Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik521.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik521/ gefunden werden.

[disclaimer]

physik521: Übungsblatt 05

Lino Lemmer
s6lilemm@uni-bonn.de

Martin Ueding
mu@martin-ueding.de

Paul Manz
p.m@uni-bonn.de

7. Juli 2014

H 5.1. Sattelpunktmethode

H 5.1.a.

Gegeben ist das Integral

$$I = \lim_{N\to\infty} \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(Nf(x)\right) \tag{1}$$

f hat ein globales Maximum bei $x = x_0$. Um diesen Punkt Taylorn wir die Funktion:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \dots \tag{2}$$

Setzen wir (2) in (1) ein und brechen nach dem dritten Glied ab, erhalten wir

$$I = \lim_{N\to\infty} \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(Nf(x_0) + Nf'(x_0)\,x + \frac{N}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2\right)$$

Die erste Ableitung verschwindet bei x_0, da dort das Maximum der Funktion ist.

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N\to\infty} \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(Nf(x_0)\right) \exp\left(\frac{N}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf(x_0)\right) \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(\frac{N}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf(x_0)\right) \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(\frac{N}{2} f''(x_0)\,x^2\right) \exp\left(Nf''(x_0)\,x_0 x\right) \exp\left(\frac{N}{2} f''(x_0)\,x_0^2\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf(x_0)\right) \exp\left(\frac{N}{2} f''(x_0)\,x_0^2\right) \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(\frac{N}{2} f''(x_0)\,x^2\right) \exp\left(Nf''(x_0)\,x_0 x\right)
\end{aligned}$$

mit $a = -\frac{N}{2} f''(x_0)$:

$$= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf(x_0)\right) \exp\left(-a x_0^2\right) \int_a^b \mathrm{d}x \ \exp\left(2a x_0 x\right) \exp\left(-a x^2\right)$$

mit $\mathrm{i}\omega = -2ax_0$

$$= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf\left(x_0\right)\right) \exp\left(\frac{\omega^2}{4a}\right) \int_a^b \mathrm{d}x\ \exp\left(-\mathrm{i}\omega x\right) \exp\left(-ax^2\right) \tag{3}$$

Nun betrachten wir die Formel für Gaußsche Integrale

$$\sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4a}\right) = \int \mathrm{d}t\ \exp\left(-\mathrm{i}\omega t\right) \exp\left(-at^2\right) \tag{4}$$

Lösen wir nun (3) mit (4) auf, erhalten wir:

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf\left(x_0\right)\right) \exp\left(\frac{\omega^2}{4a}\right) \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{\omega^2}{4a}\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf\left(x_0\right)\right) \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\
&= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf\left(x_0\right)\right) \sqrt{-\frac{2\pi}{Nf''\left(x_0\right)}}
\end{aligned}$$

Da die zweite Ableitung an der Maximalstelle negativ ist, folgt

$$= \lim_{N\to\infty} \exp\left(Nf\left(x_0\right)\right) \sqrt{\frac{2\pi}{N\left|f''\left(x_0\right)\right|}} \tag{5}$$

H 5.1.b.

$$\begin{aligned}
\lim_{N\to\infty} N! &= \lim_{N\to\infty} \Gamma\left(N+1\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \int_0^\infty \mathrm{d}x\ x^N \exp\left(-x\right)
\end{aligned}$$

Wir substituieren nun $x = Nz$ und $N\,\mathrm{d}z = \mathrm{d}x$:

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N\to\infty} \int_0^\infty \mathrm{d}z\ NN^N z^N \exp\left(-Nz\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} NN^N \int_0^\infty \mathrm{d}z\ \exp\left(N\log\left(z\right)\right) \exp\left(-Nz\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} N^{N+1} \int_0^\infty \mathrm{d}z\ \exp\left(N\left(\log\left(z\right) - z\right)\right)
\end{aligned}$$

Wir setzen nun $f(z) = \log\left(z\right) - z$. Diese Funktion hat ihr Maximum bei $z = 1$. Die zweite Ableitung an dieser Stelle ist $f''(1) = -\frac{1}{1^2} = -1$. Nach (5) gilt

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N\to\infty} N^{N+1} \exp\left(-N\right) \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \\
&= \lim_{N\to\infty} \sqrt{2\pi N} N^N \exp\left(-N\right)
\end{aligned}$$

Dies ist die gesuchte Stirling-Formel.

H 5.2. Ensemble quantenmechanischer harmonischer Oszillatoren

H 5.2.a. Anzahl der Zustände

Bei der Energie sind immer $N/2$ (in Einheiten von $\hbar\omega$ durch die $+1$ fest. Der Operator $a_j^\dagger a_j$ liefert den Eigenwert n. Somit müssen wir noch eine Energie von 3 auf drei Oszillatoren aufteilen. Es gibt folgende Möglichkeiten:

$$(0,0,3),\ (0,1,2),\ (0,2,1),\ (0,3,0),\ (1,0,2),\ (1,1,1),\ (1,2,0),\ (2,0,1),\ (2,1,0),\ (3,0,0)$$

Es gibt also 10 Zustände.

H 5.2.b. Wahrscheinlichkeit der einzelnen Zustände

Der Zustand mit der Energie 0 kommt für jeden Oszillator viermal vor, also mit einer Wahrscheinlichkeit 0,4. Die Energie 1 kommt dreimal, die Energie 2 zweimal und die Energie 3 einmal vor.

H 5.2.c. $\Omega(E)$

Für die Bearbeitung habe ich in **Schwabl/Statistische˙Mechanik** gelesen und bin dabei in **Schwabl/Statistische˙Mechanik** auf diese Aufgabe gestoßen.

Als eine Definition von $\Omega(E)$ habe ich Folgendes gefunden: (**Schwabl/Statistische˙Mechanik**)

$$\Omega(E) = \int \mathrm{d}\Gamma\, \delta(E - H(q,p))$$

Wobei Γ den Phasenraum bezeichnet.

Der Phasenraum ist hier diskret und durch $\mathbb{N}^N$ gegeben. Daher brauchen wir hier anstelle vom Integral eine mehrdimensionale Summe über alle Energieniveaus:

$$\Omega(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_N=0}^{\infty} \delta\left(E - \hbar\omega \sum_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2}\right)\right)$$

Was mich an dieser Stelle jedoch etwas verwundert ist, dass wir über alle n_i jeweils summieren, obwohl diese explizit nicht in **Schwabl/Statistische˙Mechanik** aufgeführt sind.

H 5.2.d. Umschreiben

Nun benutzen wir die Integraldarstellung der δ-Distribution:(**Schwabl/Statistische˙Mechanik**)

$$\delta(y) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ky}$$

Somit erhalten wir:

$$\Omega(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_N=0}^{\infty} \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left[\mathrm{i}k\left(E - \hbar\omega \sum_j \left(a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2}\right)\right)\right]$$

Die Summe in der Exponentialfunktion können wir noch als Produkt von von Exponentialfunktionen schreiben

$$\Omega(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_N=0}^{\infty} \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kE} \prod_{j=1}^{N} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hbar\omega/2} \exp(-\mathrm{i}k\hbar\omega n_j)$$

Für jede Summe $\sum$ ergibt sich in der letzten Exponentialfunktion eine Geometrische Reihe mit $q = \exp(-\mathrm{i}k\hbar\omega)$. Da von 0 bis ∞ addiert wird, kann direkt der Grenzwert $(1 - q^\infty)/(1 - q)$ eingesetzt werden:

$$\Omega(E) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kE} \prod_{j=1}^{N} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hbar\omega/2} \frac{1}{1 - \exp(-\mathrm{i}k\hbar\omega)}$$

Da das Produkt $\prod$ nur noch gleiche Faktoren multipliziert, kann es durch eine Potenz ersetzt werden. Somit erhalten wir die gewünschte Form:

$$\Omega(E) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kE} \left(\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hbar\omega/2}}{1 - \exp(-\mathrm{i}k\hbar\omega)} \right)^N$$

Dies sollen wir jetzt noch ein wenig umschreiben. Dazu betrachten wir nur die Klammer:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hbar\omega/2}}{1 - \exp(-\mathrm{i}k\hbar\omega)} \right)^N &=: \left(\frac{\mathrm{e}^{-\beth/2}}{1 - \mathrm{e}^{-\beth}} \right)^N \\
&= \left(\frac{1 - \mathrm{e}^{-\beth}}{\mathrm{e}^{-\beth/2}} \right)^{-N} \\
&= \left(\mathrm{e}^{\beth/2} - \mathrm{e}^{-\beth/2} \right)^{-N} \\
&= (2\mathrm{i} \sin(-\mathrm{i}\beth/2))^{-N} \\
&= \exp\left(-N \ln (2\mathrm{i} \sin(-\mathrm{i}\beth/2)) \right) \\
&= \exp\left(-N \ln (2\mathrm{i} \sin(k\hbar\omega/2)) \right)
\end{aligned}$$

Alles zusammen ergibt den gesuchten Ausdruck:

$$\Omega(E) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left(N \left(\mathrm{i}k\frac{E}{N} - \ln (2\mathrm{i} \sin(k\hbar\omega/2)) \right) \right)$$

H 5.2.e. Berechnen des Integrals

Dieses Integral kann so umgeschrieben werden, dass man es mit der Sattelpunktsmethode ausrechnen kann. Dabei ist:

$$f(k) = \mathrm{i}k\frac{E}{N} - \ln (2\mathrm{i} \sin(k\hbar\omega/2))$$

Wir bestimmen die erste und zweite Ableitung, da wir diese im weiteren Verlauf brauchen werden.

$$f'(k) = \mathrm{i}\frac{E}{N} - \cot(k\hbar\omega/2)\frac{\hbar\omega}{4}$$

Die zweite Ableitung ist:

$$f''(k) = -\frac{\hbar^2\omega^2}{8} \csc^2\left(\frac{k\hbar\omega}{2} \right)$$

Laut **Schwabl/Statistische˙Mechanik** ist es jedoch 4 anstelle von −8. Wir benutzen das Ergebnis aus dem Buch.

Die Nullstelle der ersten Ableitung ist bei:

$$k_0 = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar\omega} \ln\left(\frac{2e + \frac{\hbar\omega}{2}}{2e - \frac{\hbar\omega}{2}}\right)$$

Dabei haben wir $e := E/N$ eingesetzt und die Darstellung des arctan mit dem komplexen ln ausgenutzt.

In **Schwabl/Statistische˙Mechanik** ist es nicht $2e$ sondern nur e. Wir rechnen mit dem Ergebnis aus dem Buch weiter.

Nun müssen wir die Nullstelle in die zweite Ableitung einsetzen.

$$\begin{aligned}
f''(k_0) &= \frac{\hbar^2\omega^2}{4} \csc^2\left(\frac{k_0\hbar\omega}{2}\right) \\
&= \frac{\hbar^2\omega^2}{4} \csc^2\left[\frac{\hbar\omega}{2}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar\omega} \ln\left(\frac{e + \frac{\hbar\omega}{2}}{e - \frac{\hbar\omega}{2}}\right)\right] \\
&= \frac{\hbar^2\omega^2}{4} \csc^2\left[\frac{1}{2\mathrm{i}} \ln\left(\frac{e + \frac{\hbar\omega}{2}}{e - \frac{\hbar\omega}{2}}\right)\right]
\end{aligned}$$

Jetzt können wir dies wieder als arctan schreiben:

$$= \frac{\hbar^2\omega^2}{4} \csc^2\left[\arctan\left(\frac{\hbar\omega}{\mathrm{i}e}\right)\right]$$

Laut Mathematica ist $\csc^2(\arctan(x))$ gerade $1 + 1/x^2$.

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar^2\omega^2}{4}\left(1 - \frac{e^2}{\hbar^2\omega^2}\right) \\
&= \frac{\hbar^2\omega^2 - e^2}{4}
\end{aligned}$$

Jetzt müssen wir das in die Wurzel einsetzen und erhalten:

$$\sqrt{\frac{8\pi}{N(\hbar^2\omega^2 - e^2}}$$

Es fehlt noch der Rest. Alles zusammen ist dann:

$$\Omega(E) = \lim_{N\to\infty} \mathrm{e}^{Nf(k_0)} \sqrt{\frac{8\pi}{N(\hbar^2\omega^2 - e^2}}$$

Noch $f(k_0)$ einsetzen:

$$\Omega(E) = \lim_{N\to\infty} \exp\left\{N\left(\mathrm{i}k\frac{E}{N} - \ln\left[2\mathrm{i}\sin\left(\left\{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar\omega}\ln\left[\frac{e + \frac{\hbar\omega}{2}}{e - \frac{\hbar\omega}{2}}\right]\right\}\hbar\omega/2\right)\right]\right)\right\} \sqrt{\frac{8\pi}{N(\hbar^2\omega^2 - e^2)}}$$

Da sehe ich allerdings nicht, wie das auf die gewünschte Form zu bringen ist.