4. Quantenstatistik

4.1 Grundbegriffe

- Hamilton-Operator
  $\hat{H}$ beschreibt das System vollständig; Hamilton-Operator ist selbstadjungiert
- Hilbert-Raum, Zustandsvektor
  - Gesamtheit ("Zustand") durch einen normierten Zustandsvektor $|\Psi\rangle_t$ (mit ${}_t\langle\Psi|\Psi\rangle_t = 1$) beschrieben, der Element eines geeignet gewählten Hilbert-Raumes ist
  - t ist die Zeit (wird weggelassen, wenn sie nicht wichtig ist)
  - in diesem Hilbert-Raum nehmen wir an, daß es ein vollständiges Orthonormalsystem (Basis) von Vektoren, $\{|n\rangle\}$, gibt
  - verschiedene "Darstellungen" von $|\Psi\rangle_t$ möglich:
    - ⋆ Ortsdarstellung: $\langle\mathbf{r}, \Psi\rangle_t = \Psi_t(\mathbf{r})$ "Wellenfunktion" ("$\mathbf{q} \Rightarrow \mathbf{r}$)"
    - ⋆ Impulsdarstellung: $\langle\mathbf{k}, \Psi\rangle_t = \Psi_t(\mathbf{k})$ bzw. $\langle\mathbf{p}, \Psi\rangle_t = \Psi_t(\mathbf{p})$, mit $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$
  - $|\Psi\rangle_t$ kann auch von Spinvariablen abhängen
  - es können auch gewisse Symmetrieanforderungen an $|\Psi\rangle_t$ gestellt werden (Bose-Teilchen, Fermi-Teilchen)

- (a) reine Zustände $|\Psi\rangle_t$
  (b) nicht-reine (gemischte) Zustände: reine Zustände $|\Psi_i\rangle_t$ liegen mit Wahrscheinlichkeiten p_i vor, mit $\sum_i p_i = 1$

- Observable
  jeder (klassischen) Observable X wird ein Operator $\hat{X}$ zugeordnet, der selbstadjungiert ist, also $\hat{X} = \hat{X}^\dagger$; insbesondere $E \Rightarrow \hat{H}$
  (Zuordnung kann eventuell schwierig sein)

- Zeitabhängigkeit
  Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors durch Schrödinger-Gleichung gegeben

$$\hat{H}|\Psi\rangle_t = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle_t$$

die für eine gewisse Anfangsbedingung gelöst wird
Beispiel für $\hat{H}$ (Ortsdarstellung):

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \sum_{i<j} V(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|) + \sum_{i=1}^{N}\Phi(|\mathbf{q}_i|)$$

Gegenüberstellung Statistische Physik basierend auf der

klassischen Mechanik (KM)
Quantenmechanik (QM)

- Zustände

KM "reiner Zustand": Trajektorie im Phasenraum $\{\mathbf{p}^N(t), \mathbf{q}^N(t)\}$
"gemischter Zustand": Vielzahl (Ensemble) von Zuständen, beschrieben durch Verteilungsfunktion $\rho_{\mathrm{E}}(\mathbf{p}^N(t), \mathbf{q}^N(t))$

QM Zustandsvektor $|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_t$ entspricht einem reinen oder gemischten Zustand
Mittelwertbildung mit Hilfe des Dichteoperators $\hat{\rho}$, der folgende Eigenschaften hat

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger \qquad \mathrm{Sp}\,(\hat{\rho}) = 1 \qquad \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}^2\right) \leq 1$$

⋆ ist $|\Psi\rangle$ ein reiner Zustand, dann ist

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \qquad \mathrm{mit} \qquad \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \qquad \mathrm{und} \qquad \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}^2\right) = 1$$

und der Mittelwert einer Observablen X ist berechnet sich über

$$\langle X\rangle = \langle\Psi|\hat{X}\Psi\rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{X})$$

⋆ ist $|\Psi\rangle$ kein reiner Zustand, dann ist

$$\hat{\rho} = \sum_i |\Psi_i\rangle p_i \langle\Psi_i| \quad \text{mit} \quad \hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger \quad \hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho} \quad \text{und} \quad \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}^2\right) < 1$$

und der Mittelwert einer Observablen berechnet sich über

$$\langle X\rangle = \sum_i p_i \langle\Psi_i|\hat{X}\Psi_i\rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{X})$$

- zeitliche Entwicklung
  - KM klassische Hamilton-Bewegungsgleichungen, basierend auf der Hamilton-Funktion $\mathcal{H}(\mathbf{p}^N(t), \mathbf{q}^N(t))$
  - QM Hamilton-Operator $\hat{H}$ und Schrödinger-Gleichung
    es gilt die von Neumann-Gleichung (vgl. Liouville-Gleichung)

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]$$

- Observable
  - KM $X = X(\mathbf{p}^N(t), \mathbf{q}^N(t))$
    Zeitmittelwert: $\langle X\rangle_t$
    Scharmittelwert: $\langle X\rangle_{\mathrm{E}}$ in den verschiedenen Ensembles
  - QM Observable $X \Rightarrow$ selbstadjungierter Operator $\hat{X}$

- Ununterscheidbarkeit der Teilchen

  KM Sind die $\{\mathbf{p}^N(t), \mathbf{q}^N(t)\}$, sowie $\mathcal{H}$ und X unter Teilchenvertauschung invariant $\Rightarrow$ Korrekturfaktor $1/N!$ (Gibbs)

  QM Ununterscheidbarkeit stellt in der QM eine stärkere Forderung dar als in der KM

  $\Rightarrow$ zwei einander ausschließende Klassen ununterscheidbarer Teilchen mit weitreichenden Folgen

  - Bose-Teilchen: Teilchen mit ganzzahligem Spin
    (Photonen, Phononen, ...);
    Zustände sind vollkommen symmetrisch
  - Fermi-Teilchen: Teilchen mit halbzahligem Spin
    (Elektronen, Protonen, ...)
    Zustände sind vollkommen antisymmetrisch

  Sei $|\Psi\rangle$ Zustand eines N-Teilchensystems; Ortsdarstellung:

$$\langle(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N), \Psi\rangle = \Psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N)$$

  wobei $\mathbf{x}_i = \{\mathbf{q}_i, s_i\}$ mit $i = 1, \cdots, N$
  Bei einer Transposition p_{ij} gilt

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_i, \cdots, \mathbf{x}_j, \cdots, \mathbf{x}_N) = -\Psi(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_j, \cdots, \mathbf{x}_i, \cdots, \mathbf{x}_N)$$

  Bei einer Permutation $P = \Pi_{ij} p_{ij} \Rightarrow$ Vorfaktor $(-1)^{n(P)}$, wobei $n(P)$ Zahl der Transpositionen in P sind

weitere Bemerkungen

- Ähnlich wie in der klassischen Theorie, werden Erwartungswerte der Observablen in der quantisierten Theorie kleine Schwankungen um den Zeitmittelwert ausführen; "Streben ins Gleichgewicht"
- Wiederkehr

  KM Wiederkehrzeit von Poincaré

  QM Quantenmechanische "Wiederkehr":
  - ⋆ zeitliche Abhängigkeit eines reinen Zustandes: $\sim \exp[-i/\hbar E t]$
  - ⋆ zeitliche Abhängigkeit eines gemischten Zustandes:

    Linearkombination aus Faktoren $\exp[-i/\hbar E_n t]$

4.2 Quantenmechanische Dichteoperatoren

gegeben Hamilton-Operator $\hat{H}$ mit (orthonormierten) Eigenzuständen $\{|n\rangle\}$ und Energieeigenwerten $\{E_n\}$

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

- mikrokanonisches Ensemble
  Makrozustand definiert durch E, V, N
  zum mikrokanonischen Dichteoperator $\hat{\rho}_m$ tragen alle Eigenzustände $|n\rangle$ mit gleichem Gewicht bei, mit Energien aus $E_n \in [E - \Delta, E]$;
  Sei $\Omega(E; \Delta)$ Zahl der Energieeigenzustände im Intervall $[E - \Delta, E]$
  und sei

$$p(E_n) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E;\Delta)} & E_n \in [E - \Delta, E] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

  dann ist

$$\hat{\rho}_m = \sum_{n; E_n \in [E-\Delta, E]} |n\rangle p(E_n) \langle n| \qquad \text{mit} \qquad \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_m) = 1$$

mikrokanonischer Entropieoperator $\hat{S}_m$

$$\hat{S}_m = -k_\mathrm{B} \ln \hat{\rho}_m = -k_\mathrm{B} \sum_{n; E_n \in [E-\Delta, E]} |n\rangle \underbrace{\ln p(E_n)}_{-\ln \Omega(E;\Delta)} \langle n|$$

mit

$$\langle S_m \rangle_m = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_m \hat{S}_m) = \cdots = k_\mathrm{B} \ln \Omega(E; \Delta)$$

- kanonisches Ensemble

  Makrozustand definiert durch T, V, N

  Dichteoperator

$$\hat{\rho}_k = \frac{1}{Z_k} \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{Z_k} \sum_n |n\rangle \mathrm{e}^{-\beta E_n} \langle n| = \sum_n |n\rangle \underbrace{\frac{1}{Z_k} \mathrm{e}^{-\beta E_n}}_{p(E_n)} \langle n|$$

mit

$$Z_k(T, V, N) = \mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}\right) = \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n}$$

Thermodynamik

$$F(T,V,N) = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z_k$$

Mittelwert einer Observablen X ($\leftrightarrow$ Operator $\hat{X}$)

$$\langle X \rangle_k = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_k \hat{X})$$

kanonischer Entropieoperator $\hat{S}_k$

$$\hat{S}_k = -k_{\mathrm{B}} \ln \hat{\rho}_k$$

mit

$$\begin{aligned}
\langle S_k \rangle_k &= \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_k \hat{S}_k) = -k_{\mathrm{B}} \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_k \ln \hat{\rho}_k) = \\
&= -\underbrace{k_{\mathrm{B}} \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}_k \ln \exp[-\beta \hat{H}]\right)}_{-\frac{1}{T}\mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{H}) = -\frac{1}{T}\langle E \rangle_k} + k_{\mathrm{B}} \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_k \ln Z_k) = \\
&= \frac{1}{T}\langle E \rangle_k - \frac{1}{T} F
\end{aligned}$$

- großkanonisches Ensemble
  Makrozustand definiert durch T, V, μ
  Operator der Teilchenzahl $\hat{N}$: $\hat{N}|n\rangle = N|n\rangle$
  (Achtung: Hilbert-Raum)
  Dichteoperator

$$\hat{\rho}_g = \frac{1}{Z_g} \mathrm{e}^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}$$

mit (beachte $[\hat{H}, \hat{N}] = \hat{0}$)

$$Z_g(T, V, \mu) = \mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\right) = \sum_N \mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\right) = \sum_N Z_k \mathrm{e}^{\beta\mu N}$$

Mittelwert einer Observablen X ($\leftrightarrow$ Operator $\hat{X}$)

$$\langle X \rangle_g = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_g \hat{X})$$

großkanonischer Entropieoperator $\hat{S}_g$

$$\hat{S}_g = -k_\mathrm{B} \ln \hat{\rho}_g$$

mit

$$\begin{aligned} \langle S_g \rangle_g &= \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_g \hat{S}_g) = -k_\mathrm{B} \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_g \ln \hat{\rho}_g) = \cdots = \\ &= \frac{1}{T} \langle E \rangle_g - \frac{\mu}{T} \langle N \rangle_g - \frac{1}{T} J(T, V, \mu) \end{aligned}$$

4.3 Ideale Quantensysteme

Systeme nicht-wechselwirkender Teilchen, deren Wechselwirkung also entweder nicht vorhanden ist oder vernachlässigt werden kann

Beispiele:

- ideale Quantengase, Photonen, Phononen
- Elektronen im Magnetfeld
- ...

Dann ist

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{H}_\alpha \qquad \hat{H}_\alpha |\Psi_{\alpha,i_\alpha}\rangle = \epsilon_{\alpha,i_\alpha} |\Psi_{\alpha,i_\alpha}\rangle$$

$\sigma(\hat{H}_\alpha) = \{\epsilon_{\alpha,0}, \epsilon_{\alpha,1}, \dots\}$ Spektrum von $\hat{H}_\alpha$ $\quad \alpha = 1, \dots, N, \quad i = 0, 1, \dots$

Weiters

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \epsilon|\Psi\rangle \quad \text{mit} \quad |\Psi\rangle = \Pi_{\alpha=1}^{N} |\Psi_{\alpha,i_\alpha}\rangle \qquad \text{Produktzustand}$$

sowie

$$\epsilon = \sum_{\alpha=1}^{N} \epsilon_{\alpha,i_\alpha}$$

Beachte

- $|\Psi\rangle$ hat *a priori* keine Symmetrieeigenschaft
- Falls die N Teilchen ununterscheidbar sind, dann muß
  - $|\Psi\rangle$ bei Bose-Teilchen symmetrisiert werden
  - $|\Psi\rangle$ bei Fermi-Teilchen antisymmetrisiert werden
- Darstellung von $|\Psi\rangle$ mit Hilfe von Besetzungszahlen
  - Übergang von N-tupel der $(\epsilon_{\alpha=1,i_1}, \cdots, \epsilon_{\alpha=N,i_N})$ zu den Besetzungszahlen $(n_{i=0}, n_{i=1}, \cdots)$ der Energieniveaus $(\epsilon_{i=0}, \epsilon_{i=1}, \cdots)$ mit
  $$\sum_i n_i = N \qquad \text{und} \qquad \sum_i n_i \epsilon_i = E$$
  Summe über alle Indizes i (mit $i = 0, 1, \ldots$) des Spektrums
  - n_i gibt an, wieviele Teilchen sich in einem Zustand mit der Energie ϵ_i befinden (mit $i = 0, 1, \ldots$)
- Konsequenz
  - $n_i = 0, 1, 2, \cdots$ für Bose-Teilchen
  - $n_i = 0, 1$ für Fermi-Teilchen

Berechnung der Thermodynamik

- kanonisches Ensemble
  Einschränkung $\sum_i n_i = N$ ist immer zu beachten $\Rightarrow$ lästig
- großkanonisches Ensemble

$$
\begin{aligned}
Z_g &= \sum_N \underbrace{\mathrm{e}^{\beta\mu N}}_{z^N} Z_k(N) = \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{(n_0,n_1,\cdots);\sum_i n_i = N} z^{\sum_i n_i} \mathrm{e}^{-\beta \sum_i \epsilon_i n_i}
\end{aligned}
$$

mit

$$z = \mathrm{e}^{\beta\mu}$$

und

$$Z_k(N) = \sum_{(n_0,n_1,\cdots);\sum_i n_i = N} \mathrm{e}^{-\beta \sum_i \epsilon_i n_i}$$

explizite Berechnung von Z_g

$$
\begin{aligned}
Z_g &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{(n_0,n_1,\cdots);\sum_i n_i=N} z^{\sum_i n_i} \mathrm{e}^{-\beta\sum_i \epsilon_i n_i} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{(n_0,n_1,\cdots);\sum_i n_i=N} \Pi_i \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right)^{n_i} \\
&= \sum_{n_0,n_1,\cdots} \Pi_i \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right)^{n_i} \\
&= \sum_{n_0} \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_0}\right)^{n_0} \cdot \sum_{n_1} \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_1}\right)^{n_1} \cdot \quad \cdots \\
&= \Pi_i \left[\sum_{n_i} \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right)^{n_i}\right]
\end{aligned}
$$

(a) Bose-Teilchen: $n_i = 0, 1, 2, \cdots$
Zustandssumme, Thermodynamik

$$Z_g(T, V, \mu) = \Pi_i \underbrace{\left[\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right)^{n_i}\right]}_{\text{geometrische Reihe: } \sum_{l=0}^{\infty} x^l = \frac{1}{1-x}}$$

$$= \Pi_i \frac{1}{1 - z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}} = \Pi_i \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}}$$

$$J = -k_\mathrm{B} T \ln Z_g = k_\mathrm{B} T \sum_i \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}\right)$$

mittlere Teilchenzahl

$$\langle N \rangle_g = \bar{N} = k_\mathrm{B} T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_g$$

$$= k_\mathrm{B} T \frac{\partial}{\partial \mu} \left[-\sum_i \ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}\right)\right]$$

$$= -k_\mathrm{B} T \sum_i \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}} \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}(-1)\beta$$

also

$$\langle N \rangle_g = \bar{N} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} = \sum_i \langle n_i \rangle_g$$

mittlere Besetzungszahl

$$\langle n_i \rangle_g = \left(e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1 \right)^{-1} = \frac{z}{e^{\beta \epsilon_i} - z}$$

Bose-Einstein (BE) Verteilungsfunktion

Bemerkungen

- damit $\langle n_i \rangle_g \geq 0$ muß $\mu \leq \epsilon_0$
- für $\mu \to \epsilon_0^-$ divergiert $\langle n_i \rangle_g \Rightarrow$ Bose-Einstein-Kondensation

(b) Fermi-Teilchen: $n_i = 0, 1$
Zustandssumme, Thermodynamik

$$Z_g = \Pi_i \sum_{n_i=0,1} \left(z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right)^{n_i} = \Pi_i \left(1 + z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right)$$

$$\begin{aligned} J = -k_\mathrm{B} T \ln Z_g &= -k_\mathrm{B} T \sum_i \ln\left(1 + z\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right) \\ &= -k_\mathrm{B} T \sum_i \ln\left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}\right) \end{aligned}$$

mittlere Teilchenzahl

$$\begin{aligned} \langle N\rangle_g = \bar{N} &= k_\mathrm{B} T \frac{\partial}{\partial\mu} \ln Z_g \\ &= k_\mathrm{B} T \frac{\partial}{\partial\mu} \sum_i \ln\left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}\right) \\ &= k_\mathrm{B} T \sum_i \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}\right)^{-1} \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i-\mu)}\beta \\ &= \sum_i \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_i-\mu)}+1} = \sum_i \langle n_i\rangle_g \end{aligned}$$

mittlere Besetzungszahl

$$\langle n_i \rangle_g = \left(\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1 \right)^{-1}$$

Fermi-Dirac (FD) Verteilungsfunktion

Sei $x = \beta(\epsilon_i - \mu)$ dann gilt für $x \gg 1$, bzw. $(\epsilon_i - \mu) \gg k_\mathrm{B} T$:

$$\langle n_i \rangle_g \sim \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \quad \text{Maxwell – Boltzmann (MB) Verteilungsfunktion}$$

sowohl für die BE als auch für die FD Verteilungsfunktion

Zustandsgleichungen

$$\langle N \rangle_g = \sum_i \langle n_i \rangle_g \qquad \text{BE und FD}$$

mit

$$\langle n_i \rangle_g = \begin{cases} \left(\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1\right)^{-1} & \text{BE} \\ \left(\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1\right)^{-1} & \text{FD} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} PV &= -J = k_\mathrm{B} T \ln Z_g = \\ &= \mp k_\mathrm{B} T \sum_i \ln\left(1 \mp z \mathrm{e}^{-\beta\epsilon_i}\right) \qquad \text{BE } (-1), \text{ FD } (+1) \end{aligned}$$

$$\langle E \rangle_g = -\left(\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_g\right)_{\mu, V} + \mu \langle N \rangle_g = \cdots = \sum_i \epsilon_i \langle n_i \rangle_g \qquad \text{BE und FD}$$

$\Rightarrow$ kalorische und thermische Zustandsgleichungen (schwierig)

Zustandsdichte $\mathcal{D}(\epsilon)$

wenn die ϵ_i sehr dicht liegen, dann ist der Übergang zur sogenannten Zustandsdichte $\mathcal{D}(\epsilon)$ sinnvoll

Dabei ist $\int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon)$ die Zahl der Einteilchenzustände mit einer Energie aus $[\epsilon_1, \epsilon_2]$

Ist die kleinste Energie $\epsilon_0 = 0$, dann sei

$$\hat{\mathcal{D}}(\epsilon) = \int_0^{\epsilon} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) \qquad \text{bzw.} \qquad \mathcal{D}(\epsilon) = \frac{d}{d\epsilon}\hat{\mathcal{D}}(\epsilon)$$

Weiters gilt die Annahme, daß $\lim_{\epsilon\to\infty} \hat{\mathcal{D}}(\epsilon)\mathrm{e}^{-c\epsilon} = 0$ für alle $c > 0$;

dann gilt mit $\langle n_i \rangle_g \to f_{\mathrm{BE}}(\epsilon)$ bzw. $\langle n_i \rangle_g \to f_{\mathrm{FD}}(\epsilon)$

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle_g &= \int_0^{\infty} d\epsilon\, \mathcal{D}(\epsilon)\, f_{\mathrm{D}}(\epsilon) \\
PV &= \int_0^{\infty} d\epsilon\, \hat{\mathcal{D}}(\epsilon)\, f_{\mathrm{D}}(\epsilon) \\
\langle E \rangle_g &= \int_0^{\infty} d\epsilon\, \epsilon\, \mathcal{D}(\epsilon)\, f_{\mathrm{D}}(\epsilon)
\end{aligned}$$

mit D = BE oder FD

Zusammenfassend:

Die Eigenschaften idealer Quantensysteme sind vollständig durch die universellen Funktionen $f_{\rm BE}(\epsilon)$ bzw. $f_{\rm FD}(\epsilon)$ und durch die Zustandsdichte $\mathcal{D}(\epsilon)$ bestimmt, wobei $\mathcal{D}(\epsilon)$ vom Hamilton-Operator und der Dimension des Raumes abhängt.

Hinweis

$\mathcal{D}(\epsilon)$ wird im Allgemeinen aus den Dispersionsrelationen hergeleitet, also aus der Abhängigkeit $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$ und $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

Achtung bei Bose-Teilchen: Grundzustand und der Fall $z = 1$.

Nachbemerkung

Berücksichtigung einer möglichen Entartung bei der Berechnung der Thermodynamik idealer Quantensysteme

Besetzungszahl: $n_i \quad \Rightarrow \quad n_{\vec{\imath}}$

- $\vec{\imath}$ stellt nun einen Satz von Quantenzahlen dar
- $n_{\vec{\imath}}$ gibt an, wie oft der Satz von Quantenzahlen $\vec{\imath}$ in einem Zustand $|\Psi\rangle$ vorkommt
- aus Symmetrie-/Antisymmetriegründen gilt
    - Bose: $n_{\vec{\imath}} = 0, 1, 2, \cdots$
    - Fermi: $n_{\vec{\imath}} = 0, 1$
- es gilt

$$\sum_{\vec{\imath}} n_{\vec{\imath}} = N$$

Berechnung der Thermodynamik analog wie bei nicht-entarteten idealen Quantensystemen

- Bose-Systeme

$$Z_g = \Pi_{\vec{\imath}} \left(1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_{\vec{\imath}} - \mu)}\right)^{-1}$$

$$J = k_\mathrm{B} T \sum_{\vec{\imath}} \ln \left(1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_{\vec{\imath}} - \mu)}\right)$$

$$\langle N \rangle_g = \sum_{\vec{\imath}} \left(\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_{\vec{\imath}} - \mu)} - 1\right)^{-1} = \sum_{\vec{\imath}} \langle n_{\vec{\imath}} \rangle_g$$

- Fermi-Systeme

$$Z_g = \Pi_{\vec{\imath}} \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_{\vec{\imath}} - \mu)}\right)$$

$$J = -k_\mathrm{B} T \sum_{\vec{\imath}} \ln \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_{\vec{\imath}} - \mu)}\right)$$

$$\langle N \rangle_g = \sum_{\vec{\imath}} \left(\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_{\vec{\imath}} - \mu)} + 1\right)^{-1} = \sum_{\vec{\imath}} \langle n_{\vec{\imath}} \rangle_g$$