Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Musterlösung zu Blatt 3
Besprechung: 12.05.2017

---

1. Thermodynamische Relationen: $(6 + 4 + 5 + 5 = 20$ Punkte)

Auf diesem Übungsblatt verwenden wir die Notation aus der Vorlesung:

$$\text{Jacobi-Matrix:}\quad \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} = \begin{pmatrix} \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_y & \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_x \\ \left.\frac{\partial v}{\partial x}\right|_y & \left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_x \end{pmatrix},$$

$$\text{Jacobi-Determinante:}\quad \left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| = \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_y \left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_x - \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_x \left.\frac{\partial v}{\partial x}\right|_y .$$

(a) Beweisen Sie die Maxwell-Relation aus Aufgabe 2b von Blatt 2:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial L}\right)_T = -\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right)_L . \tag{1}$$

Berechnen Sie die Jacobi-Determinante $\left|\frac{\partial(T,S)}{\partial(\sigma,L)}\right|$.

Lösung:

Die Änderung der inneren Energie U des Bandes ist durch $dU = TdS + \sigma dL$ gegeben, wobei σdL die Arbeit bezeichnet, die verrichtet wird um das Gummiband um die Strecke dL zu dehnen. Daraus folgt die Änderung der freien Energie

$$dF = dU - TdS - SdT = -SdT + \sigma dL. \tag{2}$$

Andererseits kann die freie Energie in folgender Form geschrieben werden:

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_L dT + \left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_T dL. \tag{3}$$

Der Vergleich der Gleichungen (2) und (3) liefert

$$\begin{aligned} -S &= \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_L , \\ \sigma &= \left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_T . \end{aligned} \tag{4}$$

Unter Verwendung der Vertauschbarkeit der zweiten Ableitungen von F und Gleichung (4) kann man schreiben

$$\left[\frac{\partial}{\partial L}\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_L\right]_T = \left[\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_T\right]_L . \tag{5}$$

Durch Einsetzen von Gleichung (4) in (5), erhält man

$$\left(\frac{\partial S}{\partial L}\right)_T = -\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right)_L . \tag{6}$$

Mit den Relationen von Blatt 1 kann man die Maxwell-Relation (6) in der Form einer Jacobi-Determinanten schreiben

$$\left|\frac{\partial(S,T)}{\partial(L,T)}\right| = -\left|\frac{\partial(\sigma,L)}{\partial(T,L)}\right| . \tag{7}$$

Damit erhält man das Resultat

$$\frac{\partial(T,S)}{\partial(\sigma,L)} = \left|\frac{\partial(T,S)}{\partial(L,T)}\right| \Big/ \left|\frac{\partial(\sigma,L)}{\partial(L,T)}\right| = \left|\frac{\partial(S,T)}{\partial(L,T)}\right| \Big/ \left|\frac{\partial(\sigma,L)}{\partial(T,L)}\right| = -1. \tag{8}$$

(b) Leiten Sie den folgenden Zusammenhang zwischen Wärmekapazitäten her:

$$c_p - c_V = -T\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T} . \tag{9}$$

Lösung:

- $C_p - C_V = TV\frac{\alpha^2}{\varkappa_T} > 0$

Beweis : $C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = T\left[\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p\right]$

$= C_V + T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$

Maxwell-Rel.

$\Longrightarrow C_p - C_V = T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = -T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p^2\frac{1}{(\partial V/\partial p)_T}$

$\alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$ thermischer Ausdehnungkoeff.

$\varkappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T > 0$ Kompressibilität

$= TV\frac{\alpha^2}{\varkappa_T} > 0$

Abbildung 1: $c_p - c_V > 0$: Beweis aus der Vorlesung.

Wir beginnen mit der Gleichung aus der Vorlesung (s. Abb. 1):

$$c_p - c_V = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p . \tag{10}$$

Weiterhin können wir verwenden, dass

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \left|\frac{\partial(V,p)}{\partial(T,p)}\right| = -\left|\frac{\partial(p,V)}{\partial(T,V)}\right| \Big/ \left|\frac{\partial(p,T)}{\partial(V,T)}\right| = -\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T}. \tag{11}$$

Durch Einsetzen dieser Gleichung in Gl. (10) erhält man das gewünschte Resultat:

$$c_p - c_V = -T\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T}. \tag{12}$$

Bemerkung. Man kann Gl. (10) mit Hilfe von Jacobi-Determinanten wie folgt ableiten:

$$\begin{aligned} c_V &= T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = T\left|\frac{\partial(S,V)}{\partial(T,V)}\right| = T\left|\frac{\partial(S,V)}{\partial(T,p)}\right| \Big/ \left|\frac{\partial(T,V)}{\partial(T,p)}\right| \\ &= c_p - T\frac{\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p}{\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T}, \end{aligned} \tag{13}$$

wobei

$$c_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p. \tag{14}$$

Unter Verwendung von

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T,$$

folgt

$$c_p - c_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p. \tag{15}$$

Analog zu Aufgabe 1(a) dieser Übung erhält man die Maxwell-Relation

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V.$$

Setzt man diese Relation in Gl. (15) ein, so erhält man Gl. (10).

(c) Zeigen Sie, dass für ein magnetisches System (Magnetisierung M) im äußeren Magnetfeld B die Relation

$$\frac{c_M}{c_B} = \frac{\chi_S}{\chi_T} \tag{16}$$

gilt, wobei

$$c_M = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_M, \quad c_B = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B, \quad \chi_S = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_S, \quad \chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T.$$

Lösung:
Analog zur Beziehung $c_p/c_V = \varkappa_T/\varkappa_S$ aus der Vorlesung:

$$\begin{aligned} c_M &= T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_M = T\left|\frac{\partial(S,M)}{\partial(T,M)}\right| = T\left|\frac{\partial(S,M)}{\partial(S,B)}\right|\left|\frac{\partial(S,B)}{\partial(T,B)}\right|\left|\frac{\partial(T,B)}{\partial(T,M)}\right| \\ &= T\underbrace{\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_S}_{\chi_S}\underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B}_{c_B/T}\underbrace{\left(\frac{\partial B}{\partial M}\right)_T}_{1/\chi_T} = c_B\frac{\chi_S}{\chi_T}. \end{aligned} \tag{17}$$

(d) Beweisen Sie die Relation

$$c_B - c_M = T\frac{\alpha_B^2}{\chi_T} \tag{18}$$

mit dem Temperaturkoeffizienten der Magnetisierung

$$\alpha_B = \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_B.$$

Lösung:
Mit der gleichen Strategie, die in der Vorlesung für $c_p - c_V$ (s. Abb. 1) angewendet wurde, erhalten wir:

$$\begin{aligned} \frac{c_B}{T} &= \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_M + \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_T\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_B \\ \Rightarrow \quad c_B - c_M &= T\left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_T \alpha_B. \end{aligned} \tag{19}$$

Arbeit bei der Änderung des externen Magnetfeld $\vec{B}$ (Vorlesung):

$$\delta W = \vec{M}\mathrm{d}\vec{B}.$$

Die innere Energie:

$$\mathrm{d}U = \delta Q - \delta W = T\mathrm{d}S - M\mathrm{d}B. \tag{20}$$

Vertauschbarkeit der zweiten Ableitungen von U:

$$\left[\frac{\partial}{\partial B}\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_B\right]_S = \left[\frac{\partial}{\partial S}\left(\frac{\partial U}{\partial B}\right)_S\right]_B. \tag{21}$$

Maxwell-Relation:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial B}\right)_S = -\left(\frac{\partial M}{\partial S}\right)_B \Leftrightarrow \left|\frac{\partial(T,S)}{\partial(B,S)}\right| = -\left|\frac{\partial(M,B)}{\partial(S,B)}\right|$$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \left|\frac{\partial(S,T)}{\partial(M,T)}\right| / \left|\frac{\partial(S,B)}{\partial(M,T)}\right| = -\left|\frac{\partial(M,B)}{\partial(T,B)}\right| / \left|\frac{\partial(S,B)}{\partial(T,B)}\right| \\ &\Rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_T = \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_B \left|\frac{\partial(S,B)}{\partial(M,T)}\right| / \left|\frac{\partial(S,B)}{\partial(B,T)}\right| = \frac{\alpha_B}{\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T} = \frac{\alpha_B}{\chi_T}. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir schließlich

$$c_B - c_M = T\frac{\alpha_B^2}{\chi_T}.$$

2. Behälter mit zwei Kammern (5+10=15 Punkte)

Ein thermisch abgeschlossener Behälter ist durch eine Trennwand in zwei Kammern unterteilt. Beide Kammern enthalten ideale Gase mit konstanter Wärmekapazität c_V. Die eine Kammer enthält N_A Teilchen bei der Temperatur T_A und dem Druck p_A, die andere N_B Teilchen bei der Temperatur T_B und dem Druck p_B.

(a) Nun werde die thermische Isolierung der Trennwand entfernt und die Trennwand verschiebbar gemacht. Berechnen Sie den Druck p und die Temperatur T des Systems im Gleichgewicht.

Lösung:

Vor der Zustandsänderung ist für die beiden Teilsysteme bekannt:

$$\text{Kammer A}: \quad p_A,\, T_A,\, N_A, \qquad \text{Kammer B}: \quad p_B,\, T_B,\, N_B.$$

Nach der Zustandsänderung haben wir:

$$\text{Kammer A}: \quad p,\, T,\, N_A, \qquad \text{Kammer B}: \quad p,\, T,\, N_B.$$

Die inneren Energien sind nach der idealen Gasgleichung durch

$$\begin{aligned}
\text{vorher}: \quad & U_A^{(i)} = \frac{3}{2}N_A k T_A, \quad U_B^{(i)} = \frac{3}{2}N_B k T_B, \quad U^{(i)} = U_A^{(i)} + U_B^{(i)}, \\
\text{nachher}: \quad & U_A^{(f)} = \frac{3}{2}N_A k T, \quad U_B^{(f)} = \frac{3}{2}N_B k T, \quad U^{(f)} = U_A^{(f)} + U_B^{(f)}.
\end{aligned}$$

gegeben, wobei k die Boltzmann-Konstante ist. Das Gesamtsystem kann keine Wärme abgeben oder aufnehmen, da es thermisch isoliert ist.
Daraus ergibt sich:

$$\begin{aligned}
U^{(i)} &= U^{(f)} \quad \Rightarrow \quad (N_A + N_B)\frac{3}{2}kT = \frac{3}{2}k(N_A T_A + N_B T_B) \\
\Rightarrow \quad T &= \frac{N_A T_A + N_B T_B}{N_A + N_B}. \qquad (22)
\end{aligned}$$

Berechnen wir nun den Druck nach der Zustandsänderung. Das Gesamtvolumen V bleibt konstant:

$$\begin{aligned}
\text{vorher}: \quad & V = V_A^{(i)} + V_B^{(i)} \\
\text{nachher}: \quad & V = V_A^{(f)} + V_B^{(f)}.
\end{aligned}$$

Dazu betrachten wir wieder die ideale Gasgleichung:

$$\begin{aligned}
\text{vorher}: \quad & p_A V_A^{(i)} = N_A k T_A, \quad p_B V_B^{(i)} = N_B k T_B \quad \Rightarrow \quad V = \frac{N_A k T_A}{p_A} + \frac{N_B k T_B}{p_B}, \\
\text{nachher}: \quad & p V_A^{(f)} = N_A k T, \quad p V_B^{(f)} = N_B k T.
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich für das Gesamtsystem nach der Zustandsänderung:

$$\begin{aligned}
p(V_A^{(f)} + V_B^{(f)}) &= (N_A + N_B)kT \\
\Rightarrow p = k\frac{N_A T_A + N_B T_B}{V} &= k\frac{(N_A T_A + N_B T_B)p_A p_B}{N_A k T_A p_B + N_B k T_B p_A}. \qquad (23)
\end{aligned}$$

(b) Anschließend wird die Trennwand entfernt. Berechnen Sie die Änderung ΔS der Gesamtentropie aufgrund der Mischung für die beiden Fälle: (i) verschiedene Gase; (ii) identische Gase.

Lösung:

Fall 1: verschiedene Gase

Entropieänderung für ein ideales Gas ($T_1 \to T_2$ und $V_1 \to V_2$, c_V bleibt konstant):

$$\Delta S = c_V \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + Nk\ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right).$$

Für beide Gase hat sich bei konstanter Teilchenzahl, Druck, Temperatur das Volumen vergößert:

$$\begin{aligned}\Delta S_A &= N_A k \ln\left(\frac{V}{V_A^{(f)}}\right)\\ \Delta S_B &= N_B k \ln\left(\frac{V}{V_B^{(f)}}\right).\end{aligned}$$

Aufgabe 2(a):

$$\begin{aligned}V_A^{(f)} &= \frac{N_A kT}{p} = N_A\frac{N_A kT_A p_B + N_B kT_B p_A}{(N_A + N_B)p_A p_B},\\ V_B^{(f)} &= \frac{N_B kT}{p} = N_B\frac{N_A kT_A p_B + N_B kT_B p_A}{(N_A + N_B)p_A p_B},\\ V &= \frac{N_A kT_A p_B + N_B kT_B p_A}{p_A p_B}.\end{aligned} \tag{24}$$

Damit ergibt sich die Summe der beiden Entropieänderungen, die sog. Mischungsentropie zu:

$$\begin{aligned}\Delta S &= \Delta S_A + \Delta S_B = N_A k \ln\left(\frac{V}{V_A^{(f)}}\right) + N_B k \ln\left(\frac{V}{V_B^{(f)}}\right)\\ &= N_A k \ln\left(\frac{N_A + N_B}{N_A}\right) + N_B k \ln\left(\frac{N_A + N_B}{N_B}\right).\end{aligned} \tag{25}$$

Offensichtlich ist die Entropieänderung positiv: $\Delta S > 0$.

Fall 2: gleiche Gase

Hier muss man etwas anders argumentieren: Nach dem Entfernen der Wand haben wir ein Gas mit $N_A + N_B$ Teilchen, man kann nach dem Mischungsprozess keine Entropien mehr für beide Teil-Gase berechnen. Der Mischungsprozess bestand lediglich darin, dass wir die Wand zwischen zwei identischen, im thermischen Gleichgewicht befindlichen Gasen herausgenommen haben, physikalisch hat sich aber nichts am Gesamtsystem geändert, weil die Gase ja identisch waren. Also kann sich auch die Entropie nicht geändert haben: $\Delta S = 0$.

Bemerkung:

Wenn man naiv das Ergebnis für die Mischentropie von verschiedenen Gasen (25) auf die Situation gleicher Gase anwendet, bekommt man eine endliche Entropieänderung. Dies ist als ***Gibbs'sches Paradoxon*** bekannt. Um dieses Paradoxon zu lösen, ist es wichtig, die Ununterscheidbarkeit der Partikel (d.h. den Faktor $1/N!$ in der Anzahl der möglichen Zustände) zu berücksichtigen.
Die Entropie eines idealen Gases, das aus ununterscheidbaren Teilchen besteht, lautet (die Ableitung wird später in der Vorlesung diskutiert):

$$S \;=\; Nk\ln\left(\frac{V}{NV_0}\right) \;+\; \frac{5}{2}Nk,$$

wobei V_0 =konst.

$$\text{vorher}: \quad S^{(i)} = S_A^{(i)} \;+\; S_B^{(i)} \;=\; N_Ak\ln\frac{V_A^{(f)}}{N_AV_0} \;+\; N_Bk\ln\frac{V_B^{(f)}}{N_BV_0} + \frac{5}{2}k\left(N_A+N_B\right)$$

$$\text{nachher}: \quad S^{(f)} = (N_A \;+\; N_B)k\ln\frac{V}{(N_A+N_B)V_0} + \frac{5}{2}\left(N_A+N_A\right).$$

Daraus berechnen wir dann wieder die Entropieänderung:

$$\begin{aligned}
\Delta S \;&=\; S^{(f)} \;-\; S^{(i)} \\
&=\; (N_A \;+\; N_B)k\ln\frac{V}{(N_A+N_B)V_0} \;-\; N_Ak\ln\frac{V_A^{(f)}}{N_AV_0} \;-\; N_Bk\ln\frac{V_B^{(f)}}{N_BV_0} \\
&=\; k\left[N_A\ln\frac{VN_A}{V_A^{(f)}(N_A+N_B)} + N_B\ln\frac{VN_B}{V_2^{(f)}(N_A+N_B)}\right] \\
&=\; k\left[N_A\ln(1) + N_B\ln(1)\right] = 0.
\end{aligned}$$

3. Gauß-Verteilung für zwei Variablen (3+3+4+5=15 Punkte)

Die Gauß-Verteilung $\rho(X_1, X_2)$ für die zwei stochastischen Variablen X_1 und X_2 sei durch

$$\rho(X_1,X_2) = \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)}\cdot\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}(X_i-a_i)\;A_{ij}\;(X_j-a_j)\right] \tag{26}$$

definiert. Die 2×2 Matrix A ist symmetrisch und positiv definit.

(a) Geben Sie die reduzierte Verteilungsfunktion

$$\rho_1(X_1) = \int dX_2\;\rho(X_1,X_2) \tag{27}$$

an.

Lösung: Mit $\xi_i = X_i - a_i$ und $A_{12} = A_{21}$ berechnen wir das Gauß-Integral direkt:

$$\begin{aligned}
\rho_1(X_1) \;&=\; \int dX_2\,\frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)}\cdot\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}(X_i-a_i)\;A_{ij}\;(X_j-a_j)\right] \\
&=\; \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)}\int d\xi_2\exp\left[-\frac{1}{2}\;\left(\xi_1A_{11}\xi_1+\xi_1A_{12}\xi_2+\xi_2A_{21}\xi_1+\xi_2A_{22}\xi_2\right)\right] \\
&=\; \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)}\exp\left(-\frac{1}{2}\;\xi_1A_{11}\xi_1\right)\sqrt{\frac{2\pi}{A_{22}}}\exp\left(\frac{A_{12}^2\xi_1^2}{2A_{22}}\right) \\
&=\; \sqrt{\frac{\det A}{2\pi A_{22}}}\exp\left[-\frac{\det A}{2A_{22}}(X_1-a_1)^2\right],
\end{aligned} \tag{28}$$

wobei $\det A = A_{11}A_{22} - A_{12}^2$. Offensichtlich: $\int dX_1 \rho_1(X_1) = 1$.
Weitere Strategie:
Man kann alle weiteren Mittelwerte durch direktes Auswerten der entsprechenden Gauß'schen Integrale berechnen. Es ist jedoch lehrreich und nützlich, die charakteristische Funktion

$$\begin{aligned}
&\Phi(k_1,k_2) = \langle \exp\left(ik_1X_1 + ik_2X_2\right)\rangle \\
&= \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)} \int dX_1 dX_2 \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}(X_i - a_i)\ A_{ij}\ (X_j - a_j) + ik_1X_1 + ik_2X_2\right].
\end{aligned}$$

zu verwenden, mit deren Hilfe sich viele Mittelwerte einfach berechnen lassen.
Zur Berechnung des Integrals wird der Exponent mittels quadratischer Ergänzung umgeschrieben:

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}\xi_i A_{ij}\xi_j + ik_1X_1 + ik_2X_2 \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}\xi_i A_{ij}\xi_j + i\sum_{j=i}^{2}k_i\xi_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}k_iG_{ij}k_j - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}k_iG_{ij}k_j + i\sum_{j=i}^{2}k_ia_i,
\end{aligned} \tag{29}$$

mit $G_{ij} = \left[A^{-1}\right]_{ij}$. Es gilt:

$$A_{ij} = A_{ji} \quad \Rightarrow \quad G_{ij} = G_{ji}, \quad \sum_{l=1}^{2}A_{il}G_{lj} = \delta_{ij}, \quad \sum_{l=1}^{2}G_{il}A_{lj} = \delta_{ij}.$$

Explizit:

$$G_{11} = \frac{A_{22}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}, \quad G_{12} = G_{21} = -\frac{A_{12}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}, \quad G_{22} = \frac{A_{11}}{A_{11}A_{22} - A_{12}^2}.$$

Die ersten drei Summanden in Gl. (29) können zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}\xi_i A_{ij}\xi_j + i\sum_{j=i}^{2}k_i\xi_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}k_iG_{ij}k_j \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}\left(\xi_i - i\sum_l k_lG_{li}\right)A_{ij}\left(\xi_j - i\sum_l G_{jl}k_l\right) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{M}y_iA_{ij}y_j,
\end{aligned}$$

mit $y_j = \xi_j - i\sum_l G_{jl}k_l = \xi_j - i\sum_l k_lG_{lj}$.
Wir erhalten somit schließlich

$$\Phi(k_1,k_2) = \underbrace{\frac{\sqrt{\det A}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dy_1\int_{-\infty}^{\infty}dy_2\ e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}y_iA_{ij}y_j}}_{=1 \quad \text{(Normierung)}}\ e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}k_iG_{ij}k_j}\, e^{i\sum_{j=i}^{2}k_ia_i}$$

$$\Rightarrow \qquad \Phi(k_1,k_2) = \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2}k_iG_{ij}k_j + i\sum_{j=i}^{2}k_ia_i\right). \tag{30}$$

(b) Finden Sie die Kovarianz

$$\mathrm{cov}(X_1, X_2) = \langle (X_1 - \langle X_1 \rangle)(X_2 - \langle X_2 \rangle) \rangle. \tag{31}$$

Lösung:
Mithilfe der charakteristischen Funktion $\Phi(k_1, k_2)$ können wir die Mittelwerte von X_i berechnen:

$$\begin{aligned}
\langle X_1 \rangle &= \left\langle -i \frac{\partial}{\partial k_1} \exp\left(ik_1 X_1 + ik_2 X_2\right)\Big|_{k_1=0,k_2=0} \right\rangle = -i \frac{\partial}{\partial k_1} \Phi(k_1, k_2)\Big|_{k_1=0,k_2=0} \\
&= -i \frac{\partial}{\partial k_1} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2} k_i G_{ij} k_j + i \sum_{j=i}^{2} k_i a_i\right)\Bigg|_{k_1=0,k_2=0} = a_1, \qquad (32) \\
\langle X_2 \rangle &= a_2. \qquad (33)
\end{aligned}$$

Es folgt:

$$\mathrm{cov}(X_1, X_2) = \langle (X_1 - a_1)(X_2 - a_2) \rangle = \langle X_1 X_2 \rangle - a_1 a_2. \tag{34}$$

Korrelator:

$$\begin{aligned}
\langle X_1 X_2 \rangle &= -\left\langle \frac{\partial}{\partial k_1} \frac{\partial}{\partial k_2} \exp\left(ik_1 X_1 + ik_2 X_2\right)\Big|_{k_1=0,k_2=0} \right\rangle \\
&= -\frac{\partial}{\partial k_1} \frac{\partial}{\partial k_2} \Phi(k_1, k_2)\Big|_{k_1=0,k_2=0} = \frac{1}{2} G_{12} + \frac{1}{2} G_{21} + a_1 a_2 = G_{12} + a_1 a_2. \qquad (35)
\end{aligned}$$

Kovarianz:

$$\mathrm{cov}(X_1, X_2) = (G_{12} + a_1 a_2) - a_1 a_2 = G_{12} = -\frac{A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12}^2}. \tag{36}$$

(c) Bestimmen Sie das Moment $\langle X_1^2 X_2^2 \rangle$ der Verteilung.
Lösung:

$$\begin{aligned}
\left\langle X_1^2 X_2^2 \right\rangle &= \frac{\partial^2}{\partial k_1^2} \frac{\partial^2}{\partial k_2^2} \Phi(k_1, k_2)\Big|_{k_1,k_2=0} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial k_1^2} \left\{ \left[-G_{22} + (-G_{12} k_1 - G_{22} k_2 + ia_2)^2 \right] e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2} k_i G_{ij} k_j + i \sum_{j=i}^{2} k_i a_i} \right\}\Bigg|_{k_1,k_2=0} \\
&= 2G_{12}^2 + (G_{22} + a_2^2)(G_{11} + a_1^2) + 4G_{12} a_1 a_2. \qquad (37)
\end{aligned}$$

(d) Berechnen Sie den Mittelwert der Exponentialfunktion

$$f(\beta) = \langle \exp\left[-\beta(X_1 + X_2)\right] \rangle. \tag{38}$$

Lösung:

$$\begin{aligned}
f(\beta) = \Phi(k_1, k_2)|_{k_1=i\beta,k_2=i\beta} &= \exp\left[\frac{\beta^2}{2} \sum_{i,j=1}^{2} G_{ij} - \beta(a_1 + a_2)\right] \\
&= \exp\left[\frac{\beta^2}{2} \frac{A_{11} + A_{22} - 2A_{12}}{A_{11} A_{22} - A_{12}^2} - \beta(a_1 + a_2)\right]. \qquad (39)
\end{aligned}$$