

7. Quantum Statistics

a. Identical particles with negligible (elhanyagolható) interactions:

In quantum mechanics, particles can be **identical** and **indistinguishable**, e.g. electrons in an atom or a metal.

The intrinsic uncertainty in position and momentum therefore demands separate consideration of distinguishable and indistinguishable quantum particles.

Identical particles, also called indistinguishable or indiscernible particles, are particles that cannot be distinguished from one another, even in principle.

There are two main categories of identical particles: bosons, which can share quantum states, and fermions, which do not share quantum states due to the Pauli exclusion principle. Examples of bosons are photons, gluons, phonons, helium-4 nuclei and all mesons. Examples of fermions are electrons, neutrinos, quarks, protons, neutrons, and helium-3 nuclei.

The fact that particles can be identical has important consequences in statistical mechanics.

Calculations in statistical mechanics rely on probabilistic arguments. As a result, identical particles exhibit markedly different statistical behavior from distinguishable particles.

Vegyünk egy azonos részecskékből (pl. elektronok) álló rendszert. Két azonos részecske esetén a sajátérték-probléma megoldható, és ha felcseréljük egymással a két részecskét, akkor a sajátértékek nem változnak, tehát a Ψ hullámfüggvények közötti eltérést csak egy állandóval való szorzás jelentheti. Tegyük fel, hogy ez az állandó (a^2) legyen $a^2 = 1$, azaz létezik egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus hullámfüggvény-pár. A részecske megfigyelések azonban csak $\Psi^*\Psi$ -től függenek.

Ez azt jelenti, hogy a részecskék felcserélése nem változtat a mérés eredményén, ami a klasszikus fizikához képest egy lényeges különbség. Abban ugyanis minden egyes részecske "történetét" egymástól függetlenül végigkísérhetjük, ám a kvantummechanikában ez nincs így.

Amennyiben két részecske hullámfüggvénye átlapolódott, úgy a két részecske már megkülönböztethetetlen lesz. A természetben kétféle részecske létezik: bozonok és fermionok. A bozonok állapotfüggvénye szimmetrikus, és a spinkvantumszámuk egész szám ($0, \pm 1$), míg a fermionok állapotfüggvénye antiszimmetrikus, és spinkvantumszámuk $\frac{1}{2}$. Fermionok közé tartoznak például az elektronok, míg a bozonok közé a fotonok.

b. Micro state and macro state in quantum statistics: closed system.

A statisztikus fizika, ahol N db részecske (elektron) viselkedését írjuk le.

Tegyük fel, hogy egy rendszer hullámfüggvény Ψ , akkor a rendszer Ψ mikroállapotban van.

Általában viszont az energiaszintek elfajulóak, tehát egy E energiaszinten több különböző hullámfüggvény, így mikroállapot van.

Egy testben az elektronok különböző energiákon helyezkednek el. Így az $N(E)$ jelölés a rendszer makroállapotait adja meg. Az energiasajátértékeket E_n -nel, a mikroállapotok számát Z_n -nel, az elektronpopulációkat pedig N_n -nel jelöljük.

Általánosan elmondható, hogy zárt rendszer esetén az elektronok száma és a rendszer összenergiája állandó, vagyis:

$$\sum_i N_i = N$$

$$\sum_i N_i E_i = E_0.$$

A zárt rendszerre a következők igazak:

- A zárt rendszerben minden mikroállapot egyformán valószínű.
- A zárt rendszer "gyorsan" konvergál a legvalószínűbb makroállapothoz. Ez az egyensúly
- A makroállapot valószínűsége arányos az őt megvalósító mikroállapotok számával.

c. Thermodynamic probability for bosons, fermions and large classical molecules.

Az egy makroállapotot megvalósító mikroállapotok száma a makroállapot **termodinamikai valószínűsége**. Az összes makroállapot közül pedig az valószínű, amelyiknek legnagyobb a termodinamikai valószínűsége.

A fermionok mikroállapotainak számát a Fermi-Dirac statisztika írja le. A Z mikroállapotban N db fermiont $\binom{Z}{N}$ féleképpen lehet. Egy makroállapotot realizáló mikroállapotok száma: $N_i(E_i)$. Ebből a statisztikát a

$$w_{FD} = \prod_i \binom{Z}{N_i} = \prod_i \frac{Z_i!}{N_i!(Z_i - N_i)!}$$

kifejezés adja meg, ami tulajdonképpen egy ismétlés nélküli kombináció.

A bozonok makroállapotait előállító mikroállapotok számát a Bose-Einstein statisztika írja le. Az $N_1, N_2, \dots, N_i, \dots$ eloszlást megvalósító mikroállapotok számát egy ismétléses kombináció írja le, amely a következő:

$$w_{BE} = \prod_i \binom{N_i + Z_i - 1}{N_i} = \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}.$$

A megkülönböztethető testek statisztikáját a Maxwell-Boltzmann statisztika írja le, ezt szokás klasszikus statisztikának is nevezni:

$$w_{MB} = \frac{N!}{\prod_i N_i!} \prod_i Z_i^{N_i}.$$

d. Thermal equilibrium: the most probable macro state

Ha egy rendszert magára hagyunk, a megfigyelések szerint elegendően hosszú idő után a makroszkopikus állapotjelzők már nem változnak: beáll a *termodinamikai egyensúly* (TDE).

Az *egyensúly* fogalma mind a köznyelvben, mind pedig a fizikában idealizáció: mindkét esetben a körülöttünk lévő, állandóan változó világ valamilyen különleges, az ellentétes hatások kioltását jelentő állapotát jelenti; folyamatok esetében pedig – az előbbiek következtében – azok változatlan, időfüggetlen jellegét. Az egyensúlynak nagyon sok fajtája lehet: gondolhatunk például az erők egyensúlyára, pénzügyi vagy politikai egyensúlyra, vagy a kémiai folyamatok egyensúlyára. Statisztikus fizikában alapvető fogalom a *termodinamikai egyensúly*: egy magára hagyott makroszkopikus rendszer hosszú idő után termodinamikai egyensúlyba kerül, vagyis az azt jellemző (makroszkopikus) mennyiségek időfüggetlenné válnak.

Ez a definíció természetesen idealizáció, hiszen valódi fizikai rendszerek esetén az időfüggetlenségnek csak egy megfelelő időskálán és közelítő jelleggel van értelme. Képzeljünk el például egy csésze forró teát, amiben elkeverünk egy csepp tejet! A tej elkeveredése másodpercek alatt bekövetkezik, de a forró tea továbbra is kavarog a csészében. Egy perc alatt leáll a folyadék makroszkopikus áramlása, körülbelül egy óra alatt pedig lehűl a szoba hőmérsékletére. Ha még tovább várunk, akkor azt tapasztaljuk, hogy a tea hőmérséklete ingadozik a szoba hőmérsékletével a napszakok szerint, majd a napok skáláján a tea elpárolog. A tea állapota tehát folytonosan változik, mégis, a hűlés egyes pillanataiban valamilyen értelemben egyensúlyban van (mérhető és jó közelítéssel állandó a hőmérséklete, térfogata stb.).

e. The Fermi-Dirac, the Bose Einstein and the Maxwell Boltzmann statistics

The expected number of particles in an energy state i for B-E statistics is

$$n_i(\varepsilon_i) = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} - 1}$$

with $\varepsilon_i > \mu$ and where n_i is the number of particles in state i , g_i is the [degeneracy](#) of state i , ε_i is the [energy](#) of the i th state, μ is the [chemical potential](#), k is the [Boltzmann constant](#), and T is absolute [temperature](#). For comparison, the average number of fermions with energy ε_i given by [Fermi-Dirac particle-energy distribution](#) has a similar form,

$$\bar{n}_i(\varepsilon_i) = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} + 1}$$

The expected [number of particles](#) with energy ε_i for Maxwell-Boltzmann statistics is $\langle N_i \rangle$ where:

$$\langle N_i \rangle = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT}} = \frac{N}{Z} g_i e^{-\varepsilon_i/kT}$$

f. Electron gas in a large "box": population density functions of the Fermi-Dirac statistics

4.4. Az elektronok makroállapota

Vegyünk először a legegyszerűbb esetet, amikor is $T=0K$, és tegyük fel, hogy az energiaszint alacsonyabban van, mint a Fermi szint, tehát $E < E_F$. Ekkor a elektronok számát, amelyekre teljesül az előbbi feltétel az

$$N(E) = na^3 = \frac{\pi}{3} \frac{1}{E_0^{\frac{3}{2}}} E^{\frac{3}{2}}$$

összefüggés adja meg. Ennek tudatában pedig ki tudjuk számolni, hogy mennyi elektron van az E és $E+dE$ energiaszintek között:

$$dN = N(E + dE) - N(E) = \frac{dN}{dE} dE = \frac{\pi}{2E_0^{\frac{3}{2}}} E^{\frac{1}{2}} dE.$$

Most pedig tekintsük azt az esetet, amikor a hőmérséklet nem abszolút nulla fok. Ekkor a fenti összefüggés változik

$$dN = \rho(E) dE = \frac{\pi}{2E_0^{\frac{3}{2}}} \frac{E^{\frac{1}{2}}}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1} dE,$$

majd, ha felhasználjuk, hogy $E_0 = \frac{h^2}{8ma^2}$, akkor a kifejezésünket a következő alakban is írhatjuk:

$$dN = \frac{4\pi V (2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{E^{\frac{1}{2}}}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1} dE.$$

A fent definiált ρ sűrűségfüggvényt más alakokban is írhatjuk. A Fermi-Dirac statisztikának ezen kívül két másik sűrűségfüggvénye van. Az egyik az elektronok eloszlását adja meg a sebességkomponensek függvényében, azaz

$$\rho(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = 2V \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1} dv_x dv_y dv_z,$$

míg a másik a v és $v+dv$ közé eső sebességű elektronok számát adja meg:

$$dN = \rho(v)dv = 8\pi V \left(\frac{m}{h}\right)^3 v^2 \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1} dv.$$

Ezekből pedig látható, hogy a makroállapotok száma nem más, mint a mikroállapotok sűrűségének és a betöltés valószínűségének a szorzata, ahol a betöltés valószínűsége a Fermi-függvény, míg a mikroállapotok sűrűségét háromféle módon is megadhatjuk.