Moderne Theoretische Physik II
(Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Hantian Zhang, Manuel Egner **WS 23/24 – Blatt 11**

Abgabe: Fr., 26.01.2024, 11:30 Uhr; Besprechung: Di., 30.01.2024

---

1 Zentraler Grenzwertsatz

Es sei X_n eine Poisson-verteilete Zufallsvariable mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_{X_n}(x) = \frac{n^x e^{-n}}{x!} \quad \text{mit } x = 0, 1, 2, \dots \tag{1}$$

Zeigen Sie, dass sich die Verteilung der Größe

$$\frac{X_n - n}{\sqrt{n}} \tag{2}$$

im Limit $n \to \infty$ der einer Normalverteilung $\mathcal{N}(\mu = 0, \sigma^2 = 1)$ annähert.
Hinweis: Leiten Sie die Momenterzeugende Funktion $M_{X_n}(t)$ von X_n her, indem Sie die Gleichung

$$M_{X_n}(t) = \mathbb{E}\left[e^{tX_n}\right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbb{E}[X_n^k]}{k!} t^k\,,$$

benutzen und zeigen Sie danach, dass sich $M_{(X_n-n)/\sqrt{n}}(t)$ im betrachteten Limit der Momenterzeugenden Funktion der Normalverteilung annähert. $\mathbb{E}[...]$ beschreibt hier den Erwartungswert.

Solution

We start with

$$\begin{aligned} M_{X_n}(t) = \mathbb{E}\left[e^{tX_n}\right] &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbb{E}[X_n^k]}{k!} t^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sum_{x=0}^{\infty} x^k f_{X_n}(x)}{k!} t^k \\ &= e^{-n} \sum_{x=0}^{\infty} \frac{n^x}{x!} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k\, t^k}{k!} \right) = e^{-n} \sum_{x=0}^{\infty} \frac{n^x}{x!} e^{xt} = e^{-n} e^{ne^t} = e^{n(e^t-1)} \end{aligned} \tag{3}$$

In the next step, we derive

$$\begin{aligned} M_{\frac{X_n-n}{\sqrt{n}}}(t) &= \mathbb{E}\left[e^{(t\cdot\frac{X_n-n}{\sqrt{n}})}\right] = e^{-t\sqrt{n}}\,\mathbb{E}\left[e^{t\frac{X_n}{\sqrt{n}}}\right] \\ &= e^{-t\sqrt{n}} e^{n(e^{t/\sqrt{n}}-1)} = e^{-t\sqrt{n}+n(e^{t/\sqrt{n}}-1)}\,. \end{aligned} \tag{4}$$

In the $n \to \infty$ limit, we have

$$\lim_{n\to\infty} M_{\frac{X_n-n}{\sqrt{n}}}(t) = \lim_{n\to\infty} e^{\frac{t^2}{2}+\frac{t^3}{6\sqrt{n}}+\frac{t^4}{24n}+\cdots} = e^{\frac{t^2}{2}}\,, \tag{5}$$

which agrees with the moment generating function of normal distribution $\mathcal{N}(0,1)$.

2 Oberfläche der Einheitskugel

Berechnen Sie die Oberfläche der Einheitskugel in d Dimensionen. Kontrollieren Sie Ihr Resultat für $d = 1, 2, 3$.

solution

Die Oberfläeche der Einheitskugel in d Dimensionen beinhaltet alle Punkte, für die gilt

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_d^2 = |x|^2 = 1$$

Zur Berechnung der Oberfläche einer solhen Kugel betrachten wir das Integral

$$\begin{aligned} I_d &= \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x \, \exp(-|x|^2) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_d \, \exp(-x_1^2) \ldots \exp(-x_d^2) \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \exp(-x_1^2) \right)^d = I_1^d \end{aligned}$$

In kugelkoordinaten können wir I_d ausdrücken über

$$I_d = \int_0^\infty \mathrm{d}r \int \mathrm{d}\Omega_d \, \exp(-r^2) r^{d-1}$$

Die Oberfläche der Einhaeitskugel in d Dimensionen ist

$$O_d(1) = \int \mathrm{d}\Omega_d$$

womit wir erhalten:

$$I_d = O_d(1) \int_0^\infty \mathrm{d}r \, \exp(-r^2) r^{d-1}$$

solution

Wir wissen, dass $I_d = I_1^d = \sqrt{\pi}^d$. Das Integral über den Radialteil können wir auf die Definition Gamma-Funktion

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \; e^{-x} x^n = \Gamma(n+1)$$

zurückführen:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r \; \exp(-r^2) r^{d-1} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \mathrm{d}t \; e^{-t} t^{\frac{d}{2}-1} = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right),$$

wobei wir die Substitution $r^2 = t$ benutzt haben. Damit erhalten wir für ddie Oberfläche

$$O_d(1) = \frac{2\sqrt{\pi}^d}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}$$

Wir kontrollieren unsere Lösung. Für $d = \{1, 2, 3\}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} O_1(1) &= \frac{2\sqrt{\pi}}{\Gamma(1/2)} = 2 \\ O_2(1) &= \frac{2\sqrt{\pi}^2}{\Gamma(2/2)} = 2\pi \\ O_3(1) &= \frac{2\sqrt{\pi}^3}{\Gamma(3/2)} = \frac{4\sqrt{\pi}^3}{\Gamma(1/2)} = 4\pi \end{aligned}$$

---

3 (*) Harmonischer Oszillator: Mikrokanonischer Zustand (6 Punkte)

1. Betrachten Sie N gleichartige harmonische Oszillatoren, die nicht miteinander wechselwirken. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H = \sum_{i=1}^N \hbar\omega \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right),$$

wobei $a_i^\dagger$ und a_i Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind. Berechnen Sie $\Omega(E)$ mit

$$\Omega(E) = \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \delta \left(E - \hbar\omega \sum_j \left(n_j + \frac{1}{2} \right) \right).$$

(i) Schreiben Sie die δ-Funktion als ein Integral über die Expotentialfunktion.

solution

Wir starten mit dem gegebenen Ausdruck für $\Omega(E)$ und ersetzen die Delta-Funktion

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \delta\left(E - \hbar\omega \sum_j \left(n_j + \frac{1}{2}\right)\right) \\
&= \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ik\left(E - \hbar\omega \sum_j \left(n_j + \frac{1}{2}\right)\right)\right]
\end{aligned}$$

(ii) Die Summe im Exponenten kann als Produkt von Expotentialfunktionen geschrieben werden.

solution

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ik\left(E - \hbar\omega \sum_j \left(n_j + \frac{1}{2}\right)\right)\right] \\
&= \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ikE\right] \prod_j \exp\left[-ik\hbar\omega\left(n_j + \frac{1}{2}\right)\right] \\
&= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ikE\right] \prod_j \exp\left[-\frac{ik\hbar\omega}{2}\right] \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \exp\left[-ik\hbar\omega n_j\right]
\end{aligned}$$

(iii) Erkennen Sie nun, dass $\Omega(E)$ ausgedrückt ist als ein Produkt von N identischen Termen.

solution

Die Summen lassen sich umschreiben zu

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ikE\right] \prod_j \exp\left[-\frac{ik\hbar\omega}{2}\right] \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_N} \exp\left[-ik\hbar\omega n_j\right] \\
&= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ikE\right] \prod_j \exp\left[-\frac{ik\hbar\omega}{2}\right] \frac{1}{1 - \exp\left[-ik\hbar\omega\right]}
\end{aligned}$$

(iv) Sie erhalten ein Integral über einen Parameter k mit dem Integranden $\exp(Ng(k))$, wobei $g(k) = ikE/N - \log(2i\sin(k\hbar\omega/2))$.

solution

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ikE\right] \prod_j \frac{1}{\exp\left[\frac{ik\hbar\omega}{2}\right] - \exp\left[-\frac{ik\hbar\omega}{2}\right]} \\
&= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[ikE\right] \frac{1}{\left(2i\sin\left(\frac{\hbar k\omega}{2}\right)\right)^N}
\end{aligned}$$

(v) Nähern Sie dieses Integral, indem Sie $g(k)$ um das Maximum bei $k = k_0$ entwickeln und nach dem zweiten Term abbrechen.

solution

Das Maximum der Funktion $g(k)$ erhalten wir über die erste Ableitung

$$g'(k) = i\frac{E}{N} - \frac{\hbar\omega}{2}\cot\left(\frac{k\hbar\omega}{2}\right) = 0$$

Wir finden

$$\begin{aligned}
k_0 &= \frac{2}{\hbar\omega}\text{arccot}\left(\frac{2iE}{N\hbar\omega}\right) = -\frac{i}{\hbar\omega}\log\left(\frac{-\frac{2E}{N\hbar\omega}-1}{-\frac{2E}{N\hbar\omega}+1}\right)\\
&= -\frac{i}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{\hbar\omega}{2}+\frac{E}{N}}{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}\right)
\end{aligned}$$

wobei wir $\text{arccot}\,(x) = -\frac{i}{2}\log\left(\frac{ix-1}{ix+1}\right)$ verwendet haben. Wir entwickeln $g(k)$ bis zum zweiten Term in k und erhalten

$$\Omega(E) = \frac{1}{2\pi}\exp\left[Ng(k_0)\right]\int \mathrm{d}k\,\exp\left[\frac{N}{2}g''(k_0)(k-k_0)^2\right]$$

Wir setzen k_0 ein und erhalten

$$\begin{aligned}
g(k_0) &= ik_0\frac{E}{N} - \log\left(2i\sin\left(\text{arccot}\left(i\frac{2E}{\hbar N\omega}\right)\right)\right)\\
&= \frac{E}{N\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}\right) - \log\left(2i(-i)\frac{1}{\sqrt{1-\frac{1}{\left(\frac{2E}{\hbar N\omega}\right)^2}}\left(\frac{2E}{\hbar N\omega}\right)}\right)\\
&= \frac{E}{N\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}\right) - \log(2) + \log\left(\sqrt{\left(\frac{2E}{\hbar N\omega}\right)^2} - 1\right)\\
&= \frac{E}{N\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}\right) - \log(2) + \frac{1}{2}\log\left(\left(\frac{2E}{\hbar N\omega}-1\right)\left(\frac{2E}{\hbar N\omega}+1\right)\right)\\
&= \frac{E}{N\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}\right) + \frac{1}{2}\log\left(\left(\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}\right)\left(\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}\right)/\left(\hbar\omega\right)^2\right)\\
g''(k_0) &= \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\frac{1}{\sin^2\left(\frac{k_0\hbar\omega}{2}\right)} = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\frac{1}{\sin^2\left(\text{arccot}\left(i\frac{2E}{\hbar N\omega}\right)\right)}\\
&= \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\left(1-\left(\frac{2E}{N\hbar\omega}\right)^2\right) = \left(\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 - \left(\frac{E}{N}\right)^2\right)
\end{aligned}$$

wobei wir $\sin(\text{arccot}(ix)) = (-i)/(x\sqrt{1-1/x^2})$ verwendet haben.

(vi) Für das resultierende Gauss-Integral gibt es eine geschlossene Lösung. Geben Sie $\Omega(E)$ an.

solution

E ist die Energie des Gesamtsystems, $\hbar\omega/2$ ist die Grundzustandsenergie eines Oszillators, deshabl gilt $E >= N\hbar\omega/2$. Integral nimmt also die Form

$$\int \mathrm{d}k \, \exp\left[\frac{N}{2} g''(k_0)(k-k_0)^2\right] = \int \mathrm{d}k \, \exp\left[-\frac{N}{2}\left|\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 - \left(\frac{E}{N}\right)^2\right|(k-k_0)^2\right]$$

an und kann über

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \exp\left[-a(x-x_0)^2\right] = \sqrt{\pi/a}$$

berechnet werden und ergibt folglich lediglich einen Faktor (beachte: für die physikalischen Grössen sind nur Terme relevant, die eine Potenz von N haben, da nur diese für $S = \log(\Omega)$ Terme $\sim N$ erzeugen), die Anzahl der Zustände $\Omega(E)$ ergibt sich nach Umformen der Logarithmen schlussendlich mit

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \exp\left[N g(k_0)\right] \\
&= \exp\left[\frac{N}{\hbar\omega}\left\{\frac{E}{N}\left(\log\left(\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}\right) - \log\left(\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}\right)\right)\right.\right. \\
&\left.\left. + \frac{\hbar\omega}{2}\left(\log\left(\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}\right) - \log\left(\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}\right) - 2\log\left(\hbar\omega\right)\right)\right\}\right] \\
&= \exp\left[N\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\right) - \frac{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\right)\right)\right]
\end{aligned}$$

2. Verwenden Sie das Result für $\Omega(E)$, um die Entropie und schließlich die Temperatur zu erhalten.

solution

Die Entropie berechnet sich über

$$\begin{aligned}
S &= k_b \log\left(\Omega(E)\right) \\
&= k_b N\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\right) - \frac{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\right)\right)
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir die Temperatur über

$$\begin{aligned}
\frac{1}{T} &= \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} \\
&= k_b\left(\frac{1}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}+\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\right) - \frac{1}{\hbar\omega}\log\left(\frac{\frac{E}{N}-\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar\omega}\right)\right)
\end{aligned}$$

4 (*) Mischung von idealen Gasen (4 Punkte)

Der Erwartungswert eines Operators O berechnet sich über

$$\langle O \rangle = \int \frac{\mathrm{d}^{3N}p\, \mathrm{d}^{3N}q}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{N!} \rho\, O\,,$$

wobei ρ die Dichtematrix ist. Dabei wurde der Faktor $1/N!$ aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen eingeführt. Überzeugen Sie sich davon (vgl. Vorlesung), dass auf der Basis obiger Gleichung die Entropie eines idealen Gases gegen ist durch

$$S = kN \log(V/N) + \ldots\,,$$

wobei Terme, die hier nicht von Interesse sind, nicht explizit angegebn sind. Falls der Faktor $1/N!$ nicht vorhanden ist erhält man für die Entropie

$$S_{\mathrm{kl}} = kN \log(V) + \ldots\,.$$

Betrachten Sie nun ein isoliertes System, das in zwei gleich große Kammern mit Volumen V aufgeteilt ist. Diese sind durch eine Trennwand separiert. In jedem befindet sich ein ideales Gas. Die Trennwand wird nun entfernt, so dass eine quasistatische (aber irreversible) Durchmischung stattfindet. Berechnen Sie die Änderung der Entropie für folgende Fälle
(a) In beiden Kammern befinden sich unterschiedliche ideale Gase.

Solution

For distinguishable particles, the change of entropy is

$$\Delta S = S' - 2S = 2kN \log(2V/N) - 2kN \log(V/N) = 2kN \log(2)\,, \tag{6}$$

and

$$\Delta S_{\mathrm{kl}} = S' - 2S = 2kN \log(2V) - 2kN \log(V) = 2kN \log(2)\,. \tag{7}$$

We see that $\Delta S = \Delta S_{\mathrm{kl}}$, which implies that classically we actually treat particles to be distinguishable.

(b) In beiden Kammern befinden sich das gleiche ideale Gase.

Solution

For indistinguishable particles, the change of entropy is

$$\Delta S = S' - 2S = 2kN \log\left(\frac{2V}{2N}\right) - 2kN \log(V/N) = 0\,, \tag{8}$$

and

$$\Delta S_{\mathrm{kl}} = S' - 2S = 2kN \log(2V) - 2kN \log(V) = 2kN \log(2)\,. \tag{9}$$

We see that $\Delta S \neq \Delta S_{\mathrm{kl}}$ for indistinguishable (identical) particles, and the classical entropy S_{kl} is not *extensive*, but the entropy S is a proper *extensive* quantity.

Verwenden Sie sowohl S als auch S_{kl}. Interpretieren Sie das Ergebnis.