

Winter-Semester 2017/18

Moderne Theoretische Physik IIa

Statistische Physik

Dozent: Alexander Shnirman

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Do 11:30-13:00, Lehmann Raum 022, Geb 30.22

<http://www.tkm.kit.edu/lehre/>

Wahrscheinlichkeitstheorie

Stochastische Variable X (diskret oder kontinuierlich)

Zugehörige **Wahrscheinlichkeitsverteilung** ρ

erfüllt

$\rho_i \geq 0, \quad \rho(x) \geq 0$ **Positivität und Norm.** $\sum_i \rho_i = 1, \quad \int dx \rho(x) = 1$

Mittelwert: $\langle X \rangle = \sum_i x_i \rho_i \quad \text{oder} \quad \int dx x \rho(x)$

n -tes Moment: $\langle X^n \rangle = \sum_i x_i^n \rho_i \quad \text{oder} \quad \int dx x^n \rho(x)$

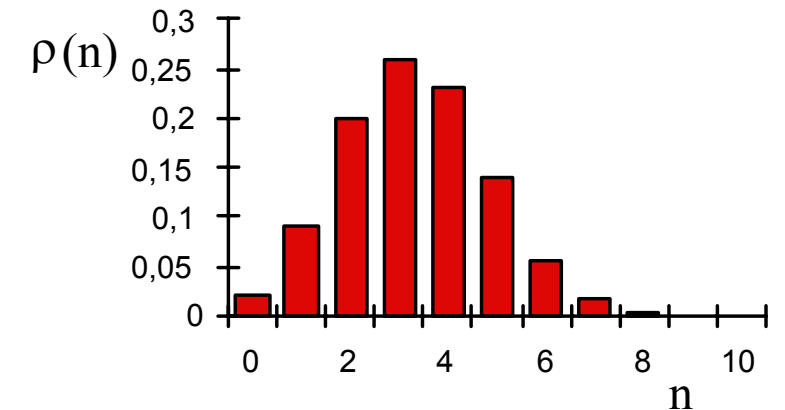
Standardabweichung: $\sigma = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$

Varianz: σ^2

Wahrscheinlichkeitstheorie 2

Binomial-Verteilung

$$\rho_N(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}$$



Binomial-Verteilung für $N = 10$, $p = 1/3$

$$\sum_{n=0}^N \rho_N(n) = (p + q)^N = 1$$

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^N n \rho_N(n) = pN$$

$$\sigma_N = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2} = \sqrt{Npq}$$

Für große N gilt $\sigma_N / \langle n \rangle \propto 1/\sqrt{N}$.

Wahrscheinlichkeitstheorie 3

Gauß-Verteilung

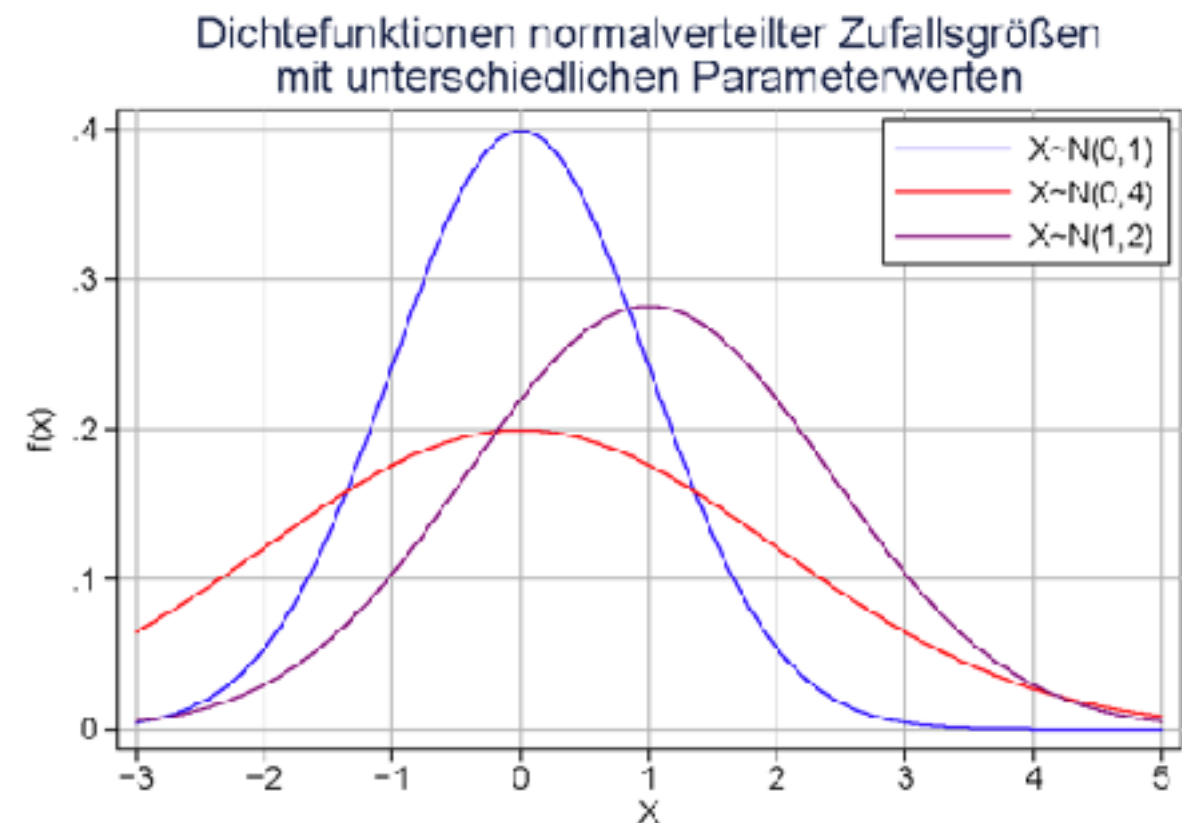
aus Binomial-Verteilung für große N , pN , qN

$$\rho_N(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_N} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(n - \langle n \rangle)^2}{\sigma_N^2}\right)$$

$$\langle n \rangle = pN$$

$$\sigma^2 = Npq$$

n kontinuierlich !!!



Wahrscheinlichkeitstheorie 4

Poisson-Verteilung

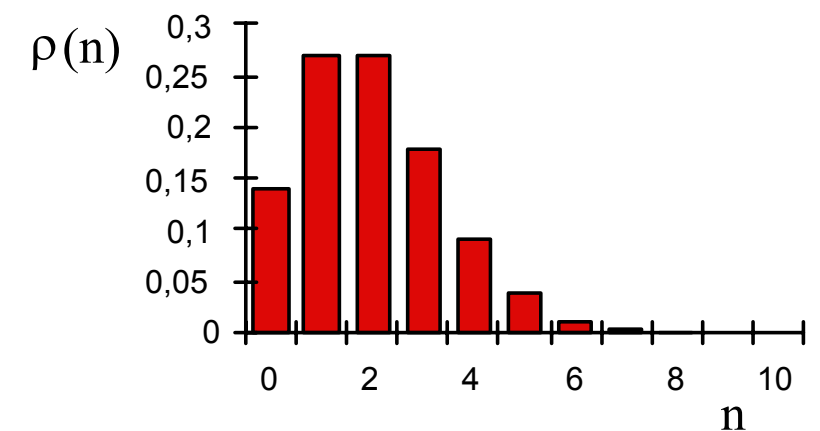
aus Binomial-Verteilung für $N \rightarrow \infty$, $p \rightarrow 0$ so dass $a = Np$

$$\rho_N(n) = \frac{a^n e^{-a}}{n!}$$

$$\sum_{n=0}^N \rho_N(n) = 1$$

$$\langle n \rangle = a$$

$$\sigma_N = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2} = \sqrt{\langle n \rangle} = \sqrt{a}$$



Poisson-Verteilung für $a = 2$

Wahrscheinlichkeitstheorie 5

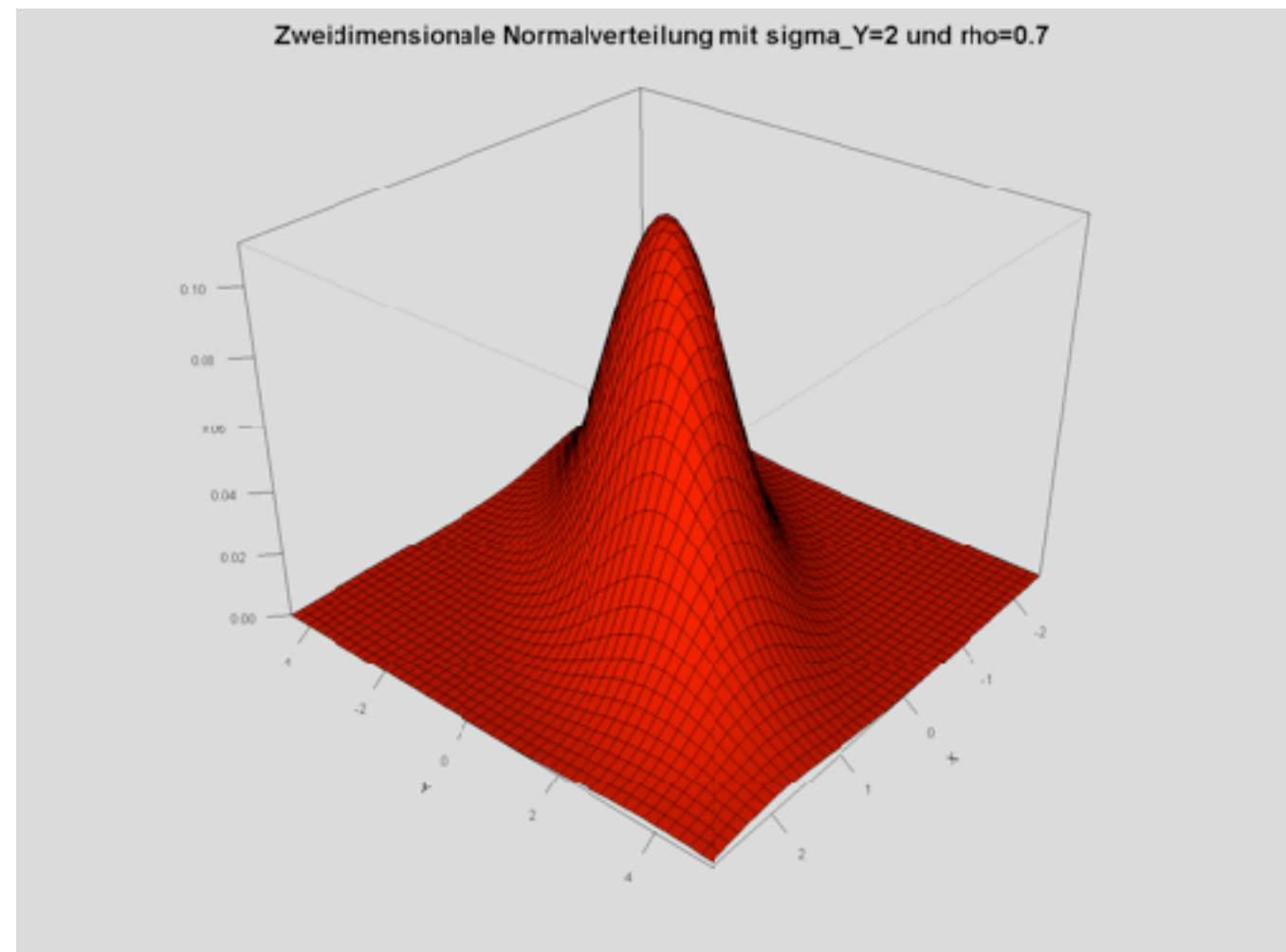
Gauß-Verteilung für mehrere Variablen

$$\rho(x_1, \dots, x_N) = \frac{\sqrt{\det A}}{(2\pi)^{N/2}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (x_i - a_i) A_{ij} (x_j - a_j) \right)$$

$$\xi_i = x_i - a_i$$

A symm., positiv definit

$$\langle x_n \rangle = a_n$$



Statistische Mechanik

- Klassische S.M. (etwas problematisch)
- Quantenmechanische S.M. (einfacher und klar)

Klassische Mechanik von N Teilchen

Zustand von N Teilchen beschrieben durch 3N Koordinaten und 3N Impulse

$$\mathbf{x} = (\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (p_1, \dots, p_{3N}, q_1, \dots, q_{3N})$$

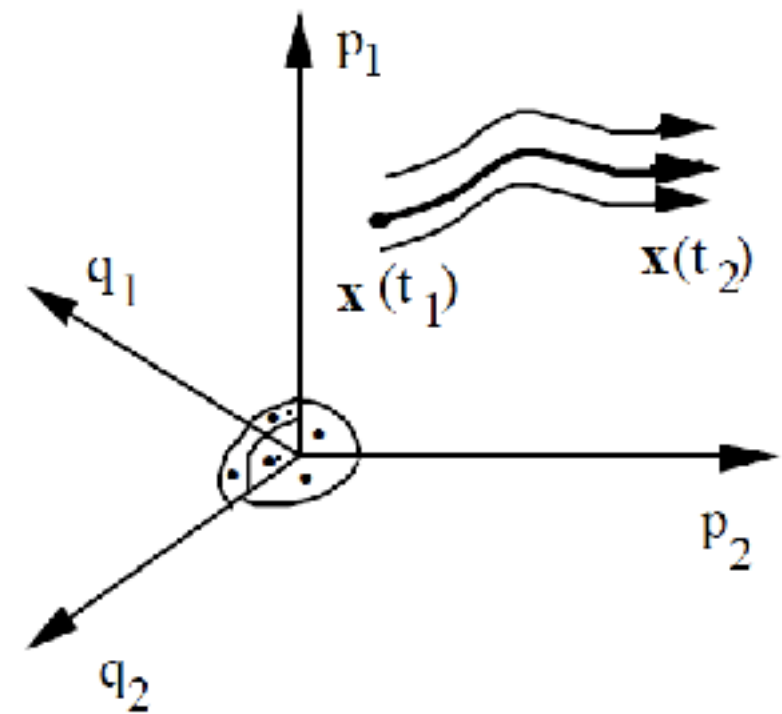
6N-dimensionaler Phasenraum Γ

Hamilton-Funktion $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$

Bewegungsgleichungen $\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad , \quad \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}$

$\dot{\mathbf{x}} = (\dot{\mathbf{p}}, \dot{\mathbf{q}})$ - eindeutliche Funktion von $\mathbf{x} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$

Trajektorien $\mathbf{x}(\mathbf{t})$ kreuzen sich nie



Erhaltungsgrößen

Energie $E = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \textit{const.}$

$6N - 1$ - dimensionale Oberfläche

Möglicherweise

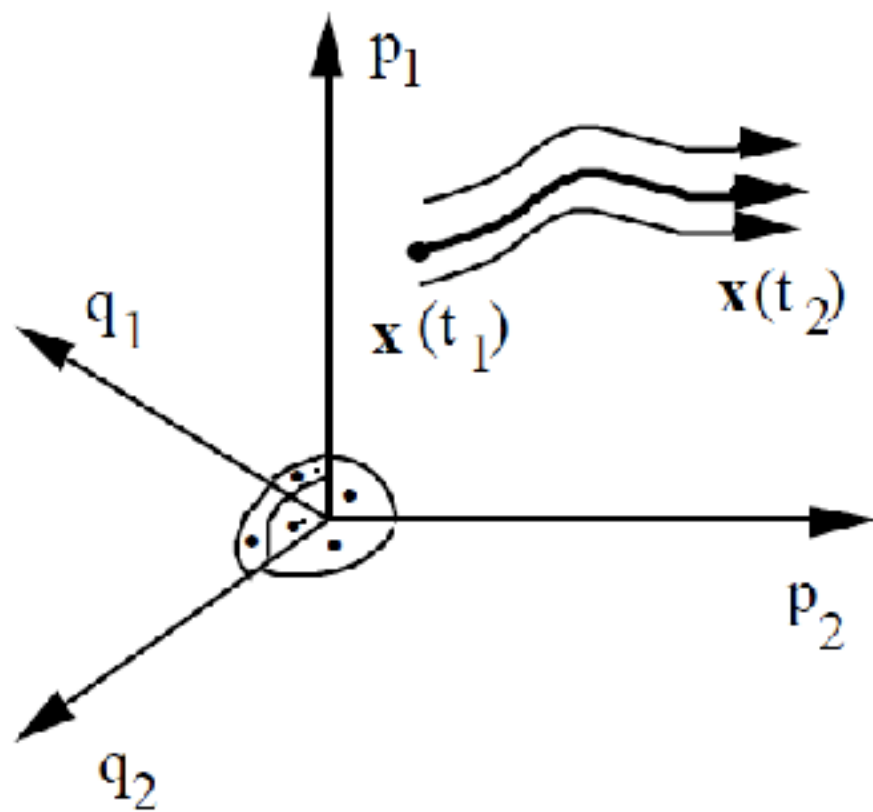
Gesamtimpuls $\mathbf{P}_{\text{tot}}$

Gesamtdrehimpuls $\mathbf{L}_{\text{tot}}$

Gibbs-Ensemble (Gesamtheit)

Gibbs-Verteilung $\rho(\mathbf{x}, t)$

Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum $\int dx \rho(\mathbf{x}) = 1$



Mittelwert einer physikalischen Größe

$$\bar{O} = \int dx O(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x})$$

$$dx \equiv C_N d^{3N} p d^{3N} q$$

dx und ρ - dimensionslos

$$C_N = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \quad \text{Quantenmechanisch}$$

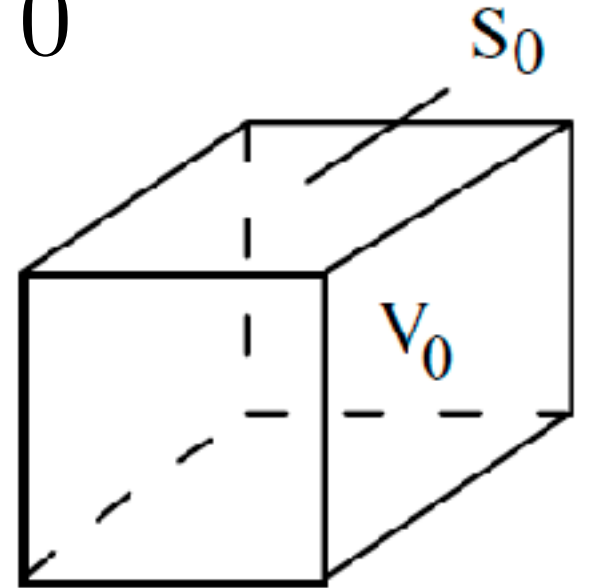
Zeitentwicklung

$\rho(\mathbf{x}, t)$ entwickelt sich wie eine strömende Flüssigkeit

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t) = 0$$

einerseits $\frac{d}{dt} \int_{V_0} dx \rho(\mathbf{x}, t) = \int_{V_0} dx \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t)$

andererseits $\frac{d}{dt} \int_{V_0} dx \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_{S_0} d\mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}, t) = - \int_{V_0} dx \nabla \cdot [\dot{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}, t)]$



V_0 beliebig $\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot [\dot{\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}, t)]$

aus der Hamilton-Gleichungen folgt $\nabla \cdot \dot{\mathbf{x}} = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = 0$

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}, t) = 0$$

inkompressible Flüssigkeit

Liouville-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) + \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t) = 0$$

$$\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla A = \sum_{j=1}^{3N} \left(\dot{q}_j \frac{\partial A}{\partial q_j} + \dot{p}_j \frac{\partial A}{\partial p_j} \right) = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial A}{\partial q_j} - \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial A}{\partial p_j} \right) = \{H, A\}$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho = -i \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla \rho = -i \{H, \rho\} = \hat{L} \rho$$

$$\hat{L} A \equiv -i \{H, A\} \quad \text{Liouville-Operator}$$

Stationäre Lösung der Liouville-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho = -i \{H, \rho\} = \hat{L} \rho$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho(H(\mathbf{x})) = 0 \quad \text{Übung}$$

Definitionen

$6N$ dimensionales Volumen im Phasenraum Γ mit $H(\mathbf{x}) < E$ wird mit $\Omega(E)$ bezeichnet

Oberfläche von $\Omega(E)$ wird mit $\Sigma(E)$ bezeichnet

$$\Omega(E) = \int dx \theta(E - H(\mathbf{x}))$$

$$\Sigma(E) = \frac{d\Omega(E)}{dE} = \int dx \delta(E - H(\mathbf{x}))$$

$\Sigma(E)dE$ - "Zahl" der Zustände mit Energie $E < H(\mathbf{x}) < E + dE$

quantenmechanisch besser definiert

Fundamentales Postulat der klassischen statistischen Mechanik (mikrokanonisches Ensemble)

$$\rho(\mathbf{x})^{\text{eq}} = \frac{1}{\Sigma(E)dE} \text{ für } E < H(\mathbf{x}) < E + dE$$

$$\rho(\mathbf{x})^{\text{eq}} = 0 \text{ sonst}$$

Mittelwert einer physikalischen Größe

$$\bar{O}_E = \frac{1}{\Sigma(E)dE} \int_{E < H < E + dE} dx O(\mathbf{x})$$

Ergoden-Hypothese

$$\bar{O}_E = \frac{1}{\Sigma(E)dE} \int_{E < H < E+dE} dx O(\mathbf{x})$$

$$\bar{O}_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt O(\mathbf{x}(\mathbf{t}))$$

$$\bar{O}_E = \bar{O}_T$$

Quantenstatistik (Hilbert-Raum-Statistik)

Reine Zustände

1) Elemente des Hilbert-Raums $|\Psi\rangle$ $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\Psi(0)\rangle$

2) Stationäre Zustände $H|\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$

$$|\Psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\Psi_n\rangle$$

3) Basis $|\Psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle$ **z.B.** $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle$

$\langle j|j'\rangle = \delta_{j,j'}$ orthonormierte Basis

$\sum_j |j\rangle \langle j| = 1$ vollständige Basis

$$\langle O \rangle = \langle \Psi | O | \Psi \rangle = \sum_{j,j'} c_j^* c_{j'} \langle j | O | j' \rangle$$

Reine Zustände

Schrödinger vs. Heisenberg Bild

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\Psi_S(0)\rangle$$

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = \textit{const.}$$

$$O_S = \textit{const.} \quad \text{Observable}$$

$$O_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} O_S e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$$

$$\langle O(t) \rangle = \langle \Psi_S(t) | O_S | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi_H | O_H(t) | \Psi_H \rangle$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t) = [H, O_H(t)]$$

Gemischte Zustände

Quantenmechanische Gibbs-Gesamtheit

Wahrscheinlichkeit W_α , dass das System im Zustand $|\Psi_\alpha\rangle$ ist

$$W_\alpha > 0 \quad , \quad \sum_\alpha W_\alpha = 1 \quad |\Psi_\alpha\rangle \text{ nicht unbedingt orthonormal}$$

$$\langle O \rangle = \sum_\alpha W_\alpha \langle \Psi_\alpha | O | \Psi_\alpha \rangle$$

$$\rho \equiv \sum_\alpha W_\alpha |\Psi_\alpha\rangle \langle \Psi_\alpha| \quad \text{Dichtematrix = Zustandsoperator}$$

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_j c_{\alpha j} |j\rangle \quad \longrightarrow$$

$$\rho = \sum_{\alpha, j, j'} W_\alpha c_{\alpha j} c_{\alpha j'}^* |j\rangle \langle j'| = \sum_{j, j'} |j\rangle \rho_{j, j'} \langle j'|$$

$$\rho_{j, j'} = \sum_\alpha W_\alpha c_{\alpha j} c_{\alpha j'}^*$$

Dichtematrix

$$\rho \equiv \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \quad \rho = \sum_{\alpha, j, j'} W_{\alpha} c_{\alpha j} c_{\alpha j'}^* |j\rangle \langle j'| = \sum_{j, j'} |j\rangle \rho_{j, j'} \langle j'|$$

$$\rho_{j, j'} = \sum_{\alpha} W_{\alpha} c_{\alpha j} c_{\alpha j'}^*$$

$$\langle O \rangle = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \langle \Psi_{\alpha} | O | \Psi_{\alpha} \rangle = \text{Tr}(\rho O) = \sum_{\alpha j} \langle j | W_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle \langle \Psi_{\alpha} | O | j \rangle$$

$$\sum_j |j\rangle \langle j| = 1$$

Eigenschaften: $\rho_{jj'} = \rho_{j'j}^*$, $\rho = \rho^{\dagger}$ **Hermitesch**

$$\text{Tr} \rho = 1$$

$\langle \Psi | \rho | \Psi \rangle \geq 0 \quad \forall \quad | \Psi \rangle$ **Positiv definit**

Dichtematrix

$$\rho \equiv \sum_{\alpha} W_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| \quad |\Psi_{\alpha}\rangle \text{ nicht unbedingt orthonormal}$$

$$\rho = \rho^{\dagger}$$

Es existiert eine orthonormale Basis in der die Dichtematrix diagonal ist

$$\rho \equiv \sum_{\mu} W_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu|$$

Schwankungen

$$\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2 = \text{Tr}(\rho O^2) - (\text{Tr} \rho O)^2$$

Enthält sowohl quantenmechanische
als auch statistische Schwankungen

$\rho^2 = \rho$ reiner Zustand

$\rho^2 \neq \rho$ gemischter Zustand

Zeitentwicklung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [|\Psi\rangle\langle\Psi|] = H |\Psi\rangle\langle\Psi| - |\Psi\rangle\langle\Psi| H$$

von Neumann- Gleichung = quantenmechanische
Liouville-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [H, \rho]$$

klassisch

$$i \frac{\partial}{\partial t} \rho = -i \{H, \rho\}$$

$$-i \{H, \dots\} \rightarrow \frac{1}{\hbar} [H, \dots]$$

vergleich mit

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t) = [H, O_H(t)]$$

Fundamentales Postulat

Mikrokanonisches Ensemble

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [H, \rho] \quad \text{stationäre Lösung} \quad \rho^{\text{st}} = \rho(H)$$

$$\rho \equiv \sum_n W_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \quad H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$$

$$W_n = \rho_{nn} = \text{const. für } E < E_n < E + dE$$

$$W_n = \rho_{nn} = 0 \text{ sonst}$$