Lösungssammlung Übungsblätter Theo IV
Blatt 2

Luc Kusters

WS 19/20

Die Lösungen die hier zusammengefasst wurden, kommen großenteils von Oliver Liang Wen, obwohl ich selber einige Sachen hinzugefügt habe. Ich möchte mich insbesondere für seine gute und regelmäßige festlegung der Übungsgruppenmitschriften bedanken, ohne welches dieses Projekt gar nicht möglich wäre.

Die Lösungen gehören zu den Übungsblätter der von V. Meden gehaltene Vorlesung zur theoretische Physik IV: Statistische Physik und Thermodynamik an der RWTH Aachen, WS19/20.

Weder absolute Vollständichkeit noch absolute Korrektheit kann garrantiert werden! Bei Anmerkungen, Fragen, Korrekturen oder sonstiges, könnt ihr mich gerne per email erreichen:
ljbkusters@gmail.com

1. **Random walk und Diffusionsgleichung**

   a) Bestimme $P(x, t + \Delta t)$ als Fkt. von $P(x, t)$. Zeige dass $P(x, t)$ für $\Delta t, \Delta x \to 0$ die Diffusionsgleichung erfüllt.
   Um an Zeit $t + \Delta t$ am Ort x zu sein, müßte man am Zeit t am Ort $x - \Delta x$ oder $x + \Delta x$ gewesen sein:

$$P(x, t + \Delta t) = \frac{P(x - \Delta x, t) + P(x + \Delta x, t)}{2} \tag{1}$$

   Taylor entwickle um $\Delta t = 0$ (links) und um $\Delta x = 0$ (rechts)

$$P(x, t + \Delta t) = P(x, t) + \partial_t P(x, t)\Delta t + O\big((\Delta t)^2\big)$$
$$P(x \pm \Delta x, t) = P(x, t) \pm (\partial_x P(x, t))\Delta x + (\partial_x^2 P(x, t))\frac{(\Delta x)^2}{2} + O\big((\Delta x)^2\big)$$

   Sezte die Näherungen zurück in Gl. **??** ein, es Foltgt direkt:

$$\dot{P}(x, t)\Delta t = P''(x, t)\Delta x^2/2$$
$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = \underbrace{\frac{\Delta x^2}{2\Delta t}}_{D}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x, t)$$

   Dies ist die definition der Diffusionsgleichung.

   b) Zeige explizit das die gegebene Fkt. die Diffusionsgleichung erfüllt.
   Gegeben ist: $P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}e^{-x^2/4Dt} \quad (t > 0)$
   Einsetzen in der Diffusionsgleichung ergibt:

$$\partial_t P(x, t) = \left(-\frac{1}{2t} + \frac{x^2}{4Dt^2}\right)P(x, t)$$

$$\begin{aligned}\partial_x^2 P(x, t) &= \partial_x\Big(-\frac{x}{2Dt}P(x, t)\Big)\\ &= \left(-\frac{1}{2Dt} + \left(\frac{-x}{2Dt}\right)^2\right)P(x, t)\\ &= \frac{1}{D}\left(-\frac{1}{2t} + \frac{x^2}{4Dt^2}\right)P(x, t)\\ \partial_x^2 P(x, t) &= \frac{1}{D}\partial_t P(x, t)\end{aligned}$$

   für $t \to 0$ $P(x, t) \to \delta(x)$ (Es ist allgemein bekannt dass die Dirac-δ distribution eine Folge der gauß Funktion ist)

2. **Teilchen in Kasten**

a) Bestimme die mögliche Wellenfunktionen $\psi(n_x, n_y, n_z, \mathbf{x})$

i. Es gilt $L_x = L_y = L_z$

ii. Volumen $V = L_x L_y L_z$ mit $0 \leq x \leq L_x \quad 0 \leq y \leq L_y \quad 0 \leq z \leq L_z$

iii. Unendlich höher Potentialtopf $\psi \to 0$ am Rand

iv. Dimensionen unabhängig, Lösen in 1D reicht aus, bzw.: $\psi(\mathbf{x}) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$

Ansatz $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$$\begin{aligned}
\psi(0) &\stackrel{!}{=} 0 \\
A + B &\stackrel{!}{=} 0 \Leftrightarrow A = -B \\
\psi(x) &\stackrel{!}{=} A\Big(e^{ikx} - e^{-ikx}\Big) = 2iA\sin(xk) \\
\psi(L) &\stackrel{!}{=} 0 \\
2iA(\sin(kL)) &\stackrel{!}{=} 0 \\
\sin(kL) &\stackrel{!}{=} 0 \\
kL &\stackrel{!}{=} n\pi \Leftrightarrow k \stackrel{!}{=} \frac{n\pi}{L} \quad n \in \mathbb{N} \\
\psi(x) &= 2iA\sin\Big(\frac{n\pi}{L}x\Big) \\
\int |\psi(x)|^2 dx &\stackrel{!}{=} 1 \Leftrightarrow \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)
\end{aligned}$$

Es gilt: $\hat{\mathbf{H}}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$

$$\hat{\mathbf{H}}\psi_n(x) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\psi_n(x) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_n(x) = -k_n^2\frac{-\hbar^2}{2m}\psi(x) = E_n\psi_n(x)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = E_n \Leftrightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$$

Analog für y und z:

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\prod_{i=1}^{3}\sin\Big(\frac{\pi n_i}{L}x_i\Big)$$

$$E_{\mathbf{n}} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\big(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\big)$$

b) Bestimme die QM-Zustandsumme $\Phi_q(E)$

$$\Phi_q = \sum_{r:E_r(V,N)\leq E} 1$$

$$\Phi_q = \underbrace{\frac{1}{N!}}_{\text{Unterscheidbarkeit}} \cdot \underbrace{\sum_{n_x}^{\infty}\sum_{n_y}^{\infty}\sum_{n_z}^{\infty}}_{E_r\leq E} 1$$

Für nur 1 Teilchen:

$$\begin{aligned}\Phi_{N=1}(V,E,N) &\approx \frac{1}{N!}\frac{1}{2^3}\int_{-\infty}^{\infty} dn_x \int_{-\infty}^{\infty} dn_y \int_{-\infty}^{\infty} dn_z \cdot 1 \quad E_r \leq E \\ &= \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}\underbrace{\int_0^{\infty} dp_x \int_0^{\infty} dp_y \int_0^{\infty} dp_z \cdot 1}_{p_x^2+p_y^2+p_z^2\leq 2mE}\end{aligned}$$

Bemerke dass das $d\mathbf{p}$ Integral analog zur Volumen integral einer Kugel mit radius $R=\sqrt{2mE}$ ist.

$$\Phi_{N=1}(V,E,N) = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}V_k(R) \propto R^3 \propto E^{\frac{3}{2}}$$

Die Dichte ist dann gegeben durch:

$$\rho(E) = \frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E} \propto \sqrt{E}$$

Notiz: Für N Teilchen:

$$\Phi_N(V,E,N) = \frac{1}{N!}\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}V_k(3N\text{-dim}, R)$$

c) Bestimme die KL-Zustandsumme $\Phi_k(E)$ (coarse graining)

$$\begin{aligned}\Phi_k(E,V,N) &= A\int_\Gamma d^{6N}z \\ &= A\int d^{3N}p \int d^{3N}x \\ &= AL^3 \qquad \underbrace{\int d^{3N}p}_{\text{Kugel integral mit } R=\sqrt{2mE}}\end{aligned}$$

Für ein Teilchen wieder:

$$\Phi_k(E,V,N=1) \propto E^{\frac{3}{2}}$$

$$\Phi_q \stackrel{!}{=} \Phi_k$$

$$\Leftrightarrow A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}$$

d) Wie viele Quantenzahlen braucht man, um einen Zustand mit N unterscheidbaren Teilchen zu charakterisieren? Wie lautet dessen Energie?

Man braucht $3N$ Quantenzahlen (1 pro Dimension pro Teilchen).

$$\begin{aligned}E &= \sum_i^N \epsilon_i \\ &= \sum_i^N \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\mathbf{n}_i^2 \quad \mathbf{n}_i = (n_{i,x}, n_{i,y}, n_{i,z})^T\end{aligned}$$

3. **N ungekoppelte Spins im Magnetfeld**

a) Welche werte kann die Gesammtenergie als Fkt. von $m = N_\uparrow - N_\downarrow$ (Magnetisierung).

Es gilt $N = N_\uparrow + N_\downarrow = m + 2N_\downarrow \Leftrightarrow m = N - 2N_\downarrow$
mit $N_\downarrow \in \{0, 1, \dots, N\}$ folgt:

$$m \in \{-N, -N+2, -N+4, \dots, N-2, N\}$$

Für ein spin: $\epsilon_i = -2\mu_0 B s_i$

Gesammt Energie

$$E = \sum_i \epsilon_i = \sum_i -2\mu_0 B s_i = -2\mu_0 B \sum_i s_i$$

$$\begin{aligned}\sum_i s_i &= N_\uparrow\left(\frac{1}{2}\right) + N_\downarrow\left(-\frac{1}{2}\right)\\ &= \frac{1}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow)\\ &= \frac{1}{2}m\end{aligned}$$

Es folgt also: $E_m = -\mu_0 B m$

b) Berechne $\Omega(N, m)$ an. Es gibt $N!$ kombinationen von N spins. Um die $N_\uparrow$ und $N_\downarrow$ Permutationen zu berücksichtigen muss man mit $\frac{1}{N_\uparrow! N_\downarrow!}$ multiplizieren.

$$\Omega(N, N_\uparrow, N_\downarrow) = \frac{N!}{N_\uparrow! N_\downarrow!}$$

Wir möchten diesen Ausdruck umformen $\Omega(N, N_\uparrow, N_\downarrow) \to \Omega(N, m)$

Wir wissen aus (a) bereits: $N - 2N_\downarrow = m$ (sowie $N = N_\uparrow + N_\downarrow$). Mit simpele Algebra folgt:

$$N_\downarrow = \frac{N-m}{2} \quad \text{und} \quad N_\uparrow = \frac{N+m}{2}$$

Es folgt direkt:

$$\Omega(N, m) = \frac{N!}{\left(\frac{m+N}{2}\right)!\left(\frac{m-N}{2}\right)!}$$

c) Berechne $\langle s_i \rangle$

(Man erinnere sich, dass den i-ten Spin in nur Zwei zustände sein kann!)

Nach definition: $\langle s_i \rangle = \sum_{s_i \in \{\uparrow, \downarrow\}} s_i p_i$

Dabei ist p_i noch zu Bestimmen. Außerdem muss man berücksichtigen dass es viele Konfigurationen gibt, wo den i-ten Spin up oder down ist, d.h. die in die Summe nicht nur über 2 Komponenten summiert wird, sondern über **alle**Permutationen wo den i-ten Spin up oder down ist.

Man nehme an, dass jeden Zustand mit gleiche Wahrscheinlich zugänglich ist. D.h.:

$$p_i = p = \frac{1}{\Omega}$$

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\Omega}\left(\frac{1}{2}N(s_i =\uparrow) - \frac{1}{2}N(s_i =\downarrow)\right)$$

Wobei die $N(s_i =\uparrow)$ und $N(s_i =\downarrow)$ die Anzahl der Konfigurationen sind wobei der i-ten Spin $\uparrow$ bzw. $\downarrow$ ist.

Weil wir s_i fest annehmen, gibt es $\Omega(N-1, m' = m-1)$ Permutationen der anderen Spins falls $s_i =\uparrow$ und $\Omega(N-1, m' = m+1)$ Permutationen wo $s_i =\downarrow$. Man bemerke, dass den Gesammtmagnetisierung $(2s_i + m' = m)$ constant bleiben soll!

Es folgt also:

$$\begin{aligned}\langle s_i \rangle &= \frac{1}{2\Omega}[\Omega(N-1, m-1) + \Omega(N-1, m+1)] \\ &= \frac{1}{2}\frac{\left(\frac{N-m}{2}\right)!\left(\frac{N+m}{2}\right)!}{N!}\left[\frac{(N-1)!}{\left(\frac{N-m)}{2}\right)!\left(\frac{N+m-2}{2}\right)!} - \frac{(N-1)!}{\left(\frac{N-m-2}{2}\right)!\left(\frac{1N+m}{2}\right)!}\right]\end{aligned}$$

Mit etwas Algebra findet man:

$$\langle s_i \rangle = \frac{m}{2N}$$

Alternative (einfachere) Lösungsweg: Nach definition:

$$\langle s_i \rangle = \sum_n^{\Omega} (s_i)_n p_n$$

Mit mikrokanonsiches Ensemble $p_n = 1/\Omega$. Man erwarte für $N \to \infty$ $\frac{N_\uparrow}{N}$ up Spins und $\frac{N_\downarrow}{N}$ down Spins zu finden. Es folgt also direkt:

$$\begin{aligned}\sum_n^{\Omega} (s_i)_n p_n &= \frac{1}{\Omega}\left[\frac{1}{2}\frac{N_\uparrow}{N}\sum_n^{\Omega} 1 - \frac{1}{2}\frac{N_\downarrow}{N}\sum_n^{\Omega} 1\right] \\ &= \frac{1}{\cancel{\Omega}}\left[\frac{1}{2}\frac{N_\uparrow}{N}\cancel{\Omega} - \frac{1}{2}\frac{N_\downarrow}{N}\cancel{\Omega}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\frac{N+m}{2N} - \frac{N-m}{2N}\right] = \frac{m}{2N} = \langle s_i \rangle\end{aligned}$$

d) Berechne $\langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle$ (Schwankung)

$$\langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle = \langle (s_i)^2 - 2s_i\langle s_i \rangle + \langle s_i \rangle^2 \rangle$$

Aus der Linearität der Erwartungswert und mit $\langle\langle X \rangle\rangle = \langle X \rangle$ folgt:

$$\begin{aligned}\langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle &= \langle s_i^2 \rangle - 2\langle s_i \rangle^2 + \langle s_i \rangle^2 \\ \Leftrightarrow \langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle &= \langle s_i^2 \rangle - \langle s_i \rangle^2\end{aligned}$$

Dabei ist $\langle s_i^2 \rangle$ gegeben durch (wie in (c) einfachere Lösung):

$$\langle s_i^2 \rangle = \sum_n^{\Omega} (s_i^2)_n p_n = \frac{1}{\cancel{\Omega}}\left[\left(\frac{1}{2}\right)^2 \frac{N_\uparrow \cancel{\Omega}}{N} + \left(-\frac{1}{2}\right)^2 \frac{N_\uparrow \cancel{\Omega}}{N}\right] = \frac{1}{4}$$

$$\Delta s^2 = \frac{1}{4} - \frac{m^2}{4N^2}$$

e) Berechne $\langle s_i s_j \rangle$ (Korrelation)

i. Es gibt $\binom{N-2}{N_\uparrow - 2)}$ Permutationen mit $(i,j) = (\uparrow\uparrow)$. Die restmagnetisierung ist $m' = m - 2$

ii. Es gibt $\binom{N-2}{N_\downarrow - 2}$ Permutationen mit $(i,j) = (\downarrow\downarrow)$. Die restmagnetisierung ist $m' = m + 2$

iii. Es gibt $\binom{N-2}{\frac{N_\downarrow - 2 + m}{2}}$ Permutationen mit $(i,j) = (\uparrow\downarrow)$ oder $(i,j) = (\downarrow\uparrow)$ (man muss beide Konfigurationen berücksichtigen). Die restmagnetisierung ist unverändert.

Es folgt:

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{\Omega(N,m)} \left[\frac{1}{4}\omega(N-2, m-2) + \frac{1}{4}\Omega(N-2, m+2) - \frac{2}{4}\Omega(N-2, m) \right]$$

mit eine ganze Menge Algebra findet man:

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{m^2 - N}{4N(N-1)}$$

f) Berechne $\langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle$. Was passiert für $N \to \infty$?

Analog zu (d) ist

$$\langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

Es gilt Außerdem dass $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = \frac{m}{2N}$

Es folgt direkt durch einsetzen:

$$\langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \frac{N(m^2 - N) - m^2(N-1)}{4N^2(N-1)} = O\left(\frac{1}{N}\right) \overset{N \to \infty}{\to} 0$$

4. **Volumen einer d-dim. Hyperkugel**

   a) Analytische Lösung angeben (Nütze faktorisierung des Integrandes)

   Berechne $\int d^D x e^{-\mathbf{x}^2}$ mit D die anzahl der dimensionen. $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_D)$ und $\mathbf{x}^2 = \sum_{n=1}^{D} x_n^2$

   Es folg für unser integral:

$$\int dx_1 dx_2 \ldots dx_D e^{-\sum_{n=1}^{D} x_n^2}$$

$$\int dx_1 e^{-x_1^2} \int dx_2 e^{-x_2^2} \ldots \int dx_D e^{-x_D^2}$$

   Dabei löst man D-mal das Gauß

   b) Spalte das Integral in Radial- und Winkelintegral auf. Löse Radialanteil.

   c) Löse mit Koeffizientenvergleich aus (a) und (b) das gesammte integral auf.