

THEORETISCHE PHYSIK VI:

STATISTISCHE PHYSIK

J. BAUER

SS11

www.physik.uni-rostock.de/qtmps

I. Grundlagen (Wiederholung)

Vielteilchensysteme (Gase, Flüssigkeiten, Festkörper, ..., Universum):

- Mikrozustand (Teilchenkoord. u. Impulse bzw. Wellenfunktion)
nicht bestimmbar
- viele Mikrozustände beschreiben
gleichen Makrozustand, der durch
nur wenige Größen spezifiziert
werden kann (Energie, Volumen,
Druck, Magnetisierung...)
- Ziel: gewichte Mikrozustände
entsprechend der Wahrscheinlichkeit
ihres Auftretens (statistisches Ensemble).
Daraus lassen sich dann Aussagen
über den Makrozustand treffen,
dessen Ungenauigkeit im thermodyn.
Limit $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = \text{const.}$
gegen null geht.

Wahrscheinlichkeitstheorie

Sind x Werte, die von einer Zufallsvariablen X angenommen werden können.

Def. Wahrscheinlichkeitsdichte $w(x)$,

so daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx w(x) = 1$$

und der Mittelwert von X

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{w(x) x}$$

x wird mit $w(x)$ gewichtet

Def. n -tes Moment

$$\langle X^n \rangle =: \mu_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx w(x) x^n$$

Def. Schwankungsquadrat

$$(\Delta x)^2 := \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$$

Def. charakteristische Funktion

$$\chi(k) = \int dx e^{-ikx} w(x)$$

Umkehrung (Fourier-Transform)

$$w(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \chi(k)$$

Entwicklung von $\chi(k)$:

$$\begin{aligned}\chi(k) &= \int dx \sum_n \frac{(-ikx)^n}{n!} w(x) \\ &= \sum_n \frac{(-ik)^n}{n!} \int dx x^n w(x) \\ &= \sum_n \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle\end{aligned}\quad (*)$$

Erweiterung auf mehrere Zufallsvariable
(multidimensional oder mehrere Komponenten)

$$\vec{X} = (X_1, X_2, \dots), \quad \vec{x} = (x_1, x_2, \dots)$$

$$\langle F(\vec{X}) \rangle = \int d\vec{x} w(\vec{x}) F(\vec{x})\quad (**)$$

F ist selber Zufallsvariable

$$\langle F \rangle = \int df w_F(f) f$$

Was ist $w_F(f)$? Damit das Gleiche wie
in (*) herauskommt muß offenbar

$$w_F(f) = \langle \delta(F(\vec{X}) - f) \rangle, \quad (***)$$

denn dann gilt

$$\begin{aligned}\langle F \rangle &= \int df f \int d\vec{x} w(\vec{x}) \delta(F(\vec{x}) - f) \\ &= \int d\vec{x} F(\vec{x}) w(\vec{x}).\end{aligned}$$

Def. Korrelationen

$$K_{ij} = \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_j - \langle X_j \rangle) \rangle$$

geben an, wie stark Schwankungen um den Mittelwert voneinander abhängen (korreliert sind).

Beispiel: $W(X_1, X_2) = W(X_1) \tilde{W}(X_2)$
\
unabhängig

$$\begin{aligned} \Rightarrow K_{12} &= \int dx_1 dx_2 W(X_1) \tilde{W}(X_2) \\ &\quad \times \underbrace{(X_1 - \langle X_1 \rangle)(X_2 - \langle X_2 \rangle)}_{\begin{aligned} &X_1 X_2 - X_1 \langle X_2 \rangle - \langle X_1 \rangle X_2 \\ &+ \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \end{aligned}} \\ &= \int dx_1 X_1 W(X_1) \int dx_2 X_2 \tilde{W}(X_2) \\ &\quad - \int dx_1 X_1 W(X_1) \langle X_2 \rangle \underbrace{\int dx_2 \tilde{W}(X_2)}_1 \\ &\quad - \langle X_1 \rangle \underbrace{\int dx_1 W(X_1)}_1 \int dx_2 X_2 \tilde{W}(X_2) \\ &\quad + \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \underbrace{\int dx_1 W(X_1)}_1 \underbrace{\int dx_2 \tilde{W}(X_2)}_1 \\ &= \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle - 2 \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \\ &\quad + \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle = 0 \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte bei mehreren Zufallsvariablen:

$$P_n(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Ausbedeutungen von Zufallsvariablen

z.B. $P_{n-1}(x_1 \dots x_{n-1}) = \int dx_n P_n(x_1 \dots x_n)$

Betrachte

$$\begin{aligned} P_n(x_1 \dots x_n) &= P_{k|n-k}(x_1 \dots x_k | x_{k+1} \dots x_n) \\ &\quad \times \underbrace{P_{n-k}(x_{k+1} \dots x_n)} \\ &= \int dx_1 \dots \int dx_k P_n(x_1 \dots x_n) \end{aligned}$$

P_{n-k} : Wahsch., dass Werte $x_{k+1} \dots x_n$ angenommen werden, wobei $x_1 \dots x_k$ beliebig sind

$\Rightarrow P_{k|n-k}$ Wahsch., dass Werte $x_1 \dots x_k$ angenommen werden, wenn $x_{k+1} \dots x_n$ bereits feststehen

$\rightarrow P_{k|n-k}$ ist bedingte Wahrscheinlichkeit

Zentraler Grenzwertsatz

$$Y = X_1 + X_2 + \dots + X_N, \quad N \rightarrow \infty$$

z.B. $\uparrow \quad \uparrow$
Einheitschen energies $\Rightarrow Y = \text{Gesamtenergie}$

Selbe Verteilung für alle Werte x_i , $i=1 \dots N$
 $w(x_i)$, so dass $\langle X \rangle := \langle X_i \rangle$

Was ist $w_Y(y)$?

Betrachte

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i (x_i - \langle X \rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} Y - \frac{N}{\sqrt{N}} \langle X \rangle \\ &= \frac{Y - N \langle X \rangle}{\sqrt{N}} \quad (*) \end{aligned}$$

Mit (**) auf Seite 3 $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} w_Z(z) &= \left\langle \delta\left(\frac{x_1 + x_2 + \dots + x_N - N \langle X \rangle}{\sqrt{N}} - z\right) \right\rangle \\ &= \int dx_1 \dots dx_N w(x_1) \dots \int \frac{dk}{2\pi} \exp\left(ikz - ik \frac{x_1 + \dots + x_N - N \langle X \rangle}{\sqrt{N}}\right) \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikz + ik\sqrt{N}\langle X \rangle} \underbrace{\left(\int dx w(x) e^{-ikx/\sqrt{N}}\right)^N}_{\chi\left(\frac{k}{\sqrt{N}}\right)} \end{aligned}$$

Wir schreiben nun

$$\chi(q) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-iq)^n}{n!} C_n\right)$$

und vergleichen dies mit (6) auf Seite 3,⁷

$$\chi(q) = \sum_n \frac{(-iq)^n}{n!} \langle X^n \rangle,$$

d.h. wir suchen Beziehungen zwischen den Momenten $\langle X^n \rangle$ und den sog. Kumulanten C_n .

Offenbar muß

$$\sum_m \frac{1}{m!} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-iq)^n}{n!} C_n \right)^m \stackrel{!}{=} \sum_n \frac{(-iq)^n}{n!} \langle X^n \rangle.$$

Vergleich gleicher Ordnungen in q liefert für

$$q^0: 1 = 1$$

$$q^1: -iq C_1 = -iq \langle X \rangle \Rightarrow C_1 = \langle X \rangle$$

$n=1$
 $m=1$
auf linker Seite

$$q^2: \frac{1}{2}((-iq) C_1)^2 + \frac{1}{2}(-iq)^2 C_2 = (-iq)^2 \frac{1}{2} \langle X^2 \rangle$$

$n=1, m=2$
oder
 $n=2, m=1$

$$\Rightarrow C_2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = (\Delta X)^2$$

Man findet für C_3 :

$$C_3 = \langle X^3 \rangle - 3 \langle X^2 \rangle \langle X \rangle + 2 \langle X \rangle^3$$

$$\Rightarrow W_2(z) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikz + ik \sqrt{N} \langle X \rangle}$$

$$\times \exp \left(N \left[-i \frac{k}{\sqrt{N}} \langle X \rangle - \frac{1}{2} \frac{k^2}{N} (\Delta X)^2 + \dots \right] \right)$$

$$= \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikz - \frac{1}{2}k^2(\Delta x)^2 + \dots} \quad (*)$$

Die Terme ... gehen mindestens wie $\frac{1}{\sqrt{N}}$ für $N \rightarrow \infty$ gegen null,

(*) ist Fouriers-Transform einer Gauß-Funktion

$$\Rightarrow w_z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta x)^2}} e^{-\frac{z^2}{2(\Delta x)^2}}$$

Eigentlich interessiert uns $w_y(y)$.

$$\text{Da } w_y(y) dy = w_z(z) dz$$

und für jeden möglichen Wert y oder z gemäß (*) auf Seite 6 gilt

$$z = \frac{y - N\langle x \rangle}{\sqrt{N}}$$

$$\Rightarrow \frac{dz}{dy} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow w_y(y) &= \frac{dz}{dy} w_z(z(y)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta x)^2}} e^{-\frac{(y - N\langle x \rangle)^2}{2N(\Delta x)^2}} \end{aligned}$$

$\rightarrow w_y(y)$ ist Gauß-Verteilung, unabhängig von $w(x)$!

(Zentraler Grenzwertsatz)