

Statistische Physik

Blatt 7

Wintersemester 2023/24

Abgabe: Montag, **27.11.2023**, 10:00 Uhr

Besprechung: Dienstag, 28.11.2023

Webseite: <https://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2023-StatPhys.shtml>

Aufgabe 23: Quantenstatistik und Ensembles (8 Punkte)

Ein System habe zwei mögliche Einteilchenzustände mit Energien $E_0 = -1$ und $E_1 = 1$. Das System wird mit drei Teilchen bevölkert. Wir interessieren uns für die drei unterschiedlichen Fälle, in denen (i) alle drei Teilchen ununterscheidbare Fermionen mit Spin $S = \frac{1}{2}$ sind, (ii) alle Teilchen ununterscheidbare Bosonen sind, oder (iii) die drei Teilchen unterscheidbar sind.

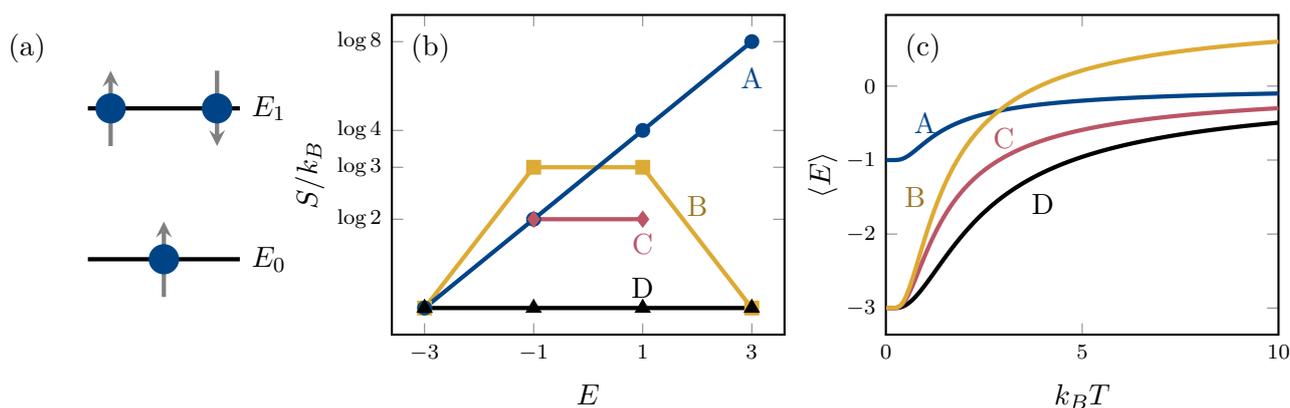


Abbildung 1 – (a) Beispiel für einen Besetzungszustand des Systems mit drei Spin- $\frac{1}{2}$ Fermionen. (b) Mögliche Entropien der abgeschlossenen Drei-Teilchen-Systeme als Funktion der Gesamtenergie E . (c) Mögliche mittlere Energien $\langle E \rangle$ der an ein Wärmebad gekoppelten Systeme als Funktion der Temperatur.

- Abbildung 1(a) zeigt ein Beispiel für einen Zustand des Gesamtsystems, wenn es sich bei den Teilchen um Fermionen handelt. Skizzieren Sie analog hierzu alle möglichen Zustände des Drei-Teilchen-Systems für die Fälle (i)–(iii). *Hinweis:* Für die Fälle (i) und (ii) sollten Sie jeweils auf vier verschiedene Zustände kommen, für (iii) auf acht.
- Wie lauten in den drei Fällen (i)–(iii) die möglichen Gesamtenergien E des Drei-Teilchen-Systems? Wie sind diese entartet?
- Das Drei-Teilchen-System sei jetzt *abgeschlossen* und habe die konstante Energie E . Abbildung 1(b) zeigt die Entropie S des abgeschlossenen Systems für verschiedene Energien E . Welche der vier gezeigten Kurven $S(E)$ entspricht dem Fall der (i) Spin- $\frac{1}{2}$ Fermionen, (ii) spinlosen Bosonen und (iii) unterscheidbaren Teilchen?

Das System werde jetzt an ein Wärmebad gekoppelt, wodurch sich ein mittlerer Wert der Gesamtenergie $\langle E \rangle$ einstellt. In Abbildung 1(c) sind vier mögliche Verläufe von $\langle E \rangle$ als Funktion der Temperatur dargestellt.

- d) Finden Sie *ohne Rechnung* die richtige Zuordnung der drei Fälle (i)–(iii) zu den gezeigten Kurven. Begründen Sie Ihre Wahl.
- e) Berechnen Sie jetzt $\langle E \rangle$ für die drei Fälle (i)–(iii) um Ihre Antwort aus b) zu überprüfen.

Aufgabe 24: Das ideale Bose-Gas, Teil I: Grundlagen (6 + 3 Punkte)

In der Vorlesung wurde die Physik des idealen Fermi-Gases besprochen. Jetzt widmen wir uns dem idealen *Bose-Gas*. In dieser Aufgabe werden zunächst einige Grundlagen wiederholt, die das Fundament zum Verständnis der *Bose-Einstein-Kondensation* bilden. Dieses Phänomen behandeln wir dann in der nächsten Woche. Wir betrachten ein *uniformes* Bose-Gas, bei dem N Bosonen der Masse m in einem Kasten mit Volumen V eingeschlossen sind. Die Einteilchenenergien sind durch $\epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m}$ gegeben, wobei $p = |\vec{p}|$ der Betrag des Impulses ist.

- a) **Zusatzaufgabe:** Berechnen Sie die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ des Bose-Gases in d Dimensionen:

$$D(\epsilon) = \sum_{\vec{p}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{p}}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^d} \int d^{3d}p \delta(\epsilon - \epsilon_{\vec{p}}) \quad (1)$$

Hinweise: Den d -dimensionalen Raumwinkel Ω_d müssen Sie nicht näher spezifizieren. Das verbleibende Integral über den Radialanteil können Sie z.B. durch eine geeignete Substitution berechnen. Alternativ können Sie auch die Eigenschaften von $\delta(f(x))$ ausnutzen.

- b) Wie lautet die mittlere Besetzung $n_\epsilon(\mu, T)$ eines Einteilchenzustandes mit Energie ϵ (nur Wiederholung, keine Rechnung erforderlich)?

Im Folgenden betrachten wir den Fall $d = 3$ mit der Zustandsdichte $D(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$.

- c) Skizzieren Sie n_ϵ für fixes μ und β . Zeichnen Sie in Ihrer Skizze die Zustandsdichte $D(\epsilon)$ ein, sowie eine Vertikale bei $\epsilon = \mu$. Wählen Sie z.B. $\mu = -0.5$ und $T = 2$ und setzen Sie $V = h = m = k_B = 1$. Begründen Sie, warum $\mu < 0$ gelten muss. Welche Werte kann die Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ annehmen?
- d) Jetzt soll die Teilchenanzahl N fixiert werden. Zeigen Sie, dass sich die Teilchenanzahl als

$$N_{\text{ex}} = \frac{V (2\pi m k_B T)^{3/2}}{h^3} g_{3/2}(z) \quad (2)$$

schreiben lässt, wobei $g_{3/2}$ definiert ist als

$$g_{3/2}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x z^{-1} - 1}, \quad (3)$$

mit $x = \beta\epsilon$. *Hinweis:* Schreiben Sie die Teilchenzahl N als Integral über alle *Energien*. Für jede Energie müssen Sie dann (i) über $D(\epsilon)$ berücksichtigen, wie viele Zustände bei dieser Energie liegen, und (ii) berücksichtigen, von wie vielen Bosonen die Zustände besetzt werden.

Aufgabe 25: Kullback-Leibler Divergenz (6 + 3 Punkte)

Wir betrachten die beiden Alphabete

- (i) $Z_1 = \{a, b, c, d, e\}$ mit Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_1: p_a = \frac{1}{2}, p_b = p_c = p_d = p_e = \frac{1}{8}$,
- (ii) $Z_2 = \{a, b, c, d, e\}$ mit Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_2: p_a = \frac{1}{16}, p_b = \frac{1}{2}, p_c = \frac{1}{4}, p_d = \frac{1}{8}, p_e = \frac{1}{16}$.
- a) Führen Sie für beide Alphabete die folgenden Schritte durch: Berechnen Sie die Shannon-Entropie $H = -\sum_z p_z \log_2 p_z$. Finden Sie mit dem Huffman-Verfahren (Blatt 5, Aufgabe 18g)) eine optimale binäre Kodierung. Berechnen Sie die mittlere Länge einer kodierten Nachricht aus N Buchstaben. Wird das durch H vorgegebene Kompressionslimit erreicht?
- b) Wie lang wird eine Nachricht aus N Buchstaben aus Z_1 , wenn Sie mit der für Z_2 optimierten Kodierung übersetzt wird? Wieviele Bits pro Buchstabe werden, verglichen mit der optimalen Kodierung, zusätzlich benötigt und somit ‘verschwendet’? Was ergibt sich, wenn Z_2 mit der für Z_1 optimierten Kodierung in Bits übersetzt wird?
- c) Eine weitere Binärkodierung des Alphabetes $\{a, \dots, e\}$ sei für die Wahrscheinlichkeitsverteilung P_3 mit $p_a = \frac{1}{16}, p_b = \frac{1}{2}, p_c = \frac{1}{4}, p_d = \frac{1}{16}, p_e = \frac{1}{8}$ optimiert. Erneut soll Z_2 in Bits übersetzt werden. Würden Sie erwarten, dass die auf P_3 basierende Kodierung effizienter ist, als die auf P_1 basierende? Begründen Sie ihre Einschätzung (ohne Rechnung).

Vielleicht haben Sie in (c) über die ‘Unterschiedlichkeit’ von Verteilungen argumentiert. Eine Möglichkeit, diese genauer zu quantifizieren stellt die *Kullback-Leibler-Divergenz* oder *relative Entropie* dar. Für zwei (diskrete) Wahrscheinlichkeitsverteilungen $P(x)$ und $Q(x)$ ist diese über

$$D(P||Q) = \sum_x P(x) \cdot \log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \quad (4)$$

definiert. Sie misst, wie sehr die beiden Verteilungen $P(x)$ und $Q(x)$ voneinander abweichen.

- d) Berechnen Sie die Kullback-Leibler-Divergenzen $D(P_1||P_2)$ und $D(P_2||P_1)$. Warum erfüllt $D(P||Q)$ *nicht* alle mathematischen Kriterien an eine Abstandsfunktion (Metrik)?
- e) Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse aus b) und d). Was fällt Ihnen auf? Benutzen Sie die Kullback-Leibler-Divergenz, um Ihre Vermutung aus c) zu bestätigen oder zu widerlegen.
- f) **Zusatzaufgabe:** Zeigen Sie, dass $D(P||Q) \geq 0$ gilt. Wann gilt Gleichheit? *Hinweis:* Benutzen Sie die Jensensche Ungleichung

$$f\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^n \lambda_i f(x_i) \quad (5)$$

für konvexe Funktionen f mit $x_i = \frac{P(i)}{Q(i)}$ und $\lambda_i = P(i)$. Beachten Sie, dass für konkaves $f(x)$ die Funktion $-f(x)$ konvex ist. Der Logarithmus ist eine konkave Funktion.

Die Kullback-Leibler-Divergenz wurde zur Analyse von Verschlüsselungsalgorithmen entwickelt (die Namensgeber, Solomon Kullback und Richard Leibler arbeiteten damals als Kryptoanalytiker bei der NSA). Heute ist sie besonders durch ihre prominente Rolle im Bereich des **maschinellen Lernens** bekannt. Sie findet aber in unzähligen Bereichen Anwendung, in denen man den Unterschied zweier Verteilungen quantifizieren möchte, etwa wenn gemessene Daten P mit einem durch Q beschriebenen Modell verglichen werden sollen. Beispiele für Anwendungsfelder sind **turbulente Strömungen**, **Kryptographie**, **Spielanalysen der NBA** und die **Theorie von Sportwetten**.