

III Ideale Quantengase

§1 Bose- und Fermistatistik

Bis jetzt haben wir nur das klassische Gas behandelt. Im folgenden sollen die wichtigsten Formeln für ein ideales Gas, bei dem die Quantenmechanik wirklich berücksichtigt ist, diskutiert werden. Die Energie ϵ_k eines Teilchens in einem Würfel $L \times L \times L$ ist

$$\epsilon_k = \vec{k}^2 \hbar^2 / (2m) \quad \text{mit} \quad \vec{k} = (2\pi/L) \{ \nu_1, \nu_2, \nu_3 \} \quad \text{und} \quad \mu_i \text{ ganz}$$

mit der Wellenfunktion

$$\psi_k(\vec{r}) \propto \exp(i \vec{k} \vec{r}) \quad .$$

Dabei hat man sogenannte periodische Randbedingungen gewählt: $\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \psi(\vec{r})$ mit dem Verschiebungsvektor $\vec{R} = L\{n_1, n_2, n_3\}$, wobei die $n_i = 0, \pm 1$ sind.

Mit vielen Teilchen N ist die Wellenfunktion Ψ ein Produkt der Einteilchenwellenfunktionen ψ , die Energie die Summe der Einteilchenenergien ϵ

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{perm} (\pm 1)^{perm} \prod_{n=1}^N \psi_{k_n}(\vec{r}_n) \quad , \quad E = \sum_{n=1}^N \epsilon_{k_n} \quad .$$

Sind die Teilchen ununterscheidbar, dann darf sich die Wellenfunktion nicht ändern, wenn man die Koordinaten in der Wellenfunktion Ψ vertauscht, dh. die Produktwellenfunktion ψ muß noch "symmetrisiert" werden. Dies geschieht in der folgenden Weise, man summiert über alle $N!$ Permutationen. Dabei unterscheidet man zwei Fälle:

- (a) Bosestatistik: alle Permutationen tragen mit einem positiven Vorzeichen bei.
- (b) Fermistatistik: alle ungeraden Permutationen tragen mit einem negativen Vorzeichen bei.

Die Antisymmetrie der Wellenfunktion unter Permutation von zwei Koordinaten hat zur Folge, daß keine Quantenzahl doppelt auftreten kann. In der Spektroskopie der Atome nennt man diese Tatsache das Pauliverbot für die elektronischen Zustände. Im anderen Fall können die Einteilchenzustände mit gleicher Quantenzahl k beliebig oft "besetzt" werden.

Man hat herausgefunden, daß alle Teilchen mit ganzen Spin, Bosonen sind, während alle Teilchen mit ungeradzahligem Spins Fermionen sind. Die beiden Quantenflüssigkeiten He_4 mit Spin 0 und He_3 mit Spin 1/2 verhalten sich wegen des Unterschieds im Kernspin völlig anders bei Temperaturen unter 3°K, allerdings sind die Wechselwirkungen zwischen den Heliumatomen groß, so daß das ideale Quantengas nicht ihre Eigenschaften bei tiefen Temperaturen erklären kann.

Mit dem chemischen Potential μ läßt sich die Zustandssumme sofort notieren:

- (a) Die Zustandssumme für ein einzelnes Niveau mit der Quantenzahl k ist:

$$Z_k^{(b)} = 1 + \exp(-(\epsilon_k - \mu)/k_B T) + \exp(-2(\epsilon_k - \mu)/k_B T) + \dots = 1/[1 - \exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))]$$

- (b) Die Zustandssumme für ein einzelnes Niveau mit der Quantenzahl k ist hier einfacher, weil das Niveau nur unbesetzt oder einmal besetzt sein kann

$$Z_k^{(f)} = 1 + \exp(-(\epsilon_k - \mu)/k_B T) \quad .$$

Die Zustandssumme über alle Einteilchenzustände ist dann $Z = \prod_k Z_k$, so daß das thermodynamische Potential $\Omega = -k_B T \ln Z$ folgende Summe ist

$$\begin{aligned} \text{(a) :} & \quad \Omega^{(b)} = k_B T \sum_k \ln[1 - \exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))] \\ \text{(b) :} & \quad \Omega^{(f)} = -k_B T \sum_k \ln[1 + \exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))] \end{aligned}$$

Um mit diesen Potentialen etwas anfangen zu können, muß man die Teilchenzahl N berechnen. Im Falle der Fermistatistik erhält man für die Besetzung des k -ten Quantenzustandes

$$\bar{n}_k^{(f)} = -\frac{\partial \Omega_k^{(f)}}{\partial \mu} = \frac{\exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))}{1 + \exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))} = \frac{1}{\exp((\epsilon_k - \mu)/(k_B T)) + 1}$$

dh. die *Fermiverteilung*. Für den Bosefall bekommt man analog

$$\bar{n}_k^{(b)} = -\frac{\partial \Omega_k^{(b)}}{\partial \mu} = \frac{\exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))}{1 - \exp(-(\epsilon_k - \mu)/(k_B T))} = \frac{1}{\exp((\epsilon_k - \mu)/(k_B T)) - 1}$$

die *Boseverteilung*.

Summiert man über alle k -Zustände oder benutzt die Gleichung $-\partial \Omega / \partial \mu = N$, dann erhält man

$$\begin{aligned} \text{(a) :} & \quad N^{(b)} = \sum_k 1 / [\exp((\epsilon_k - \mu)/(k_B T)) - 1] \\ \text{(b) :} & \quad N^{(f)} = \sum_k 1 / [\exp((\epsilon_k - \mu)/(k_B T)) + 1] \end{aligned}$$

Soweit die Formeln für die Potentiale und die Bose- und Fermiverteilung! Obwohl sie so ähnlich aussehen, beschreiben sie eine völlig verschiedene Physik bei tiefen Temperaturen. Bei hohen Temperaturen nähern sich die Quantengase in ihrem Verhalten jedoch dem klassischen idealen Gas. Statt der Temperaturen kann man auch die Dichten variieren, um vom Quantengas zum klassischen Gas zu kommen. Falls die Dichte gering ist, sind die Quanteneffekte klein.

Übung: Zeigen Sie, daß für $\mu \rightarrow -\infty$ die Formeln für das klassische ideale Gas herauskommen. Dies gilt sowohl für den Bose- als auch für den Fermifall!