zustände werden „gezogen"?)

Antwort: $$\binom{d_k}{N_k} = \frac{d_k!}{(d_k-N_k)!\,N_k!}$$

Begründung:
Wir verteilen die $N_k$ Teilchen nacheinander auf die $d_k$ Zustände. Für das erste Teilchen gibt es $d_k$ Möglichkeiten, für das zweite $d_k-1$, ..., für das letzte $d_k-(N_k-1)$, insgesamt also

$$d_k\cdot(d_k-1)\cdot\ldots\cdot(d_k-N_k+1) = \frac{d_k!}{(d_k-N_k)!}$$

Möglichkeiten. Da es aber auf Grund der Ununterscheidbarkeit auf die Reihenfolge nicht ankommt, in der die Zustände besetzt werden, müssen wir noch durch die Zahl der Permutationen teilen, die auf die gleiche Konfiguration führt, also durch $N_k!$

Dies gilt für alle Energie-Niveaus $E_k$. Insgesamt erhalten wir also

$$\boxed{Q_{\text{Fermion}}(N_1, N_2, \ldots) = \prod_{n=1}^{\infty} \binom{d_n}{N_n} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n!}{N_n!\,(d_n - N_n)!}}$$

ii) identische Bosonen

Wieviele Möglichkeiten gibt es, $N_k$ Bosonen auf $d_k$ Zustände zu verteilen?

- Jeder Zustand kann beliebig oft besetzt werden.
- Ununterscheidbarkeit $\Rightarrow$ Die Reihenfolge spielt wieder keine Rolle.

$\rightarrow$ Das Problem entspricht einer Wahl, bei der $N_k$ Stimmen auf $d_k$ Kandidaten verteilt werden können, wobei man jedem Kandidaten beliebig viele Stimmen geben kann (solange die Summe $N_k$ ist).

Eine mögliche „Stimmverteilung" sieht so aus:

1. Kand.    2. Kand.    3. K    4. K

x x x | x x | | x

mit $N_k$ Stimmen x

und $d_k - 1$ Trennlinien | zwischen zwei Kandidaten.

$\rightarrow$ Wieviele Möglichkeiten gibt es, $N_k$ Kreuze auf $N_k + d_k - 1$ Plätze zu verteilen?

Antwort : $\binom{N_k+d_k-1}{N_k} = \frac{(N_k+d_k-1)!}{N_k!\,(d_k-1)!}$

(Alternativ hätten wir auch fragen können, wieviele Möglichkeiten es gibt, $d_k-1$ Striche auf $N_k+d_k-1$ Plätze zu verteilen. Die Antwort wäre die gleiche, da $\binom{N_k+d_k-1}{d_k-1} = \frac{(N_k+d_k-1)!}{(d_k-1)!\,N_k!} = \binom{N_k+d_k-1}{N_k}$.)

Dies gilt wieder für alle Energie-Niveaus, so dass wir insgesamt finden:

$$\boxed{Q_{Boson}(N_1, N_2, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \binom{N_n+d_n-1}{N_n} = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n+d_n-1)!}{N_n!\,(d_n-1)!}}$$

iii) <u>unterscheidbare Teilchen</u>

Wir hatten gesagt, dass der Fall unterscheidbarer Teilchen für große $N$ nie realisiert ist. Dieser Fall ist jedoch von gewissem theoretischen Interesse, da er erlaubt, den Zusammenhang zur klassischen statistischen Physik herzustellen. Wir geben daher hier das Ergebnis an:

$$\boxed{Q_{untersch.}(N_1, N_2, \dots) = N! \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n^{N_n}}{N_n!}}$$

$$\left( N = \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right)$$

## 7.3 Die wahrscheinlichste Konfiguration

Betrachte $N$ Teilchen mit Gesamtenergie $E$ in einem physikalischen System mit Ein-Teilchen-Niveaus $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots$, die jeweils $d_n$-fach entartet sind.

$\Rightarrow$ Im thermischen Gleichgewicht ist die <u>wahrscheinlichste Konfiguration</u> $(N_1, N_2, \ldots)$, die Teilchen auf die verschiedenen Energie-Niveaus zu verteilen dadurch gegeben, dass die Zahl der entsprechenden Zustände, $Q(N_1, N_2, \ldots)$, unter den <u>Nebenbedingungen</u>

1.) $\sum_n N_n = N$

2.) $\sum_n N_n \varepsilon_n = E$

<u>maximal</u> ist.

- In der Praxis ist es einfacher $\ln(Q)$ statt $Q$ zu maximieren, was äquivalent ist, da $\ln x$ eine monoton wachsende Funktion ist.

- Extremierung einer Funktion $f(x_1, x_2, \ldots)$ unter Randbedingungen $g_i(x_1, x_2, \ldots) = 0$

$\rightarrow$ Methode der <u>Lagrange-Multiplikatoren</u>:

Wir definieren dazu die Funktion

$$\boxed{\begin{aligned}&G(N_1, N_2, \ldots, \alpha, \beta)\\ &= \ln Q(N_1, N_2, \ldots) + \alpha\left[N - \sum_n N_n\right] + \beta\left[E - \sum_n N_n E_n\right],\end{aligned}}$$

die sich unter den Randbedingungen 1.) und 2.) auf $\ln Q$ reduziert, und fordern

$$\boxed{\frac{\partial G}{\partial N_1} = \frac{\partial G}{\partial N_2} = \ldots = \frac{\partial G}{\partial \alpha} = \frac{\partial G}{\partial \beta} \overset{!}{=} 0}$$

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial G}{\partial \alpha} &= N - \sum_n N_n \overset{!}{=} 0\\ \frac{\partial G}{\partial \beta} &= E - \sum_n N_n E_n \overset{!}{=} 0\end{aligned}\right\} \text{garantiert die Nebenbedingung}$$

i) <u>identische Bosonen</u>

$$G = \sum_{n=1}^{\infty}\Big[\ln\big((N_n + d_n - 1)!\big) - \ln(N_n!) - \ln\big((d_n-1)!\big)\Big]$$
$$+ \alpha\left[N - \sum_n N_n\right] + \beta\left[E - \sum_n N_n E_n\right]$$

Stirling'sche Näherungsformel:

$$\ln(x!) \approx x \ln x - x \qquad \text{für } x \gg 1$$

$$\Rightarrow G \approx \sum_{n=1}^{\infty}\Big[(N_n + d_n - 1)\ln(N_n + d_n - 1) - (N_n + d_n - 1)$$
$$- N_n \ln N_n + N_n - (d_n - 1)\ln(d_n - 1) + (d_n - 1)$$
$$- \alpha N_n - \beta N_n E_n\Big] + \alpha N + \beta E$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) + 1 - 1 - \ln N_n - 1 + 1 - \alpha - \beta \varepsilon_n$$

$$= \ln\left(\frac{N_n + d_n - 1}{N_n}\right) - \alpha - \beta \varepsilon_n = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad N_n + d_n - 1 = N_n \, e^{\alpha + \beta \varepsilon_n}$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{N_n = \frac{d_n - 1}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_n} - 1} \approx \frac{d_n}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_n} - 1}}$$

(Im Zusammenhang mit der Stirling-Formel mussten wir neben $N_n \gg 1$ auch $d_n \gg 1$ annehmen, so dass $d_n - 1 \approx d_n$.)

ii) <u>identische Fermionen</u>

analog (mit der zusätzlichen Annahme, dass $d_n \gg N_n$):

$$\Rightarrow \quad \boxed{N_n \approx \frac{d_n}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_n} + 1}}$$

iii) <u>unterscheidbare Teilchen</u>

analog:

$$\boxed{N_n \approx d_n \, e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_n)}}$$