

Die Entstehung eines scheinbaren Determinismus aus einem fundamentalen Indeterminismus

Stephen Keeling

[Eigene Webseite](#)

[Skriptum](#) über Grundlagen der Mathematik

[Skriptum](#) über Grundlagen der Numerik

[Skriptum](#) über Grundlagen der Statistik

[Tagebuch](#) für die Modellierungswoche 2020

Inhaltsverzeichnis

1	Grundbegriffe	1
2	Wahrscheinlichkeitstheorie	3
3	Gleichgewichtsverteilung von Teilchen	4
3.1	Viele Münzen werfen	4
3.2	Viele Würfel werfen	7
3.3	Viele Teilchen zerfallen	11
3.4	Viele stationäre Teilchen in einem Behälter	14
3.5	Viele energetische Teilchen in einem Behälter	17
4	Diffusion und Brownsche Bewegung	22
5	Von Quanten- bis zur klassischen Materie	26

1 Grundbegriffe

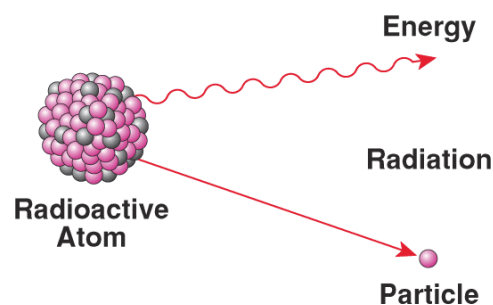
Aufgabe: Erkläre Determinismus, Indeterminismus, Zufall, Gesetzmäßigkeit, Ursache, Wirkung, Zustand, Wahrscheinlichkeit.

Aufgabe: Finde ein Experiment, in dem das Ergebnis sich aus Zufällen ergibt, aber es ist so hoch wahrscheinlich, dass es als gewiss betrachtet werden kann.

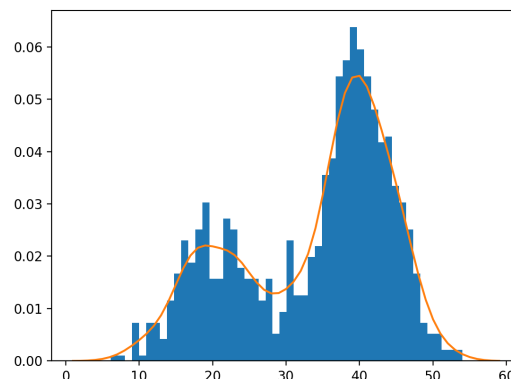
Determinismus ist die Auffassung, dass ausgehend von einer vollständigen Feststellung des gegenwärtigen Zustands eines Systems, alle zukünftigen und alle vorherigen Zustände des Systems laut strengen Gesetzmäßigkeiten bestimmt werden. Die übliche Metapher des Determinismus ist eine Uhr, die nach mechanischen Regeln läuft. Das Konzept des Determinismus hängt offenbar von einem Konzept des Zustands eines Systems ab. Für eine Uhr gelten die Zahnräder und die Folge ihrer Schritte vielleicht selbstverständlich als die Zustände bzw. die Regeln des Systems. Jedoch führt eine nähere Betrachtung zu der Erkenntnis, wie uneindeutig diese Vorstellung ist. Bestehen die Zahnräder aus Teilchen, Wellen, verknoteten Saiten oder noch etwas? Was genau ist die Kette von Ursache und Wirkung, die hinter den Schritten der Zahnräder zu finden sind? Was bedeuten Ursache und Wirkung, wenn die Zustände und die Gesetzmäßigkeiten unklar sind?



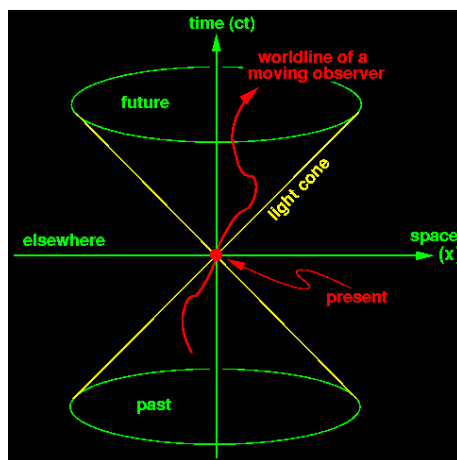
Indeterminismus ist die Auffassung, dass nicht alle Zustände eines Systems aus einer vollständigen Charakterisierung des gegenwärtigen Zustands bestimmt sind. Das Konzept des Indeterminismus hängt mit dem Konzept des Zufalls zusammen. Wenn in gewissen alltäglichen Kontexten über Zufälle gesprochen wird, wird mindestens implizit auf einen Mangel an Wissen hingewiesen, als ob ein Ereignis wie z.B. eine Begegnung voraussehbar gewesen wäre, wenn ausreichend Information über Rahmenbedingungen vorgegeben worden wäre. Eine tiefere Vorstellung eines Zufalls beschreibt ein Ereignis, das nicht einmal im Prinzip eindeutig bestimmt werden kann, egal wie viel Information aus Perspektiven zur Verfügung steht, die in Raum und Zeit vom Ereignis getrennt sind.



Mit der Verwendung von Wahrscheinlichkeiten wird versucht, über solche Zufälligkeiten genauer zu sprechen, aber was genau wird damit gemeint? In einem deterministischen Kontext wird eine Wahrscheinlichkeit als der Anteil der Rahmenbedingungen beschrieben, die zu einem Ereignis führen. Jedoch ist diese Vorstellung nicht sinnvoll, wenn ausgewählte Rahmenbedingungen nicht eindeutig zu einem Ereignis führen. Eine robustere Vorstellung basiert auf Häufigkeit, wobei die Wahrscheinlichkeit darstellt, wie oft ein Ereignis sich ergeben würde, wenn gewisse Bedingungen wiederholt gerahmt werden.



Implizit bei allen diesen Konzepten sind Vorstellungen von Raum und Zeit. Ausgehend von Newton gibt es eine übliche Prägung, dass Raum und Zeit mit einem Achsensystem versehen sind, wobei die räumlichen Achsen senkrecht auf einander stehen, und die Zeitachse in die Zukunft zeigt. Weiters soll dieses Achsensystem gelten, unabhängig davon an welcher Stelle in Raum und Zeit es gewurzelt wird und unabhängig davon ob es Materie oder Bewegung geben sollte. Ausgehend von Einstein gibt es eine Aktualisierung dieser Prägung, wobei das Achsensystem eine Krümmung besitzt, die anders ist an verschiedenen Stellen in Raum und Zeit. Weiters gibt es laut der Relativitätstheorie kein universales Jetzt, das von allen Perspektiven in Raum und Zeit gelten kann. Wegen der aktuellsten Herausforderungen in der theoretischen Physik hat sich die Intuition entwickelt, dass Raum und Zeit aus grundlegenden Aspekten der Realität entstehen. Minimalistisch zeitlich spricht man über eine Folge von Ereignissen, die hier hinter einander ablaufen. Minimalistisch räumlich spricht man über eine Trennung von Orten, die kein gemeinsames Hier teilen.



In diesem Projekt werden Experimente gerahmt, in denen die mikroskopischen Ereignisse in gewisser Weise zufällig sind, aber die makroskopischen Ereignisse so wahrscheinlich sind, dass diese praktisch als deterministisch betrachtet werden können. Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie werden für diese Tätigkeit notwendig. Zielführend ist auch eine Vertrautheit mit gewissen Phänomenen der grundlegenden Physik, wie z.B. die Gleichgewichtsverteilung von Teilchen in einem festen Behälter (Statistische Mechanik), die Brownsche Bewegung von Teilchen in einer stationären Flüssigkeit (Diffusion) und das Interferenzmuster von ausgestrahlten Teilchen durch eine Barriere mit Spalten (Quantenmechanik).

2 Wahrscheinlichkeitstheorie

Siehe Seiten 52-89 im [Statistik Skriptum](#).

Aufgabe: Erkläre Kombination, Variation, Permutation, Zahlprinzip, Wahrscheinlichkeit, Erwartungswert, Varianz, Zufallsvariable, Zufallsvektor, Unabhängigkeit, Korrelation.

Aufgabe: Erkläre die Bernoullische, Binomiale, Multinomiale, Gaußsche Verteilungen und den Zentralen Grenzwertsatz.

Aufgabe: Im [Video](#) wird ein Beispiel präsentiert, bei dem viele Probanden jeweils eine Schätzung der Anzahl der Gelebohnen im Glasgefäß abgeben. Bestimme, ob der Mittelwert der Schätzungen in gewisser Weise zur tatsächlichen Anzahl der Gelebohnen konvergiert, wenn die Anzahl der Schätzungen unendlich groß wird. Besonders relevant in diesem und in späteren Kontexten ist das

Konzept der *Konvergenz in Wahrscheinlichkeit*: Zufallsvariablen Y_n konvergieren zum Wert μ in Wahrscheinlichkeit, wenn jede Abweichung des Zufallswerts Y_n vom Wert μ erfüllt,

$$P(|Y_n - \mu| > \epsilon) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad \text{oder} \quad P(|Y_n - \mu| \leq \epsilon) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0$$

wobei $P(|Y_n - \mu| > \epsilon) + P(|Y_n - \mu| \leq \epsilon) = 1$ immer gilt. Siehe den Zentralen Grenzwertsatz im Skriptum.



3 Gleichgewichtsverteilung von Teilchen

3.1 Viele Münzen werfen

Aufgabe: Seien ganz viele Münzen gegeben, wobei für jede Münze die Wahrscheinlichkeit q ist, dass Zahl geworfen wird. Wenn n dieser Münzen gleichzeitig geworfen werden, finde die Wahrscheinlichkeit, dass genau m davon Zahl sind. Mit $q = 1/2$ bestimme die Anzahl m^* , mit dem die Wahrscheinlichkeit maximal ist. Hat diese Wahrscheinlichkeit den Grenzwert 1, wenn n immer größer wird? Konvergiert der durchschnittliche Anteil der Münzen mit Zahl in Wahrscheinlichkeit zu m^*/n ?



Sei $\Omega = \{K, Z\}$ der Ergebnisraum für den Wurf einer dieser Münzen. Seien die Münzen mit $\{M_1, \dots, M_n\}$ markiert. Für eine beliebige Münze sei $X : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable mit

$$X(K) = 0 \quad X(Z) = 1$$

und mit der [Bernoulli Verteilung](#)

$$P(X = 0) = 1 - q, \quad P(X = 1) = q$$

mit Erwartungswert bzw. Varianz,

$$\mathbb{E}(X) = q, \quad \mathbb{E}((X - q)^2) = q(1 - q).$$

Nun für $j = 1, \dots, n$ sei $X_j : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable, die den Münzenwurf der j ten Münze darstellt. Angenommen sind alle Zufallsvariablen $\{X_j\}_{j=1}^n$ von einander unabhängig und gleich verteilt wie X . Sei die Zufallsvariable $Y^{(n)}$ die Anzahl der n Münzen mit Z ,

$$Y^{(n)} = X_1 + \dots + X_n.$$

Für die Wahrscheinlichkeit vom Ereignis $Y^{(n)} = m$ wird beispielsweise der Fall $n = 2$ betrachtet. Es gelten

$$\begin{aligned} P(Y^{(2)} = m) &= P(X_1 + X_2 = m) = \\ &= \sum_{l_1, l_2 \in \{0,1\}}^{l_1+l_2=m} P(X_1 = l_1)P(X_2 = l_2) = \sum_{l_1, l_2 \in \{0,1\}}^{l_1+l_2=m} P(X = l_1)P(X = l_2) = \\ &= \begin{cases} P(X = 0)P(X = 0), & m = 0 \\ P(X = 1)P(X = 0) + P(X = 0)P(X = 1), & m = 1 \\ P(X = 1)P(X = 1), & m = 2 \end{cases} = \begin{cases} 1 & \cdot & (1 - q)^2, & m = 0 \\ 2 & \cdot & q(1 - q), & m = 1 \\ 1 & \cdot & q^2, & m = 2 \end{cases} \end{aligned}$$

wobei die Koeffizienten $\{1, 2, 1\}$ gegeben sind durch

$$\sum_{l_1, l_2 \in \{0,1\}}^{l_1+l_2=m} 1 = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ 1 + 1 = 2, & m = 1 \\ 1, & m = 2. \end{cases}$$

Für eine allgemeines n ist die Summe gegeben durch den [Binomial-Koeffizienten](#),

$$\sum_{l_j \in \{0,1\}}^{l_1+\dots+l_n=m} 1 = \binom{n}{m} = \frac{n!}{m!(n-m)!}$$

die Anzahl der möglichen Zerlegungen von n unterschiedlichen Elementen $\{M_1, \dots, M_n\}$ in 2 unterschiedliche Bins jeweils mit m und $n - m$ Elementen. Für $Y^{(n)}$ gilt

$$\begin{aligned} P(Y^{(n)} = m) &= \sum_{m_j \in \{0,1\}}^{m_1+\dots+m_n=m} P(X_1 = m_1) \cdots P(X_n = m_n) = \\ &= \sum_{m_j \in \{0,1\}}^{m_1+\dots+m_n=m} P(X = m_1) \cdots P(X = m_n) = \sum_{m_j \in \{0,1\}}^{m_1+\dots+m_n=m} q^{m_1+\dots+m_n} (1 - q)^{n-m_1-\dots-m_n} \\ &= \sum_{m_j \in \{0,1\}}^{m_1+\dots+m_n=m} q^m (1 - q)^{n-m} = \binom{n}{m} q^m (1 - q)^{n-m}, \quad m = 0, \dots, n. \end{aligned}$$

Diese ist die [Binomial Verteilung](#) für $Y^{(n)}$. Da die Münzenwürfe unabhängig sind, ist der Erwartungswert der Summe gegeben durch die [Summe der Erwartungswerte](#)

$$\mu_{Y^{(n)}} = \mathbb{E}(Y^{(n)}) = \mathbb{E}(X_1 + \dots + X_n) = \mathbb{E}(X_1) + \dots + \mathbb{E}(X_n) = nq$$

und die Varianz der Summe ist gegeben durch die [Summe der Varianzen](#),

$$\sigma_{Y^{(n)}}^2 = \mathbb{E}((Y^{(n)} - \mu_{Y^{(n)}})^2) = \mathbb{E}((X_1 - \mu_{X_1})^2) + \dots + \mathbb{E}((X_n - \mu_{X_n})^2) = \sigma_{X_1}^2 + \dots + \sigma_{X_n}^2 = nq(1-q).$$

Mit $q = 1/2$ gelten

$$P(Y^{(n)} = m) = \binom{n}{m} 2^{-n}$$

und

$$\mu_{Y^{(n)}} = n/2 = n\mu_X, \quad \sigma_{Y^{(n)}}^2 = n/4 = n\sigma_X^2.$$

Die folgenden Beispiele zeigen,

$(n=2) \quad m :$	1	2
$2^2 P(Y^{(2)} = m) :$	1	1

$(n=3) \quad m :$	1	2	3
$2^3 P(Y^{(3)} = m) :$	1	2	1

$(n=4) \quad m :$	1	2	3	4
$2^4 P(Y^{(4)} = m) :$	1	3	3	1

dass die Wahrscheinlichkeiten durch das Dreieck von Pascal gegeben sind. Offenbar wird die Verteilung mit $m = \lfloor n/2 \rfloor$ maximiert, wobei $\lfloor \cdot \rfloor$ das **floor** der Zahl bedeutet. Zur Bestätigung wird die [Formel von Stirling](#) verwendet,

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \quad n \rightarrow \infty.$$

Es folgt nach Vereinfachung

$$P(Y^{(n)} = m) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{2\pi m(n-m)}} \frac{n^n}{m^m (n-m)^{n-m}} 2^{-n}.$$

Da die logarithmische Funktion streng steigend ist, wird $P(Y^{(n)} = m)$ maximiert, wenn die folgende Funktion minimiert wird,

$$L(m) = (m + \frac{1}{2}) \ln(m) + (n - m + \frac{1}{2}) \ln(n - m).$$

Mit der gröberen Stirling Approximation $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$ ist die Approximation $\tilde{L}(m) = m \ln(m) + (n + m) \ln(n - m) \approx L(m)$ streng konvex auf $[0, n]$ mit einer einzigen kritischen Stelle $m = n/2$. Mit

$$L'(m) = \ln(n - m) - \ln(m) + \frac{1}{2}(1/(n - m) - 1/m), \quad L'(n/2) = 0$$

wird $L(m)$ und auch $\tilde{L}(m)$ in $m = n/2$ minimiert. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass n gerade ist, also gilt $m = n/2$. Mit der [Formel von Stirling](#) folgt nach Vereinfachung

$$P(Y^{(n)} = n/2) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{2\pi(n/2)(n - n/2)}} \frac{n^n}{(n/2)^{n/2} (n - n/2)^{n - n/2}} 2^{-n} = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Daher konvergiert diese Wahrscheinlichkeit nicht zu 1. Es stellt sich aber die Frage, ob der Mittelwert Y_n/n zu $1/2$ in Wahrscheinlichkeit konvergiert,

$$P\left(\left|Y^{(n)}/n - 1/2\right| \leq \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

Laut dem [Zentralen Grenzwertsatz](#) gilt,

$$P\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_X}{1/\sqrt{n}} \in [a, b]\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(Z \in [a, b]), \quad Z \sim N(0, \sigma_X^2), \quad a < b, \quad a, b \in \mathbb{R}$$

wobei $N(0, \sigma_X^2)$ die normale Verteilung mit Erwartungswert 0 und Varianz σ_X^2 ist. Daher gilt

$$P\left(\left|Y^{(n)}/n - 1/2\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\left|\frac{Y^{(n)}/n - 1/2}{1/\sqrt{n}}\right| \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(|Z| \leq \epsilon\sqrt{n}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

3.2 Viele Würfel werfen

Aufgabe: Seien ganz viele sechsseitigen Würfel gegeben, wobei für jede Würfel die Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{6}$ ist, dass die Würfel auf einer beliebigen Seite landet, d.h. die Zahlen $\{1, \dots, 6\}$ sind gleich wahrscheinlich. Wenn n dieser Würfel gleichzeitig geworfen werden, finde die Wahrscheinlichkeit, dass die maximale Summe m^* der geworfenen Zahlen erreicht wird. Hat diese Wahrscheinlichkeit den Grenzwert 1, wenn n immer größer wird? Konvergiert der Durchschnitt der erschienenen Zahlen der geworfenen Würfel in Wahrscheinlichkeit zu m^*/n ?



Sei $\Omega = \{S_1, S_2, \dots, S_6\}$ das Ergebnisraum für den Wurf einer Würfel, wobei S_i die Würfelseite mit der Zahl i darstellt. Sei $X : \Omega \rightarrow \{1, \dots, 6\}$ eine Zufallsvariable mit

$$X(S_1) = 1, \quad \dots \quad X(S_6) = 6$$

und der Verteilung

$$P(X = i) = \frac{1}{6}, \quad i = 1, \dots, 6, \quad P(X \notin \{1, \dots, 6\}) = 0$$

mit Erwartungswert und Varianz,

$$\mu_X = \mathbb{E}(X) = 7/2, \quad \sigma_X^2 = \mathbb{E}((X - 7/2)^2) = 35/12.$$

Für den i ten Würfelwurf sei X_i gleich verteilt wie X . Für eine n -Mal unabhängige Wiederholung des Würfelwurfs sei $Y^{(n)}$ die Summe der Zahlen auf den erschienenen Würfelseiten,

$$Y^{(n)} = X_1 + \dots + X_n.$$

Da die Zufallsvariablen $\{X_i\}_{i=1}^n$ unabhängig sind, ist der Erwartungswert der Summe gegeben durch die [Summe der Erwartungswerte](#)

$$\mathbb{E}(Y^{(n)}) = \mathbb{E}(X_1) + \cdots + \mathbb{E}(X_n) = 7n/2$$

und die Varianz der Summe ist die [Summe der Varianzen](#),

$$\mathbb{E}((Y^{(n)} - 7n/2)^2) = \mathbb{E}((X_1 - 7/2)^2) + \cdots + \mathbb{E}((X_n - 7/2)^2) = 35n/12.$$

Das Ergebnis $(Y^{(2)} = m)$ lässt sich so darstellen,

$$\begin{aligned} (Y^{(2)} = m) &= (Y^{(1)} = m - 1 \text{ und } X_2 = 1) \\ &\text{oder } (Y^{(1)} = m - 2 \text{ und } X_2 = 2) \\ &\text{oder } \cdots \\ &\text{oder } (Y^{(1)} = m - 6 \text{ und } X_2 = 6). \end{aligned}$$

Da die Ereignisse $(X_2 = i)$, $i = 1, \dots, 6$, disjunkt sind, gilt

$$\begin{aligned} P(Y^{(2)} = m) &= P(Y^{(1)} = m - 1 \text{ und } X_2 = 1) \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 2 \text{ und } X_2 = 2) \\ &+ \cdots \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 6 \text{ und } X_2 = 6). \end{aligned}$$

Da die Würfe unabhängig sind, gilt

$$\begin{aligned} P(Y^{(2)} = m) &= P(Y^{(1)} = m - 1) \cdot P(X_2 = 1) \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 2) \cdot P(X_2 = 2) \\ &+ \cdots \\ &+ P(Y^{(1)} = m - 6) \cdot P(X_2 = 6) \end{aligned}$$

oder

$$P(Y^{(2)} = m) = \left[P(Y^{(1)} = m - 1) + P(Y^{(1)} = m - 2) + \cdots + P(Y^{(1)} = m - 6) \right] / 6, \quad 2 \leq m \leq 6 \cdot 2.$$

[Ähnlich](#) für jedes n gilt

$$P(Y^{(n+1)} = m) = \left[P(Y^{(n)} = m - 1) + P(Y^{(n)} = m - 2) + \cdots + P(Y^{(n)} = m - 6) \right] / 6, \quad n \leq m \leq 6n.$$

Eine exakte [Formel](#) für die Verteilung ist gegeben durch

$$P(Y^{(n)} = m) = \frac{1}{6^n} \sum_{k=0}^{\lfloor (m-n)/6 \rfloor} (-1)^k \binom{n}{k} \binom{m-6k-1}{n-1}.$$

Da die Würfelwürfe unabhängig sind, ist der Erwartungswert der Summe gegeben durch die [Summe der Erwartungswerte](#)

$$\mu_{Y^{(n)}} = \mathbb{E}(Y^{(n)}) = \mathbb{E}(X_1 + \cdots + X_n) = \mu_{X_1} + \cdots + \mu_{X_n} = 7n/2$$

und die Varianz der Summe ist gegeben durch die [Summe der Varianzen](#),

$$\sigma_{Y^{(n)}}^2 = \mathbb{E}((Y^{(n)} - \mu_{Y^{(n)}})^2) = \sigma_{X_1}^2 + \cdots + \sigma_{X_n}^2 = 35n/12.$$

Die folgenden Beispiele zeigen,

$(n=1) \quad m :$	1	2	3	4	5	6
$6P(Y^{(1)} = m) :$	1	1	1	1	1	1

$(n=2) \quad m :$	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$6^2P(Y^{(2)} = m) :$	1	2	3	4	5	6	5	4	3	2	1

$(n=3) \quad m :$	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
$6^3P(Y^{(2)} = m) :$	1	3	6	10	15	21	25	27	27	25	21	15	10	6	3	1

$(n=4) \quad m :$	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
$6^4P(Y^{(2)} = m) :$	1	4	10	20	35	56	80	104	125	140	146	140	125	104	80	56	35	20	10	4	1

die Verteilung wird immer glockenförmiger. Weiters wird die Verteilung mit $m = \lfloor 7n/2 \rfloor = \lfloor \mu_{Y^{(n)}} \rfloor$ maximiert und

$$\begin{aligned} P(Y^{(1)} = \lfloor 7/2 \rfloor) &= 1/6 \approx 0.167 \\ P(Y^{(2)} = \lfloor 14/2 \rfloor) &= 6/36 \approx 0.167 \\ P(Y^{(3)} = \lfloor 21/2 \rfloor) &= 27/216 \approx 0.125 \\ P(Y^{(4)} = \lfloor 28/2 \rfloor) &= 146/1296 \approx 0.113 \end{aligned}$$

$$P(Y^{(n)} = \lfloor 7n/2 \rfloor) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\dots} 0.$$

Offenbar konvergieren diese Wahrscheinlichkeit nicht zu 1, sondern zu 0.

Aufgabe: Zeige durch Induktion, dass die Verteilung für $Y^{(n)}$ bei $m^* = \lfloor 7n/2 \rfloor$ maximiert wird, und $P(Y^{(n)} = m^*) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0$.

Laut der obigen Tabellen gelten für $n = 2, 3$,

$$\begin{aligned} m^* &= \lfloor 7n/2 \rfloor \\ P(Y^{(n)} = m^*) &= \max\{P(Y^{(n)} = m)\} \\ P(Y^{(n)} = m) &= 0, \quad m = 1, \dots, n-1 \\ P(Y^{(n)} = m) &> 0, \quad m = n, \dots, 6n \\ P(Y^{(n)} = m) &= P(Y^{(n)} = 7n - m), \quad m = n, \dots, \lfloor 7n/2 \rfloor \\ P(Y^{(n)} = m) &\text{ ist } \begin{cases} \text{steigend,} & m = n-1, \dots, m^* \\ \text{fallend,} & m = \begin{cases} m^*, & n \text{ gerade} \\ m^* + 1, & n \text{ ungerade} \end{cases}, \dots, 6n \end{cases} \end{aligned}$$

Nimm an, dass diese auch für ein fixiertes beliebiges $n > 3$ gelten. Laut der Rekursionsformel gelten für $n+1$,

$$P(Y^{(n+1)} = m) = 0, \quad m = 1, \dots, n-1$$

$$\begin{aligned} P(Y^{(n+1)} = n+1) &= P(Y^{(n)} = n)/6 \\ &> P(Y^{(n+1)} = n) = 0 \\ P(Y^{(n+1)} = n+2) &= [P(Y^{(n)} = n) + P(Y^{(n)} = n+1)]/6 \\ &> P(Y^{(n+1)} = n+1) \\ &\vdots \\ P(Y^{(n+1)} = n+5) &= [P(Y^{(n)} = n) + \dots + P(Y^{(n)} = n+4)]/6 \\ &> P(Y^{(n+1)} = n+4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P(Y^{(n+1)} = k+1) &= [P(Y^{(n)} = k-5) + \dots + P(Y^{(n)} = k)]/6 \\
&> P(Y^{(n+1)} = k) \\
&\quad k = n+5, \dots, m^*
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P(Y^{(n+1)} = m^* + 2) &= [P(Y^{(n)} = m^* - 4) + P(Y^{(n)} = m^* - 3) + P(Y^{(n)} = m^* - 2) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = m^* - 4) + P(Y^{(n)} = m^* - 3) + P(Y^{(n)} = m^* - 2) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1)]/6 \\
&> [P(Y^{(n)} = m^* - 4) + P(Y^{(n)} = m^* - 3) + P(Y^{(n)} = m^* - 2) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = m^* + 1) \\
P(Y^{(n+1)} = m^* + 3) &= [P(Y^{(n)} = m^* - 3) + P(Y^{(n)} = m^* - 2) + P(Y^{(n)} = m^* - 1) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^* + 2)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = m^* - 3) + P(Y^{(n)} = m^* - 2) + P(Y^{(n)} = m^* - 1) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^* + 2)]/6 \\
&> [P(Y^{(n)} = m^* - 3) + P(Y^{(n)} = m^* - 2) + P(Y^{(n)} = m^* - 1) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^* + 2)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = m^* + 2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P(Y^{(n+1)} = 6n + 6) &= P(Y^{(n)} = 6n)/6 \\
&= P(Y^{(n)} = n)/6 = P(Y^{(n+1)} = n + 1) \\
P(Y^{(n+1)} = 6n + 5) &= [P(Y^{(n)} = 6n - 1) + P(Y^{(n)} = 6n)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = n + 1) + P(Y^{(n)} = n)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = n + 2) \\
&> P(Y^{(n+1)} = n + 1) = P(Y^{(n+1)} = 6n + 6) \\
&\quad \vdots \\
P(Y^{(n+1)} = 6n + 2) &= [P(Y^{(n)} = 6n - 4) + \dots + P(Y^{(n)} = 6n)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = n + 4) + \dots + P(Y^{(n)} = n)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = n + 5) \\
&> P(Y^{(n+1)} = n + 4) = P(Y^{(n+1)} = 6n + 3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P(Y^{(n+1)} = k + 6) &= [P(Y^{(n)} = k) + \dots + P(Y^{(n)} = k + 5)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = 7n - k) + \dots + P(Y^{(n)} = 7n - k - 5)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = 7n - k + 1) \\
&> P(Y^{(n+1)} = 7n - k) = P(Y^{(n+1)} = k + 7) \\
&\quad k = 6n - 5, \dots, \left\{ \begin{array}{ll} m^*, & n \text{ gerade} \\ m^* + 1, & n \text{ ungerade} \end{array} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P(Y^{(n+1)} = m^* + 5) &= [P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* + 3) + P(Y^{(n)} = m^* + 4)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = 7n - m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* + 3) + P(Y^{(n)} = m^* + 4)]/6 \\
&> [P(Y^{(n)} = m^* + 5) + P(Y^{(n)} = m^*) + P(Y^{(n)} = m^* + 1) \\
&\quad + P(Y^{(n)} = m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* + 3) + P(Y^{(n)} = m^* + 4)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = m^* + 6) \\
P(Y^{(n+1)} = m^* + 4) &= [P(Y^{(n)} = m^* - 2) + P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* + 3)]/6 \\
&= [P(Y^{(n)} = 7n - m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) + \\
&\quad P(Y^{(n)} = m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* + 3)]/6 \\
&> [P(Y^{(n)} = m^* + 4) + P(Y^{(n)} = m^* - 1) + P(Y^{(n)} = m^*) \\
&\quad + P(Y^{(n)} = m^* + 1) + P(Y^{(n)} = m^* + 2) + P(Y^{(n)} = m^* + 3)]/6 \\
&= P(Y^{(n+1)} = m^* + 5)
\end{aligned}$$

Daher erfüllen die Wahrscheinlichkeiten $\{P(Y^{(n+1)} = m)\}_{m=1}^{6n}$ die Eigenschaften, die für die Fälle $n = 2, 3$ explizit bestätigt worden sind. Dass die Wahrscheinlichkeiten $\{P(Y^{(n)} = \lfloor 7n/2 \rfloor)\}_{n=1}^{\infty}$ zu Null konvergiert, lässt sich folgendermaßen zeigen. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass $7n/2$ ganzzahlig ist. Laut dem [Zentralen Grenzwertsatz](#) gilt,

$$P\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_X}{1/\sqrt{n}} \in [a, b]\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(Z \in [a, b]), \quad Z \sim N(0, \sigma_X^2), \quad a < b, \quad a, b \in \mathbb{R}$$

wobei $N(0, \sigma_X^2)$ die normale Verteilung mit Erwartungswert 0 und Varianz σ_X^2 ist. Es gilt daher

$$P(Y^{(n)} = m) = P\left(\frac{Y^{(n)}/n - \mu_X}{1/\sqrt{n}} = \frac{m/n - \mu_X}{1/\sqrt{n}}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(Z = \frac{m/n - \mu_X}{1/\sqrt{n}}) = 0$$

Es stellt sich aber die Frage, ob der Durchschnitt $Y^{(n)}/n$ der erschienenen Zahlen der geworfenen Würfel zu $\mu_X = 7/2$ in Wahrscheinlichkeit konvergiert,

$$P\left(\left|Y^{(n)}/n - 7/2\right| \leq \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

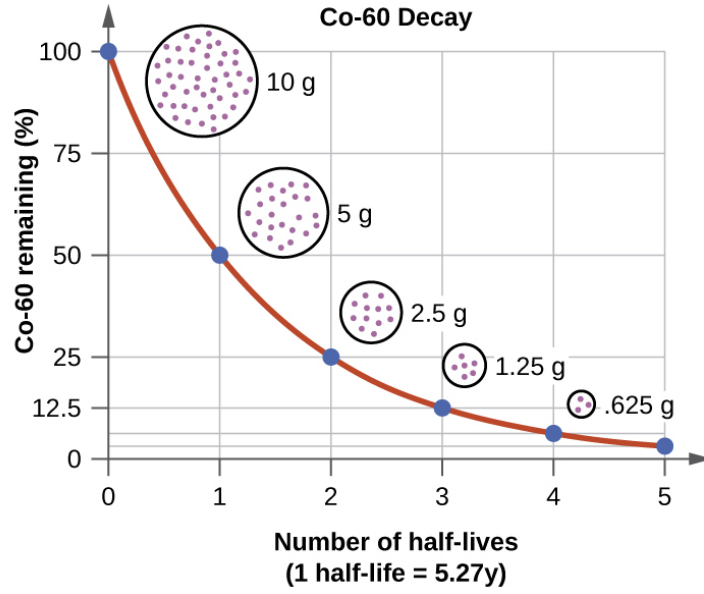
Dies folgt aus dem [Zentralen Grenzwertsatz](#),

$$P\left(\left|Y^{(n)}/n - 7/2\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\left|\frac{Y^{(n)}/n - 7/2}{1/\sqrt{n}}\right| \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(|Z| \leq \epsilon\sqrt{n}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

3.3 Viele Teilchen zerfallen

Siehe das [Skriptum](#) über radioaktiven Zerfall und das [Video](#).

Aufgabe: Seien ganz viele radiative Teilchen gegeben, wobei für jedes Teilchen die Wahrscheinlichkeit $q(t)$ ist, dass das Teilchen im Zeitintervall $[0, t]$ zerfällt. Finde $q(t)$ wenn das Teilchen kein Gedächtnis hat, d.h. wenn die Wahrscheinlichkeit eines Zerfalls genau im Zeitintervall $[s, s + t]$ von s nicht abhängt. Wenn es n solcher Teilchen gibt, finde die Wahrscheinlichkeit, dass genau m davon innerhalb des Zeitintervalls $[0, t]$ zerfallen. Mit der Halbwertszeit \hat{t} der Substanz bestimme die Anzahl m^* der im Zeitintervall $[0, \hat{t}]$ zerfallenen Teilchen, die am wahrscheinlichsten ist. Hat diese Wahrscheinlichkeit den Grenzwert 1, wenn n immer größer wird? Konvergiert der durchschnittliche Anteil der zerfallenen Teilchen in Wahrscheinlichkeit zu m^*/n ?



Sei $\Omega = \{K, Z\}$ der Ergebnisraum für den Zerfall eines radioaktiven Teilchens, wobei $Z = \text{Zerfall}$ und $K = \text{kein Zerfall}$. Sei $X(t) : [0, \infty) \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable für den Zerfall eines beliebigen Teilchens mit

$$\text{Ergebnis K} \Rightarrow X(t) = 0, \quad \text{Ergebnis Z} \Rightarrow X(t) = 1.$$

Wenn das Teilchen kein Gedächtnis hat, erfüllt die bedingte Wahrscheinlichkeit

$$P(X(s+t) = 0 | X(s) = 0) = P(X(t) = 0).$$

Durch die Regel von Bayes gilt

$$P(X(s+t) = 0 | X(s) = 0) = \frac{P(X(s+t) = 0 \ \& \ P(X(s) = 0))}{P(X(s) = 0)} = \frac{P(X(s+t) = 0)}{P(X(s) = 0)}.$$

Da die linke Seite durch die Bedingung der Gedächtnislosigkeit gegeben ist, folgt für die sogenannte Überlebensfunktion $S(t) = P(X(t) = 0)$,

$$S(t)S(s) = S(s+t).$$

Mit

$$S(0) = P(X(0) = 0) = 1$$

folgt mit der Gedächtnislosigkeit

$$\frac{S(t+dt) - S(t)}{dt} = \frac{S(t)S(dt) - S(t)S(0)}{dt} = S(t) \frac{S(dt) - S(0)}{dt}.$$

Mit

$$\lambda = -\frac{S'(0)}{S(0)} = -S'(0)$$

und $dt \rightarrow 0$ ergibt sich

$$S'(t) = -\lambda S(t), \quad S(0) = 1.$$

Die Lösung führt zu der exponentiellen Verteilung für $S(t) = P(X(t) = 0)$,

$$P(X(t) = 0) = e^{-\lambda t}, \quad P(X(t) = 1) = 1 - e^{-\lambda t}, \quad t \geq 0.$$

Man merkt, die bedingte Wahrscheinlichkeit $P(X(s+t) = 0 \ \& \ X(s) = 0)$ erfüllt

$$\begin{aligned} P(X(s+t) = 0 \mid X(s) = 0) &= \frac{P(X(s+t) = 0 \ \& \ X(s) = 0)}{P(X(s) = 0)} = \frac{P(X(s+t) = 0)}{P(X(s) = 0)} \\ &= \frac{e^{-\lambda(s+t)}}{e^{-\lambda s}} = e^{-\lambda t} = P(X(t) = 0). \end{aligned}$$

Daher erfüllt ein einziges Teilchen die Bedingung der Gedächtnislosigkeit. Analog zu einem Münzenwurf gelten

$$\mu_{X(t)} = \mathbb{E}(X(t)) = 1 - e^{-\lambda t}, \quad \sigma_{X(t)}^2 = \mathbb{E}((X(t) - \mathbb{E}(X(t)))^2) = (1 - e^{-\lambda t})e^{-\lambda t}.$$

Sei nun $X_i(t) : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable, die den Zerfall des i ten Teilchens darstellt. Angenommen sind alle Zufallsvariablen X_i von einander unabhängig und gleich verteilt wie $X(t)$. Sei die Zufallsvariable

$$Y^{(n)}(t) = \sum_{i=1}^n X_i(t)$$

die gesamte Anzahl der Teilchen, die im Zeitintervall $[0, t]$ zerfallen. Analog zu einem Münzenwurf hat $Y^{(n)}(t)$ die [Binomial Verteilung](#),

$$P(Y^{(n)}(t) = k) = \binom{n}{k} (1 - e^{-\lambda t})^k (e^{-\lambda t})^{n-k}, \quad t \geq 0$$

mit Erwartungswert und Varianz,

$$\mu_{Y^{(n)}(t)} = \mathbb{E}(Y^{(n)}(t)) = n(1 - e^{-\lambda t}) = n\mu_{X(t)}$$

$$\sigma_{Y^{(n)}(t)}^2 = \mathbb{E}((Y^{(n)}(t) - \mathbb{E}(Y^{(n)}(t)))^2) = ne^{-\lambda t}(1 - e^{-\lambda t}) = n\sigma_{X(t)}^2.$$

Mit der Halbwertszeit $\hat{t} = \ln(2)/\lambda$, bei der $\mathbb{E}(Y^{(n)}(\hat{t})) = n/2$ gilt, gelten für $\hat{X} = X(\hat{t})$ und $\hat{Y}^{(n)} = Y^{(n)}(\hat{t})$,

$$P(\hat{Y}^{(n)} = m) = \binom{n}{m} 2^{-n}$$

und

$$\mu_{\hat{Y}^{(n)}} = n/2 = n\mu_{\hat{X}}, \quad \sigma_{\hat{Y}^{(n)}}^2 = n/4 = n\sigma_{\hat{X}}^2.$$

Die folgenden Beispiele zeigen,

$(n=2) \quad m :$	1	2
$2^2 P(\hat{Y}^{(2)} = m) :$	1	1

$(n=3) \quad m :$	1	2	3
$2^3 P(\hat{Y}^{(3)} = m) :$	1	2	1

$(n=4) \quad m :$	1	2	3	4
$2^4 P(\hat{Y}^{(4)} = m) :$	1	3	3	1

dass die Wahrscheinlichkeiten durch das Dreieck von Pascal gegeben sind. Genau wie beim Münzenwurf wird die Verteilung mit $m = \lfloor n/2 \rfloor$ maximiert, wobei $\lfloor \cdot \rfloor$ das **floor** der Zahl bedeutet. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass n gerade ist, also gilt $m = n/2$. Mit der [Formel von Stirling](#),

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n, \quad n \rightarrow \infty.$$

folgt nach Vereinfachung

$$P(\hat{Y}^{(n)} = n/2) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{n}{2\pi(n/2)(n - n/2)}} \frac{n^n}{(n/2)^{n/2} (n - n/2)^{n-n/2}} 2^{-n} = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Daher konvergiert diese Wahrscheinlichkeit nicht zu 1, sondern zu 0. Es stellt sich aber die Frage, ob der durchschnittliche Anteil $Y^{(n)}/n$ der zerfallenen Teilchen zu $1/2$ in Wahrscheinlichkeit konvergieren,

$$P\left(\left|\hat{Y}^{(n)}/n - 1/2\right| \leq \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

Laut dem **Zentralen Grenzwertsatz** gilt,

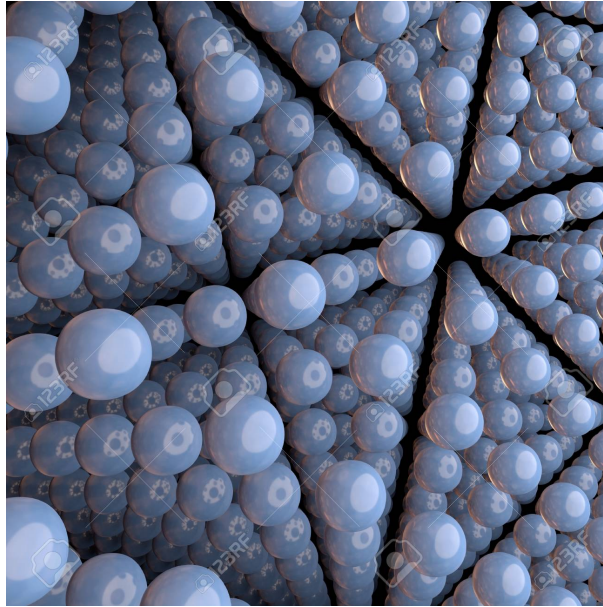
$$P\left(\frac{\hat{Y}^{(n)}/n - \mu_{\hat{X}}}{1/\sqrt{n}} \in [a, b]\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(Z \in [a, b]), \quad Z \sim N(0, \sigma_{\hat{X}}^2), \quad a < b, \quad a, b \in \mathbb{R}$$

wobei $N(0, \sigma_{\hat{X}}^2)$ die normale Verteilung mit Erwartungswert 0 und Varianz $\sigma_{\hat{X}}^2$ ist. Daher gilt

$$P\left(\left|\hat{Y}^{(n)}/n - 1/2\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\left|\frac{\hat{Y}^{(n)}/n - 1/2}{1/\sqrt{n}}\right| \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(|Z| \leq \epsilon\sqrt{n}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

3.4 Viele stationäre Teilchen in einem Behälter

Aufgabe: Seien ganz viele Teilchen und ein Behälter gegeben, wobei der Behälter in ganz vielen Bins unterteilt ist. Sei es gleich wahrscheinlich, dass ein beliebiges Bin mit einem beliebigen Teilchen besetzt wird. Finde die Verteilung der absoluten Anzahlen $\{m_i^*\}_{i=1}^k$ von n Teilchen in $k \leq n$ Bins, die am wahrscheinlichsten ist. Hat diese Wahrscheinlichkeit den Grenzwert 1, wenn n immer größer wird? Konvergiert die Verteilung der relativen Anzahlen in Wahrscheinlichkeit zu $\{m_i^*/n\}_{i=1}^k$?



Sei $\Omega = \{B_1, B_2, \dots, B_k\}$ das Ergebnisraum mit den möglichen Orten der Teilchen. Seien die Teilchen mit $\{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ markiert. Analog zu einem Münzenwurf sei für ein beliebiges Teilchen $X_i : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable, die das i te Bin darstellt, und zwar mit

$$X_i(B_i) = 1, \quad X_i(B_j) = 0, \quad i, j = 1, \dots, k$$

und mit der Verteilung

$$P(X_i = 0) = 1 - q_i, \quad P(X_i = 1) = q_i,$$

wobei

$$0 \leq q_i \leq 1, \quad q_1 + \dots + q_k = 1$$

weil ein Teilchen sich in irgendwelchem Bin befinden soll. Mit $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_k\}$ und $\mathbf{q} = \{q_1, \dots, q_k\}$ gelten

$$\mathbb{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{q}, \quad \mathbb{E}\left((\mathbf{X} - \mathbf{q})(\mathbf{X} - \mathbf{q})^\top\right) = \text{diag}(\mathbf{q}) - \mathbf{q}\mathbf{q}^\top,$$

d.h. die Zufallsvariablen X_i sind korreliert, weil ein Teilchen sich nicht gleichzeitig in 2 verschiedenen Bins befinden kann. Nun für $j = 1, \dots, n$ sei $X_{i,j} : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable, die für das j te Teilchen darstellt, ob es sich im i ten Bin befindet. Da die Teilchen unabhängig von einander und gleichartig Platz finden, sind die Zufallsvariablen $\{X_{i,j}\}_{j=1}^n$ unabhängig und gleich verteilt wie X_i . Sei die Zufallsvariable $Y_i^{(n)}$ die Anzahl der n Teilchen im i ten Bin,

$$Y_i^{(n)} = X_{i,1} + \dots + X_{i,n}.$$

Seien $\mathbf{X}_j = \{X_{1,j}, \dots, X_{k,j}\}$, $\mathbf{l}_j = \{l_{1,j}, \dots, l_{k,j}\}$, $\mathbf{Y}^{(n)} = \{Y_1^{(n)}, \dots, Y_k^{(n)}\}$ und $\mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_k\}$. Analog zum Münzenwurf gilt hier

$$\begin{aligned} P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) &= \sum_{\substack{\mathbf{l}_j \in \{0,1\}^k \\ l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m}}} P(\mathbf{X}_1 = \mathbf{l}_1) \dots P(\mathbf{X}_n = \mathbf{l}_n) = \\ &= \sum_{\substack{\mathbf{l}_j \in \{0,1\}^k \\ l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m}}} P(\mathbf{X} = \mathbf{l}_1) \dots P(\mathbf{X} = \mathbf{l}_n) = \\ &= \sum_{\substack{\mathbf{l}_j \in \{0,1\}^k \\ l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m}}} [P(X_1 = l_{1,1}) \dots P(X_k = l_{k,1})] \times \dots \times [P(X_1 = l_{1,n}) \dots P(X_k = l_{k,n})] \\ &= \sum_{\substack{\mathbf{l}_j \in \{0,1\}^k \\ l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m}}} q_1^{l_{1,1} + \dots + l_{1,n}} \dots q_k^{l_{k,1} + \dots + l_{k,n}} = \sum_{\substack{\mathbf{l}_j \in \{0,1\}^k \\ l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m}}} q_1^{m_1} \dots q_k^{m_k}, \quad \sum_{i=1}^k m_i = n \end{aligned}$$

wobei die Summe durch den [Multinomial-Koeffizient](#) gegeben ist,

$$\sum_{\substack{\mathbf{l}_j \in \{0,1\}^k \\ l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m}}} 1 = \binom{n}{m_1 \ m_2 \ \dots \ m_k} = \frac{n!}{m_1! m_2! \dots m_k!}, \quad \sum_{i=1}^k m_i = n,$$

die Anzahl der möglichen Zerlegungen von n unterschiedlichen Elementen $\{T_1, \dots, T_n\}$ in k unterschiedliche Bins jeweils mit m_1, \dots, m_k Elementen. Für $\mathbf{Y}^{(n)}$ gilt

$$P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) = \binom{n}{m_1 \ m_2 \ \dots \ m_k} q_1^{m_1} \dots q_k^{m_k}.$$

Diese ist die [Multinomial-Verteilung](#) für $\mathbf{Y}^{(n)}$. Da die Zufallsvektoren $\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^n$ unabhängig sind, ist der Erwartungsvektor der Summe gegeben durch die [Summe der Erwartungswerte](#)

$$\mathbb{E}(\mathbf{Y}^{(n)}) = \mathbb{E}(\mathbf{X}_1) + \dots + \mathbb{E}(\mathbf{X}_n)$$

und die Kovarianzmatrix der Summe ist die [Summe der Kovarianzmatrizen](#),

$$\mathbb{E}((\mathbf{Y}^{(n)} - n\mathbf{q})^\top (\mathbf{Y}^{(n)} - n\mathbf{q})) = \mathbb{E}((\mathbf{X}_1 - \mathbf{q})^\top (\mathbf{X}_1 - \mathbf{q})) + \dots + \mathbb{E}((\mathbf{X}_n - \mathbf{q})^\top (\mathbf{X}_n - \mathbf{q})).$$

Mit $\mathbf{q} = \mathbf{1}/k$ gelten

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} = \mathbb{E}(\mathbf{X}) = \frac{\mathbf{1}}{k}$$

$$\Sigma_{\mathbf{X}}^2 = \mathbb{E} \left(\left(\mathbf{X} - \frac{\mathbf{1}}{k} \right) \left(\mathbf{X} - \frac{\mathbf{1}}{k} \right)^\top \right) = \frac{1}{k^2} \left(k \cdot \text{diag}(\mathbf{1}) - \mathbf{1}\mathbf{1}^\top \right)$$

$$P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) = \binom{n}{m_1 \ m_2 \ \dots \ m_k} k^{-n}, \quad \mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_k\}$$

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}^{(n)}} = \mathbb{E}(\mathbf{Y}^{(n)}) = \frac{n}{k} \mathbf{1} = n \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$$

und

$$\Sigma_{\mathbf{Y}^{(n)}}^2 = \mathbb{E} \left(\left(\mathbf{Y}^{(n)} - \frac{n}{k} \mathbf{1} \right) \left(\mathbf{Y}^{(n)} - \frac{n}{k} \mathbf{1} \right)^\top \right) = \frac{n}{k^2} \left(k \cdot \text{diag}(\mathbf{1}) - \mathbf{1}\mathbf{1}^\top \right) = n \Sigma_{\mathbf{X}}^2.$$

Gezielt wird nun, dass die Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m})$ für großes n bezüglich $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_k)$ unter der Erhaltung-Einschränkung $m_1 + \dots + m_k = n$ maximiert wird. Da die logarithmische Funktion streng steigend ist, wird $P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m})$ maximiert, wenn $\ln(P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}))$ maximiert wird. Durch die [Formel von Stirling](#) folgt

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{n!}{m_1! \dots m_k!} \right) &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \ln \left(\frac{\sqrt{2\pi n} (n/e)^n}{\sqrt{2\pi m_1} (m_1/e)^{m_1} \dots \sqrt{2\pi m_k} (m_k/e)^{m_k}} \right) \\ &= \ln \left(\frac{(2\pi)^{\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{\frac{k}{2}}} \cdot \frac{n^{n+\frac{1}{2}}}{m_1^{m_1+\frac{1}{2}} \dots m_k^{m_k+\frac{1}{2}}} \cdot \frac{e^{m_1} \dots e^{m_k}}{e^n} \right) \\ &= -\frac{k-1}{2} \ln(2\pi) + (n + \frac{1}{2}) \ln(n) - \sum_{i=1}^k (m_i + \frac{1}{2}) \ln(m_i). \end{aligned}$$

Dies wird unter der Erhaltung-Einschränkung maximiert, wenn die Lagrangesche Funktion

$$L(\mathbf{m}, \lambda) = \sum_{i=1}^k (m_i + \frac{1}{2}) \ln(m_i) - \lambda \left(n - \sum_{i=1}^k m_i \right)$$

stationär ist. Anhand der unten angegebenen Lösung $\mathbf{m} = n\mathbf{1}/k$ wird in der üblichen Weise hier angenommen, dass n/k ausreichend groß ist, um die gröbere Stirling-Approximation $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$ zu rechtfertigen. Die Approximation

$$\tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda) = \sum_{i=1}^k m_i (\ln(m_i) - 1) - \lambda \left(n - \sum_{i=1}^k m_i \right)$$

ist stationär, wenn

$$\partial_{m_i} \tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda) = \ln(m_i) + \lambda = 0, \quad i = 1, \dots, k$$

$$\partial_{\lambda} \tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda) = \sum_{i=1}^k m_i - n = 0.$$

Die einzige Lösung dieses Systems ist

$$m_i = \frac{n}{k}, \quad i = 1, \dots, k, \quad \lambda = \ln(k/n)$$

und mit $\partial_{m_i, m_j} \tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda) = \delta_{i,j}/m_i^2$ ist \tilde{L} konvex bezüglich \mathbf{m} über $(0, n)^k$. Also wird \tilde{L} und auch L bei $\mathbf{m} = n\mathbf{1}/k$ über die Einschränkungsmenge minimiert. Bei der Lösung

$$\mathbf{m} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}^{(n)}} = \frac{n}{k} \mathbf{1}$$

wird zur Vereinfachung angenommen, dass n ein Vielfaches von k ist. Mit der [Formel von Stirling](#) folgt,

$$\begin{aligned} P\left(\mathbf{Y}^{(n)} = \frac{n}{k} \mathbf{1}\right) &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{2\pi n} (n/e)^n}{[\sqrt{2\pi \frac{n}{k}} ((\frac{n}{k})/e)^{\frac{n}{k}}]^k} k^{-n} = \frac{k^{-n}}{(2\pi)^{\frac{k-1}{2}}} \frac{n^{n+\frac{1}{2}}}{[(\frac{n}{k})^{\frac{n}{k}+\frac{1}{2}}]^k} \\ &= \frac{k^{-n}}{(2\pi)^{\frac{k-1}{2}}} \frac{n^{n+\frac{1}{2}}}{n^{n+k/2}/k^{n+k/2}} = \frac{k^{k/2}}{(2\pi n)^{\frac{k-1}{2}}} \end{aligned}$$

oder

$$P\left(\mathbf{Y}^{(n)} = \frac{n}{k} \mathbf{1}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Daher konvergiert diese Wahrscheinlichkeit nicht zu 1, sondern zu 0. Es stellt sich aber die Frage, ob die Verteilung $\mathbf{Y}^{(n)}/n$ der relativen Anzahlen zu $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$ in Wahrscheinlichkeit konvergiert,

$$P\left(\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mathbf{1}/k\right| \leq \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

Laut dem [Zentralen Grenzwertsatz](#) gilt

$$P\left(\frac{\mathbf{Y}^{(n)}/n - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}}{1/\sqrt{n}} \in M\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(\mathbf{Z} \in M), \quad \mathbf{Z} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \Sigma_{\mathbf{X}}^2), \quad M \subset \mathbb{R}^k$$

wobei $\mathbf{N}(\mathbf{0}, \Sigma_{\mathbf{X}}^2)$ die normale Verteilung mit Erwartungsvektor $\mathbf{0}$ und Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{X}}^2$ ist. Daher gilt

$$P\left(\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mathbf{1}/k\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\frac{\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mathbf{1}/k\right|}{1/\sqrt{n}} \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(|\mathbf{Z}| \leq \epsilon\sqrt{n}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1.$$

3.5 Viele energetische Teilchen in einem Behälter

Siehe die Einführung in die [Boltzmann Verteilung](#) und das [Video](#).



Aufgabe: Wie im letzten Abschnitt seien hier viele Teilchen in einem Behälter verteilt, aber nun sind sie in Bewegung. Alle Teilchen besitzen nur kinetische Energie, und die gesamte Energie im Behälter ist fixiert. Analog zur Position im letzten Abschnitt seien nun die Energien der Teilchen in vielen Bins unterteilt. Finde die Verteilung der absoluten Anzahlen $\{m_i^*\}_{i=1}^k$ von n Teilchen in $k \leq n$ Bins, die am wahrscheinlichsten ist. Hat diese Wahrscheinlichkeit den Grenzwert 1, wenn n immer größer wird? Konvergiert die Verteilung der relativen Anzahlen in Wahrscheinlichkeit zu $\{m_i^*/n\}_{i=1}^k$?

Sei $\Omega = \{B_1, B_2, \dots, B_k\}$ das Ergebnisraum mit den möglichen Energien der Teilchen, die mit $\{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ markiert seien. Ein Teilchen im Bin B_i hat die Energie E_i . Sei m_i die Anzahl der n Teilchen im Bin B_i . Mikrozustände sind Verteilungen von $\{T_1, \dots, T_n\}$. Makrozustände sind Verteilungen von $\{m_1, \dots, m_k\}$. Die gesamte Anzahl der Teilchen und die gesamte Energie sind fixiert,

$$\mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n, \quad \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E$$

wobei

$$\mathbf{1} = \{1, 1, \dots, 1\}, \quad \mathbf{m} = \{m_1, m_2, \dots, m_k\}, \quad \mathbf{E} = \{E_1, E_2, \dots, E_k\}.$$

Weiters gelten

$$E_k > E_{k-1} > \dots > E_1 \geq 0.$$

Sei $\hat{E} = E/n$ die durchschnittliche Energie mit

$$E_1 < \hat{E} < \mathbf{1}^\top \mathbf{E}/k.$$

Wie im letzten Abschnitt sei für ein beliebiges Teilchen $X_i : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable, die das i te Bin darstellt, und zwar mit

$$X_i(B_i) = 1, \quad X_i(B_j) = 0, \quad i, j = 1, \dots, k.$$

Für $j = 1, \dots, n$ sei $X_{i,j} : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ eine Zufallsvariable, die für das j te Teilchen darstellt, ob es sich im i ten Bin befindet. Seien $\mathbf{X} = \{X_1, \dots, X_k\}$ und $\mathbf{X}_j = \{X_{1,j}, \dots, X_{k,j}\}$, $j = 1, \dots, n$. Mit

$$N = \sum_{m_1 + \dots + m_k = n}^{m_1 E_1 + \dots + m_k E_k = E} \frac{n!}{m_1! m_2! \dots m_k!}$$

wird hier angenommen, dass die Mikrozustände

$$\mathbf{l}_j \in \{0, 1\}^k, \quad \sum_{j=1}^n \mathbf{l}_j = \mathbf{m}$$

alle gleich wahrscheinlich sind,

$$P(\mathbf{X}_1 = \mathbf{l}_1) \cdot P(\mathbf{X}_2 = \mathbf{l}_2) \dots P(\mathbf{X}_n = \mathbf{l}_n) = \begin{cases} 1/N, & \mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n, \quad \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Das Platzfinden für ein Teilchen hängt im Allgemeinen von der Energieverteilung der anderen Teilchen ab, aber es wird gesehen, für großes $E = \mathcal{O}(n)$ sind $X_{i,j}$ und $X_{i',j'}$ annäherungsweise unabhängig. Sei die Zufallsvariable $Y_i^{(n)}$ die Anzahl der n Teilchen im i ten Bin,

$$Y_i^{(n)} = X_{i,1} + \dots + X_{i,n}.$$

Für $\mathbf{Y}^{(n)} = \{Y_1^{(n)}, \dots, Y_k^{(n)}\}$ gilt

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) &= \sum_{\substack{l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m} \\ l_j \in \{0,1\}^k}} P(\mathbf{X}_1 = l_1) \cdots P(\mathbf{X}_n = l_n) = \sum_{\substack{l_1 + \dots + l_n = \mathbf{m} \\ l_j \in \{0,1\}^k}} \frac{1}{N} \\
&= \frac{1}{N} \binom{n}{m_1 \ m_2 \ \dots \ m_k} = \frac{1}{N} \frac{n!}{m_1! m_2! \cdots m_k!}, \quad \text{wenn } \mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n, \quad \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E \\
&\quad \text{und } P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) = 0, \quad \text{sonst.}
\end{aligned}$$

Diese Verteilung wird mit den folgenden Größen untersucht.

Makrozustände	$\mathbf{E} = \{E_j\}_{j=1}^k$	# Mikrozustände
$\{M = i\}_{i=1}^N$	$\{\mathbf{m}_i\}_{i=1}^N = \{m_{i,j}\}_{i=1, j=1}^{N, k}$	$\{K_i\}_{i=1}^N, K_i = \binom{n!}{m_i!}$
Erwartungen:	$\bar{\mathbf{m}} = \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i K_i / N$	N

Beispielsweise seien $\mathbf{E} = \{(i-1)\Delta E\}_{i=1}^k$, $\Delta E = \frac{n}{k-1}$, $E = n$ und $n, k = 5$.

Makrozustände	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	# Mikrozustände
$M = 1:$	1	4	0	0	0	5
2:	4	0	0	0	1	5
\vdots 3:	3	0	2	0	0	10
4:	3	1	0	1	0	20
am wahr- schein- lichsten $M = 5:$	2	2	1	0	0	30
Erwartungen:	2.50	1.43	0.71	0.29	0.07	Gesamt: 70

Mit Wahrscheinlichkeit 30/70 ist Makrozustand $\mathbf{m}^* = \mathbf{m}_5$ am wahrscheinlichsten, und die Erwartungen $\bar{\mathbf{m}}$ sind ähnlich. Sei M eine Zufallsvariable für den Makrozustand. Beispielsweise wird $\mathbb{E}[X_1] = 0 \cdot P(X_1 = 0) + 1 \cdot P(X_1 = 1)$ durch die Bayesche Regel gegeben,

$$\begin{aligned}
P(X_1 = 1) &= \sum_{i=1}^N P(X_1 = 1 \mid M = i) P(M = i) = \sum_{i=1}^N \frac{m_{i,1}}{n} \frac{K_i}{N} \\
&= \frac{1}{5} \frac{5}{70} + \frac{4}{5} \frac{5}{70} + \frac{3}{5} \frac{10}{70} + \frac{3}{5} \frac{20}{70} + \frac{2}{5} \frac{30}{70} = 0.5
\end{aligned}$$

Analog ergeben sich die Erwartungswerte:

$$\mu_{\mathbf{X}} = \mathbb{E}[\mathbf{X}] = \mathbb{E}[\mathbf{X}_j] = \bar{\mathbf{m}}/n, \quad \mathbb{E}[\mathbf{Y}^{(n)}] = \mathbb{E}[\mathbf{X}_1] + \cdots + \mathbb{E}[\mathbf{X}_n] = \bar{\mathbf{m}}.$$

Unabhängigkeit wird mit der Bayeschen Regel so kontrolliert,

$$\begin{aligned}
P(X_{2,j} = 1 \ \& \ X_{1,j'} = 1) &= \sum_{i=1}^N P(X_{2,j} = 1 \ \& \ X_{1,j'} = 1 \mid M = i) P(M = i) \\
&= \sum_{i=1}^N P(X_{2,j} = 1 \mid X_{1,j'} = 1 \ \& \ M = i) P(X_{1,j'} = 1 \mid M = i) P(M = i) \\
&= \frac{4}{5} \frac{1}{5} \frac{5}{70} + \frac{0}{4} \frac{4}{5} \frac{5}{70} + \frac{0}{4} \frac{3}{5} \frac{10}{70} + \frac{1}{4} \frac{3}{5} \frac{20}{70} + \frac{2}{4} \frac{2}{5} \frac{30}{70} = \frac{1}{7} = P(X_{2,j} = 1) \cdot P(X_{1,j'} = 1)
\end{aligned}$$

Die Übereinstimmung, d.h. Unabhängigkeit von $\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^n$, wird im Allgemeinen für großes $E = \mathcal{O}(n)$ bestätigt.

Mit der Abhängigkeit von $\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^n$ folgt mit dem Zentralen Grenzwertsatz,

$$P\left(\left|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mu_{\mathbf{X}}\right| \leq \epsilon\right) = P\left(\frac{|\mathbf{Y}^{(n)}/n - \mu_{\mathbf{X}}|}{1/\sqrt{n}} \leq \epsilon\sqrt{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(|\mathbf{Z}| \leq \epsilon\sqrt{n}) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0$$

wobei $\mathbf{Z} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \Sigma_{\mathbf{X}}^2)$ mit Erwartungsvektor $\mathbf{0}$ und Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{X}}^2$. Daher ist $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$ annäherungsweise auch die Makrozustand-Verteilung, die am wahrscheinlichsten ist. Trotzdem sind Unterschiede zwischen dem wahrscheinlichsten Zustand \mathbf{m}^* und dem Erwartungszustand $\bar{\mathbf{m}}$ in der obigen Tabelle mit $n = k = 5$ nicht trivial.

Die Methode von Boltzmann wird nun verwendet, um den Makrozustand zu bestimmen, der annäherungsweise für n, k sehr groß am wahrscheinlichsten ist. Dafür wird die Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{Y} = \mathbf{m})$ bezüglich $\mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_k\}$ unter den Erhaltungs-Einschränkungen $\mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n$ und $\mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E$ maximiert. Da die logarithmische Funktion streng steigend ist, wird $P(\mathbf{Y} = \mathbf{m})$ maximiert, wenn $\ln(P(\mathbf{Y} = \mathbf{m}))$ maximiert wird. Durch die [Formel von Stirling](#) folgt

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{n!}{m_1! \dots m_k!} \right) &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \ln \left(\frac{\sqrt{2\pi n} (n/e)^n}{\sqrt{2\pi m_1} (m_1/e)^{m_1} \dots \sqrt{2\pi m_k} (m_k/e)^{m_k}} \right) \\ &= \ln \left(\frac{(2\pi)^{\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{\frac{k}{2}}} \cdot \frac{n^{n+\frac{1}{2}}}{m_1^{m_1+\frac{1}{2}} \dots m_k^{m_k+\frac{1}{2}}} \cdot \frac{e^{m_1} \dots e^{m_k}}{e^n} \right) \\ &= -\frac{k-1}{2} \ln(2\pi) + (n + \frac{1}{2}) \ln(n) - \sum_{i=1}^k (m_i + \frac{1}{2}) \ln(m_i). \end{aligned}$$

Dies wird unter den Erhaltungs-Einschränkungen maximiert, wenn die Lagrangesche Funktion

$$\tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = -(\mathbf{m} + \frac{1}{2})^\top \ln(\mathbf{m}) - \lambda(\mathbf{1}^\top \mathbf{m} - n) - \mu(\mathbf{m}^\top \mathbf{E} - E)$$

stationär ist. Es wird hier in der üblichen Weise angenommen, dass n ausreichend groß ist, um die gröbere Stirling Formel $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$ zu rechtfertigen. Die Approximation $L \approx \tilde{L}$

$$L(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = \mathbf{m}^\top (1 - \ln(\mathbf{m})) - \lambda(\mathbf{1}^\top \mathbf{m} - n) - \mu(\mathbf{m}^\top \mathbf{E} - E)$$

ist stationär, wenn

$$\begin{aligned} \{\partial_{m_i} L(\mathbf{m}, \lambda, \mu)\}_{i=1}^k &= -\ln(\mathbf{m}) - \lambda \mathbf{1} - \mu \mathbf{E} = \mathbf{0}, \\ \partial_\lambda \tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda, \mu) &= n - \mathbf{1}^\top \mathbf{m} = 0 \\ \partial_\mu \tilde{L}(\mathbf{m}, \lambda, \mu) &= E - \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = 0. \end{aligned}$$

Für die nächsten Rechnungen sei die sogenannte Partitionsfunktion definiert,

$$Z(\mu) = \sum_{i=1}^k e^{-\mu E_i} = \mathbf{1}^\top e^{-\mu \mathbf{E}}.$$

Aus $\partial_{m_i} L(\mathbf{m}, \lambda) = 0$ folgt

$$\mathbf{m} = e^{-\lambda - \mu \mathbf{E}}.$$

Aus $\partial_\lambda L(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = 0$ folgt

$$n = \mathbf{1}^\top \mathbf{m} = \mathbf{1}^\top e^{-\lambda - \mu \mathbf{E}} = e^{-\lambda} \mathbf{1}^\top e^{-\mu \mathbf{E}}, \quad \text{oder} \quad e^\lambda = Z(\mu)/n.$$

Aus $\partial_\mu L(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = 0$ folgt

$$\hat{E}Z(\mu) = e^\lambda E = e^\lambda \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = \mathbf{E}^\top e^{-\mu \mathbf{E}} = -Z'(\mu) \quad \text{oder} \quad \phi(\mu) = 0$$

wobei

$$\phi(\mu) = e^{\mu \hat{E}} [Z'(\mu) + \hat{E}Z(\mu)] = [e^{\hat{E}\mu} Z(\mu)]' = (\hat{E} - \mathbf{E})^\top e^{\mu(\hat{E} - \mathbf{E})}.$$

Es wird gezeigt, $\phi(\mu)$ besitzt genau eine Nullstelle in $(0, \infty)$. An der Stelle $\mu = 0$ gilt

$$\phi(0) = \mathbf{1}^\top (\hat{E} - \mathbf{E}) < 0$$

wegen der Annahme $E_1 < \hat{E} < \mathbf{1}^\top \mathbf{E}/k$. Für $\mu \rightarrow \infty$ gilt

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \phi(\mu) = \underbrace{\lim_{\mu \rightarrow \infty} \sum_{E_i \geq \hat{E}} (\hat{E} - E_i) e^{\mu(\hat{E} - E_i)}}_{=0} + \underbrace{\lim_{\mu \rightarrow \infty} \sum_{E_i < \hat{E}/n} (\hat{E} - E_i) e^{\mu(E/n - E_i)}}_{=\infty} = \infty.$$

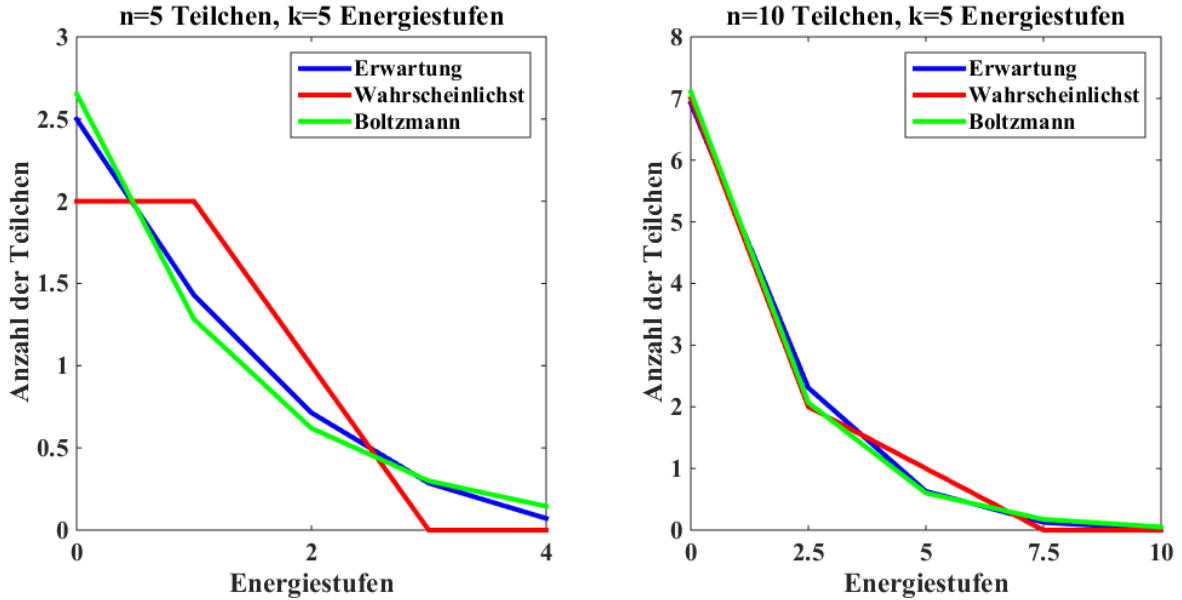
Weiters gilt

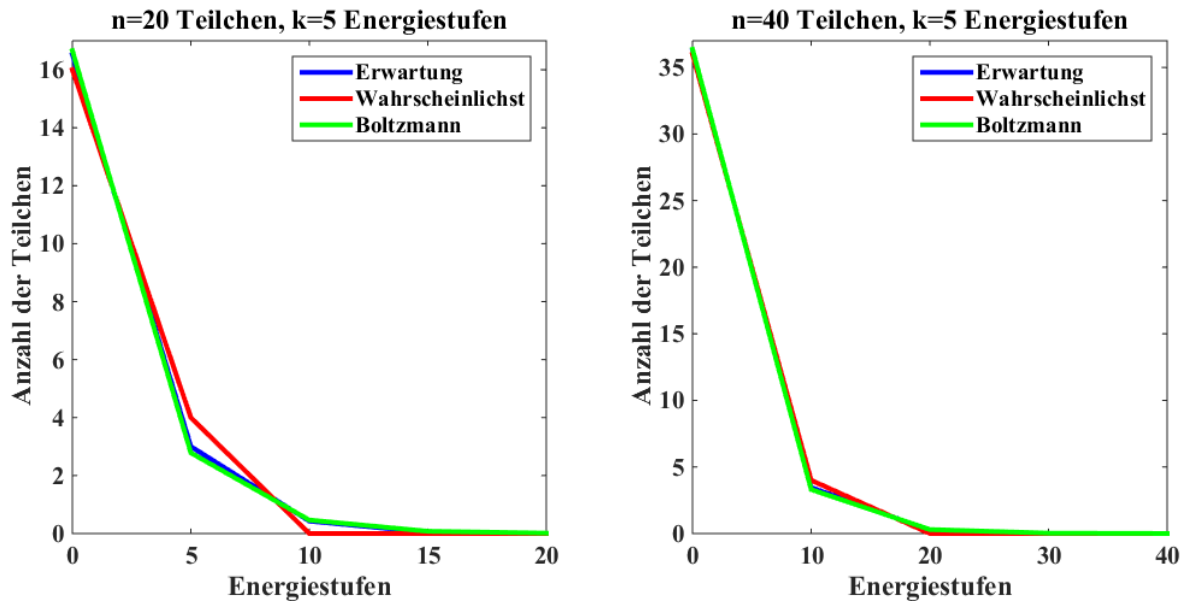
$$\phi'(\mu) = \sum_{i=1}^k (\hat{E} - E_i)^2 e^{\mu(\hat{E} - E_i)} > 0$$

und daher mit dem Zwischenwertsatz gibt es genau eine Nullstelle $\mu^* \in (0, \infty)$ für $\phi(\mu)$. Laut dem Boltzmann Modell gilt $1/\mu^* = \kappa T$, wobei κ die Boltzmann Konstante und T die Temperatur sind. Mit $\partial_{m_i, m_j} L(\mathbf{m}, \lambda, \mu) = -\delta_{i,j}/m_i^2$ ist die Lagrange-Funktion L konkav in \mathbf{m} über $(0, n)^k$. Also wird $L(\mathbf{m}, \lambda, \mu)$ und daher $P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m})$ über die Einschränkungsmenge in der sogenannten [Boltzmann Verteilung](#) maximiert,

$$\mathbf{m}^* = n e^{-\mu^* \mathbf{E}} / Z(\mu^*).$$

Die Erwartungsverteilung, die wahrscheinlichste Verteilung und die Boltzmann Verteilung werden für die Parameter $\mathbf{E} = \{(i-1)\Delta E\}_{i=1}^k$, $\Delta E = \frac{n}{k-1}$, $E = n$, $k = 5$ und $n = 5, 10, 20, 40$ folgendermaßen grafisch verglichen.



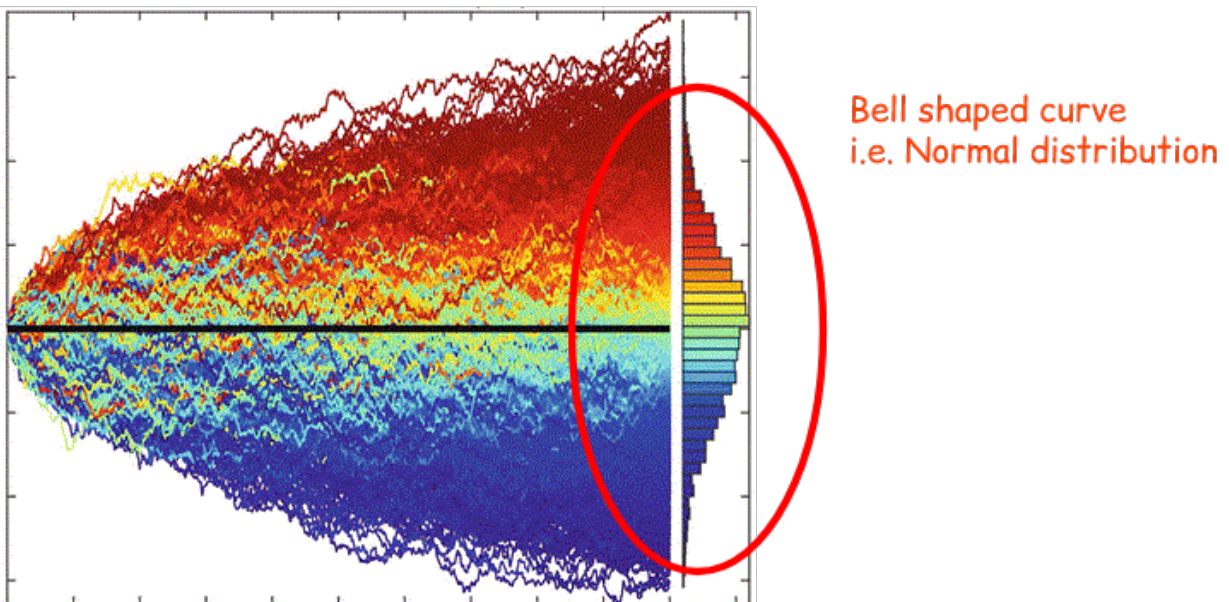


Die Konvergenz der Differenzen zu Null für n immer größer ist augenscheinlich.

4 Diffusion und Brownsche Bewegung

Siehe Seiten 33-35 im [Einführung von Evans](#) und das [Video](#).

Aufgabe: Basierend auf der Definition der Brownschen Bewegung entwickle ein Modell für die Evolution der Wahrscheinlichkeitsdichte für die zufällige Bewegung eines Teilchens.



Robert Brown hat 1826-27 die unregelmäßige Bewegung von im Wasser schwebenden Blütenstaubteilchen beobachtet. Er und andere haben gemerkt, der Pfad eines gegebenen Teilchens ist so unregelmäßig dass es zu keiner Zeit eine Tangente hat, und die Pfade von zwei Teilchen sind unabhängig von einander.

Zur [mathematischen Formulierung](#) dieses Phänomens wird hier die Bewegung von Teilchen in einem dünnen Rohr betrachtet, d.h. in einer räumlichen Dimension. Sei $X(t)$ eine Zufallsvariable für die Position eines einzigen Teilchens zur Zeit t . Sei $\rho(x, t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für $X(t)$,

$$\rho(a \leq X(t) \leq b) = \int_a^b \rho(\xi, t) d\xi.$$

Nun sei $\delta(\tau)$ eine Zufallsvariable, die die Änderung der Position des Teilchens in einem Zeitintervall der Länge τ darstellt. Sei $f(\xi, \tau)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für $\delta(\tau)$,

$$P(\delta(\tau) \in [a, b]) = \int_a^b f(\xi, \tau) d\xi$$

die keine Bewegungsrichtung bevorzugt, und daher ist $f(\xi, \tau)$ eine gerade Funktion in ξ : $f(\xi, \tau) = f(-\xi, \tau)$. Wenn die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t)$ für $X(t)$ gegeben ist, dann folgt aus

$$\begin{aligned} P(a \leq X(t + \tau) \leq b) &= P(a \leq X(t) + \delta(\tau) \leq b) = \\ \int_{-\infty}^{+\infty} P(a \leq X(t) + \xi \leq b) f(\xi, \tau) d\xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{a-\xi}^{b-\xi} \rho(\eta, t) d\eta \right] f(\xi, \tau) d\xi \\ &= \int_a^b \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, t) f(\xi, \tau) d\xi \right] dx \end{aligned}$$

dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x, t + \tau)$ für $X(t + \tau)$ gegeben ist durch

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, t) f(\xi, \tau) d\xi.$$

Durch [Taylor-Entwicklungen](#) gelten

$$\begin{aligned} \rho(x, t) + \tau \rho_t(x, t) + \dots &= \rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} [\rho(x, t) - \rho_x(x, t)\xi + \rho_{xx}(x, t)\xi^2/2 + \dots] f(\xi, \tau) d\xi \\ &= \rho(x, t) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi, \tau) d\xi}_{=1} - \rho_x(x, t) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \xi f(\xi, \tau) d\xi}_{=0} + \rho_{xx}(x, t) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \xi^2 f(\xi, \tau) d\xi + \dots \end{aligned}$$

wobei die Integrale so vereinfacht werden können, da erstens f eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist, die zweitens in ξ gerade ist. Es ergibt sich dann

$$\rho_t(x, t) = D \rho_{xx}(x, t) \quad \text{mit} \quad D = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi^2}{2\tau} f(\xi, \tau) d\xi.$$

Mit den Anfangsbedingungen

$$\rho^\epsilon(x, 0) = \begin{cases} 1/(2\epsilon), & x \in [-\epsilon, +\epsilon] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

erfüllt

$$\rho^\epsilon(x, t) = \frac{1}{4\epsilon} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x + \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) \right], \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz$$

die partielle Differentialgleichung und die Anfangsbedingungen, wie eine explizite Rechnung bestätigt. Weiters gilt für $t > 0$,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \rho^\epsilon(x, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4\epsilon} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x + \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) \right] = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) = \frac{e^{-x^2/(4Dt)}}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

und daher wird f gegeben durch

$$\frac{e^{-x^2/(4D\tau)}}{\sqrt{4\pi D\tau}} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \rho^\epsilon(x, 0 + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho^\epsilon(x - \xi, 0) f(\xi, \tau) d\xi = \frac{1}{2\epsilon} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} f(\xi, \tau) d\xi \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} f(x, \tau).$$

Man bestätigt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi^2}{2\tau} f(\xi, \tau) d\xi &= \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi^2}{4D\tau} e^{-\xi^2/(4D\tau)} \frac{d\xi}{\sqrt{4D\tau}} \stackrel{z=\xi/\sqrt{4D\tau}}{=} \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 e^{-z^2} dz \\ &= \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{1}{2} z e^{-z^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz \right] = \frac{D}{2} [\text{erf}(+\infty) - \text{erf}(-\infty)] = D \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [\text{erf}(+\infty) - \text{erf}(-\infty)] &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz = \left\{ \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \right] \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \\ &= \left\{ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} r e^{-r^2} dr d\theta \right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{ -e^{-r^2} \Big|_0^\infty \right\}^{\frac{1}{2}} = 1. \end{aligned}$$

Es folgt insbesondere

$$\rho(x, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, 0) f(\xi, \tau) d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, 0) \frac{e^{-\xi^2/(4D\tau)}}{\sqrt{4\pi D\tau}} d\xi.$$

Aufgabe: Entwickle eine Simulation mit mehreren Teilchen in zufälliger Bewegung, die diese Wahrscheinlichkeitsdichte aufweist.

Diese Dichten für ein einziges Teilchen lassen sich durch Beobachtungen von vielen Teilchen folgendermaßen schätzen. Sei δ eine Zufallsvariable mit der Verteilung

$$P(\delta = -1) = \frac{1}{2} = P(\delta = +1) \quad \text{und} \quad \mu_\delta = \mathbb{E}(\delta) = 0, \quad \sigma_\delta^2 = \mathbb{E}(\delta^2) = 1$$

wobei $\delta = -1$ und $\delta = +1$ Verschiebungen eines Teilchens nach links bzw. nach rechts darstellen. Seien $\{\delta_k\}_{k=1}^\infty$ unabhängige Zufallsvariablen, alle gleich verteilt wie δ . Nun sei die Position eines Teilchens zur Zeit t durch die Zufallsvariable

$$X(t; \Delta t) = \sqrt{2D\Delta t} \sum_{k=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \delta_k, \quad X(0; \Delta t) = 0$$

dargestellt, wobei die Bewegung durch diskrete Sprünge $\pm\sqrt{2D\Delta t}$ eingeschränkt ist. Weiters ist die anfängliche Position des Teilchens an der Stelle $x = 0$ fixiert. Zu den Zeiten $K\Delta t$, $K \in \mathbb{N}$, gelten

$$X(K\Delta t; \Delta t) = \sqrt{2D\Delta t} \sum_{k=1}^K \delta_k = X((K-1)\Delta t; \Delta t) + \sqrt{2D\Delta t} \cdot \delta_K.$$

Es gelten

$$\begin{aligned} \mu_{X(t; \Delta t)} &= \mathbb{E}(X(t; \Delta t)) = \sqrt{2D\Delta t} \sum_{k=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \mu_{\delta_k} = 0 \\ \sigma_{X(t; \Delta t)}^2 &= \mathbb{E}(X(t; \Delta t)^2) = 2D\Delta t \sum_{k=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \sigma_{\delta_k}^2 = \frac{\lfloor t/\Delta t \rfloor}{t/\Delta t} 2Dt. \end{aligned}$$

Laut dem [Zentralen Grenzwertsatz](#),

$$P(a \leq X(t; \Delta t) \leq b) =$$

$$P\left(\sqrt{\frac{t/\Delta t}{[t/\Delta t]}} \frac{a}{\sqrt{2Dt}} \leq \frac{X(t; \Delta t) - \mu_{X(t; \Delta t)}}{\sigma_{X(t; \Delta t)}} \leq \sqrt{\frac{t/\Delta t}{[t/\Delta t]}} \frac{b}{\sqrt{2Dt}}\right)$$

$$\xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} P\left(\frac{a}{\sqrt{2Dt}} \leq Z \leq \frac{b}{\sqrt{2Dt}}\right), \quad Z \sim N(0, 1), \quad a < b, \quad a, b \in \mathbb{R}.$$

Daher gilt

$$P(a \leq X(t; \Delta t) \leq b) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{a/\sqrt{2Dt}}^{b/\sqrt{2Dt}} e^{-x^2/2} dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx.$$

Aufgabe: Entwickle eine Erweiterung, in der δ die Werte $\{-1, 0, +1\}$ annehmen kann, und daher kann das Teilchen in einem zeitlichen Sprung stehend bleiben.

Zur Darstellung, ob das Teilchen sich im räumlichen Intervall $[a, b]$ befindet, sei $Y(t; \Delta t, a, b)$ die Zufallsvariable

$$Y(t; \Delta t, a, b) = \begin{cases} 1, & X(t; \Delta t) \in [a, b) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit einer Verteilung, die mit der [Bernoulli Verteilung](#) sich approximieren lässt,

$$P(Y(t; \Delta t, a, b) = 1) = P(X(t; \Delta t) \in [a, b)) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)$$

$$P(Y(t; \Delta t, a, b) = 0) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} 1 - q(t; a, b)$$

wobei

$$q(t; a, b) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx.$$

Daher gelten annäherungsweise

$$\mu_{Y(t; \Delta t, a, b)} = \mathbb{E}(Y(t; \Delta t, a, b)) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)$$

und

$$\sigma_{Y(t; \Delta t, a, b)}^2 = \mathbb{E}((Y(t; \Delta t, a, b) - q)^2) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)(1 - q(t; a, b)).$$

Für die zufällige Position des k ten Teilchens, $k \in \mathbb{N}$, seien $X_k(t; \Delta t)$ von einander unabhängig und gleich verteilt wie $X(t; \Delta t)$. Insbesondere sind die anfänglichen Positionen der Teilchen an der Stelle $x = 0$ fixiert. Zur Darstellung, ob das k te Teilchen sich im räumlichen Intervall $[a, b]$ befindet, $k \in \mathbb{N}$, seien die Zufallsvariablen

$$Y_k(t; \Delta t, a, b) = \begin{cases} 1, & X_k(t) \in [a, b) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben, die von einander unabhängig und gleich verteilt wie $Y(t; \Delta t, a, b)$ sind. Sei

$$R_n(t; \Delta t, a, b) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Y_k(t; \Delta t, a, b)$$

die zufällige relative Anzahl der Teilchen, die sich im räumlichen Intervall $[a, b]$ zur Zeit t befinden. Es gelten annäherungsweise

$$\mu_{R_n(t; \Delta t, a, b)} = \mathbb{E}(R_n(t; \Delta t, a, b)) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mu_{Y_k(t; \Delta t, a, b)} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)$$

und

$$\sigma_{R_n(t; \Delta t, a, b)}^2 = \mathbb{E}((R_n(t; \Delta t, a, b) - \mu_{R(t; \Delta t, a, b)})^2) = \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sigma_{Y_k(t; \Delta t, a, b)}^2 \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{n} q(t; a, b)(1 - q(t; a, b)).$$

Laut dem **Zentralen Grenzwertsatz** gelten annäherungsweise,

$$P\left(\left|R_n(t; \Delta t, a, b) - \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx\right| < \epsilon\right) = P(|R_n(t; \Delta t, a, b) - q(t; a, b)| < \epsilon) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} P\left(\frac{-\epsilon}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))/n}} \leq \frac{R_n(t; \Delta t, a, b) - \mu_{R_n(t; \Delta t, a, b)}}{\sigma_{R_n(t; \Delta t, a, b)}} \leq \frac{\epsilon}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))/n}}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(\frac{-\epsilon\sqrt{n}}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))}} \leq Z \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))}}\right), \quad Z \sim N(0, 1)$$

oder

$$P\left(\left|R_n(t; \Delta t, a, b) - \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx\right| < \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

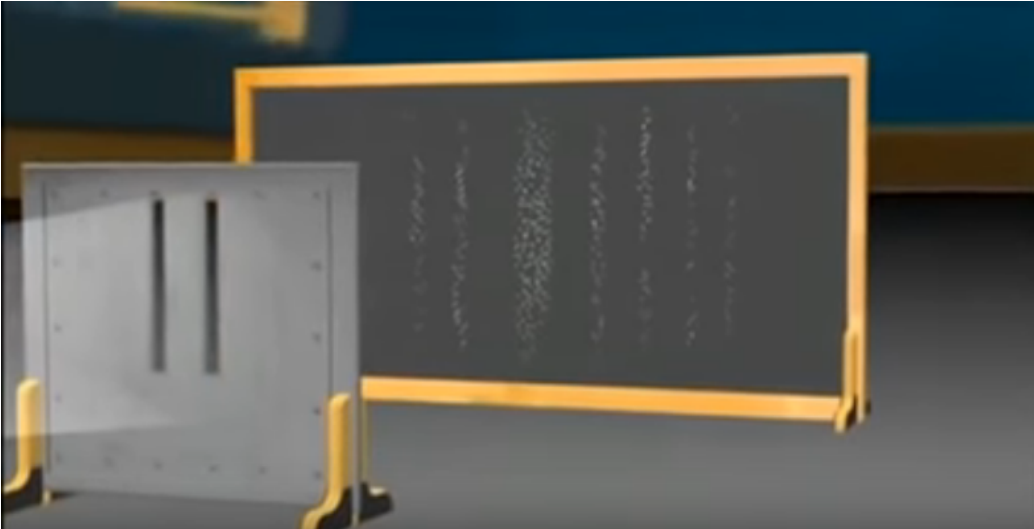
Daher lässt sich die Dichte f so schätzen,

$$\frac{R_n(t; \Delta t, x, x + \Delta x)}{\Delta x} \xrightarrow[\Delta t, \Delta x \rightarrow 0]{n \rightarrow \infty} f(x, t).$$

Aufgabe: Wiederhole die obigen Überlegungen für die Bewegung von Teilchen in einem dünnen Rohr mit einer fixierten endlichen Länge.

5 Von Quanten- bis zur klassischen Materie

Siehe Seiten 22-27 im **Quantenmechanik** und das **Video**.



Aufgabe: Basierend auf den Grundlagen der Wellendynamik entwickle ein Modell für den wellenartigen Charakter eines unscharfen Teilchens. Verwende dieses Modell, um das Doppelspalt-Experiment zu simulieren.

Im 20. Jahrhundert ist entdeckt worden, dass Licht und Materie beide einen Wellen- und einen Teilchen-Charakter besitzen. Um den Wellencharakter zu verdeutlichen, soll die mathematische Beschreibung von Wellen hervorgehoben werden, wie sie für Elektromagnetismus und Strömungsmechanik bekannt sind. Sei eine Welle mit der Wellenfunktion

$$\begin{aligned} w(x, t) &= u(x, t) + i \cdot v(x, t) \\ &= \rho(x, t) \exp[i \cdot \theta(x, t)] \end{aligned}$$

$$\rho(x, t) = \sqrt{u^2(x, t) + v^2(x, t)}, \quad \tan(\theta(x, t)) = v(x, t)/u(x, t)$$

$$u(x, t) = \rho(x, t) \cos(\theta(x, t)), \quad v(x, t) = \rho(x, t) \sin(\theta(x, t))$$

dargestellt, wobei nur die Intensität

$$|w(x, t)| = \rho(x, t)$$

messbar ist. Falls es zwei Wellen $w_1(x, t)$ und $w_2(x, t)$ geben sollte, folgt aus der Superposition für die Gesamtamplitude

$$w(x, t) = w_1(x, t) + w_2(x, t)$$

$$\begin{aligned} w_1(x, t) &= u_1(x, t) + i \cdot v_1(x, t) = \rho_1(x, t) \exp[i \cdot \theta_1(x, t)] \\ w_2(x, t) &= u_2(x, t) + i \cdot v_2(x, t) = \rho_2(x, t) \exp[i \cdot \theta_2(x, t)] \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} |w(x, t)|^2 &= (u_1(x, t) + i \cdot v_1(x, t)) \cdot (u_1(x, t) - i \cdot v_1(x, t)) \\ &= u_1^2(x, t) + v_1^2(x, t) + u_2^2(x, t) + v_2^2(x, t) + 2v_1(x, t)v_2(x, t) + 2u_1(x, t)u_2(x, t) \\ &= \rho_1^2(x, t) + \rho_2^2(x, t) + 2\rho_1(x, t)\rho_2(x, t) \times \\ &\quad [\cos(\theta_1(x, t)) \cos(\theta_2(x, t)) + \sin(\theta_1(x, t)) \sin(\theta_2(x, t))] \\ &= \rho_1^2(x, t) + \rho_2^2(x, t) + 2\rho_1(x, t)\rho_2(x, t) \cos[\theta_1(x, t) - \theta_2(x, t)]. \end{aligned}$$

Der letzte Term ist der sogenannte Interferenzterm.

Der klassische Transport von Masse wird bezüglich der Materie-Dichte mit der Konvektionsgleichung modelliert,

$$\rho_t(x, t) + [v(x, t)\rho(x, t)]_x = 0$$

wobei $v(x, t)$ die lokale Geschwindigkeit ist. Beispielsweise ist die Lösung dieser Gleichung gegeben durch die reisende Welle

$$\rho(x, t) = \rho_0(x - vt)$$

wenn anfänglich gilt $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$ und die Geschwindigkeit $v(x, t) = v$ eine Konstante ist. Mit diesem Modell kann aber keine Interferenz entstehen. Deswegen wird eine Materie-Welle mit der Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = \sqrt{\rho(x, t)} \exp[i\theta(x, t)/\hbar], \quad \rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2, \quad \theta(x, t) = \arg[\psi(x, t)]$$

allgemeiner modelliert, wobei die Phase θ für die beobachteten Interferenzmuster notwendig ist. Die Phase ist hier mit der Planckschen Konstante \hbar skaliert. Für eine Materie-Welle wird die Wellenfunktion so interpretiert, dass

$$|\psi(x, t)|^2 = \rho(x, t)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Position eines Teilchens darstellt. Daher muss erfüllt werden,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad \forall t \geq 0.$$

Weiters gibt es die Beziehung $\theta_x(x, t) = mv(x, t)$ zwischen der Phase θ und der Geschwindigkeit v , wobei m die Masse eines Teilchens darstellt. Mit einer lokalen potentiellen Energie $V(x, t)$ wird die Konvektionsgleichung für ρ mit einer unten hergeleiteten Gleichung für die Phase [gekoppelt](#),

$$\begin{cases} \rho_t(x, t) + \frac{1}{m}[\theta_x(x, t)\rho(x, t)]_x = 0 \\ \theta_t(x, t) + \frac{1}{2m}\theta_x^2(x, t) + V(x, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\rho_{xx}(x, t)}{\rho(x, t)} = 0. \end{cases}$$

Diese zwei Gleichungen für ρ und θ bilden ein System, das sich von der einfacheren Schrödinger Gleichung ergibt, die folgendermaßen formuliert werden kann.

Für die Bewegung eines einzigen Teilchens in einer räumlichen Dimension sei

$$\psi(x, t) = Ae^{i(\omega x/v - \omega t)} = Ae^{2\pi i(x/\lambda - \nu t)}$$

wobei A die Amplitude der Schwingungen, $\omega = 2\pi\nu$ die Drehfrequenz und $v = \nu\lambda$ die Geschwindigkeit sind. Mit der Frequenz der Schwingungen ν , ist die Energie E gegeben durch die [Planck-Einstein Formel](#),

$$E = 2\pi\hbar\nu.$$

Durch die [de-Broglie-Einstein Hypothese](#), ist der Impuls p gegeben durch

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

Folglich ist die Wellenfunktion gegeben durch

$$\psi(x, t) = Ae^{i(xp - Et)/\hbar}.$$

Es gelten

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) = \frac{ip}{\hbar} Ae^{i(xp - Et)/\hbar}, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} Ae^{i(xp - Et)/\hbar} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi(x, t)$$

und

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{iE}{\hbar} Ae^{i(xp - Et)/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar} \psi(x, t).$$

Die Gesamtenergie E ist gegeben durch die Summe der kinetischen ($\frac{1}{2}mv^2$) und der potentiellen (V) Energie,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V.$$

Aus

$$E\psi(x, t) = \frac{p^2}{2m}\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

folgt

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - V\psi.$$

Diese ist die Schrödinger-Gleichung in einer räumlichen Dimension. Mit den Rechnungen

$$\frac{\hbar}{i} \left(\rho^{\frac{1}{2}} e^{i\theta/\hbar} \right)_t = \left(-i\hbar(\rho^{\frac{1}{2}})_t + \rho^{\frac{1}{2}}\theta_t \right) e^{i\theta/\hbar} = \left(-i\hbar \frac{\rho_t}{2\rho^{\frac{1}{2}}} + \rho^{\frac{1}{2}}\theta_t \right) e^{i\theta/\hbar}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\rho^{\frac{1}{2}} e^{i\theta/\hbar} \right)_{xx} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left((\rho^{\frac{1}{2}})_x e^{i\theta/\hbar} + \frac{i}{\hbar} \rho^{\frac{1}{2}} \theta_x e^{i\theta/\hbar} \right)_x \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left((\rho^{\frac{1}{2}})_{xx} + \frac{2i}{\hbar} (\rho^{\frac{1}{2}})_x \theta_x - \frac{1}{\hbar^2} \rho^{\frac{1}{2}} \theta_x^2 + \frac{i}{\hbar} \rho^{\frac{1}{2}} \theta_{xx} \right) e^{i\theta/\hbar} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left((\rho^{\frac{1}{2}})_{xx} - \frac{1}{\hbar^2} \rho^{\frac{1}{2}} \theta_x^2 + \frac{i}{\hbar \rho^{\frac{1}{2}}} (\rho_x \theta_x + \rho \theta_{xx}) \right) e^{i\theta/\hbar} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left((\rho^{\frac{1}{2}})_{xx} - \frac{1}{\hbar^2} \rho^{\frac{1}{2}} \theta_x^2 + \frac{i}{\hbar \rho^{\frac{1}{2}}} (\theta_x \rho)_x \right) e^{i\theta/\hbar} \end{aligned}$$

folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\hbar}{i} \psi_t - \frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} + V\psi = \\ &= \left(-i\hbar \frac{\rho_t}{2\rho^{\frac{1}{2}}} + \rho^{\frac{1}{2}}\theta_t \right) e^{i\theta/\hbar} - \frac{\hbar^2}{2m} \left((\rho^{\frac{1}{2}})_{xx} - \frac{1}{\hbar^2} \rho^{\frac{1}{2}} \theta_x^2 + \frac{i}{\hbar \rho^{\frac{1}{2}}} (\theta_x \rho)_x \right) e^{i\theta/\hbar} + V \rho^{\frac{1}{2}} e^{i\theta/\hbar} \\ &= \rho^{\frac{1}{2}} e^{i\theta/\hbar} \left\{ \theta_t - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\rho^{\frac{1}{2}})_{xx}}{\rho^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{2m} \theta_x^2 + V \right\} - \frac{i\hbar e^{i\theta/\hbar}}{2\rho^{\frac{1}{2}}} \left\{ \rho_t + \frac{1}{m} (\theta_x \rho)_x \right\} \end{aligned}$$

oder

$$0 = \frac{2\rho}{\hbar} \left\{ \theta_t - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\rho^{\frac{1}{2}})_{xx}}{\rho^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{2m} \theta_x^2 + V \right\} - i \left\{ \rho_t + \frac{1}{m} (\theta_x \rho)_x \right\}.$$

Da der reelle und der imaginäre Teile beide Null sein müssen, ergibt sich das oben stehende System für ρ und θ .

Mit zwei oder drei räumlichen Dimensionen $\mathbf{x} = (x, y)$ bzw. $\mathbf{x} = (x, y, z)$ und der Notation

$$\begin{aligned} \nabla\theta &= \{\theta_x, \theta_y\} \quad \text{bzw.} \quad \nabla\theta = \{\theta_x, \theta_y, \theta_z\} \\ \nabla \cdot \{F, G\} &= F_x + G_x \quad \text{bzw.} \quad \nabla \cdot \{F, G, H\} = F_x + G_x + H_x \\ \Delta\psi &= \nabla \cdot \nabla\psi = \psi_{xx} + \psi_{yy} \quad \text{bzw.} \quad \Delta\psi = \nabla \cdot \nabla = \psi_{xx} + \psi_{yy} + \psi_{zz} \end{aligned}$$

ist die Schrödinger Gleichung analog gegeben durch

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi - V\psi$$

und das System für ρ und θ ist

$$\begin{cases} \rho_t(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{m} \nabla \cdot (\nabla\theta(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t)) = 0 \\ \theta_t(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2m} |\nabla\theta|^2 + V(\mathbf{x}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\rho(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)} = 0. \end{cases}$$

Aufgabe: Siehe Seiten 226-230 im [Numerik Skriptum](#) für Methoden zur numerischen Lösung der Schrödinger Gleichung mit Anfangsbedingungen. Hinweis: Für hohe Frequenzen in der Lösung ist ein sehr feines Gitter notwendig!

Aufgabe: Entwickle eine Integral-Formel zur Lösung des Anfangswertproblems für die Schrödinger Gleichung,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - V\psi, \quad \psi(x, 0) = \psi_0(x).$$

Im letzten Abschnitt ist gezeigt worden, die Lösung des Problems

$$\rho_t = D\rho_{xx}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \geq 0, \quad \rho(x, 0) = \rho_0(x)$$

ist gegeben durch

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(x - \xi) \frac{e^{-\xi^2/(4Dt)}}{\sqrt{4\pi Dt}} d\xi.$$

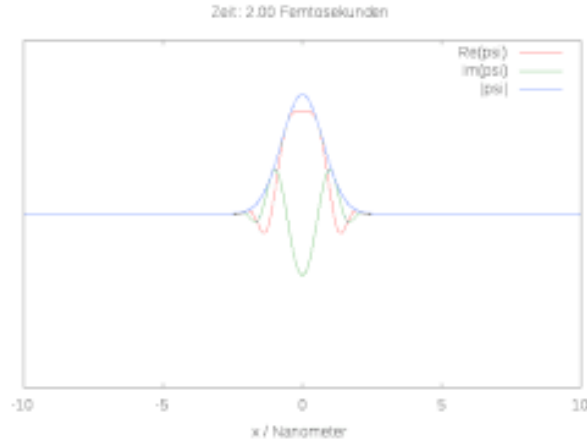
Mit $\rho_0(x) \rightarrow \psi_0(x)$, $\rho(x, t) \rightarrow \psi(x, t)$, $D \rightarrow i\hbar/(2m)$ und $V = 0$ ist die Lösung der Schrödinger Gleichung mit Anfangsbedingungen $\psi_0(x)$ gegeben durch:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_0(x - \xi)}{\sqrt{4\pi \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4 \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}\right) d\xi.$$

Aufgabe: Siehe die *Lösung* der Schrödinger Gleichung auf der [Wiki-Seite](#) für ein freies Teilchen ($V = 0$) in einer einzigen räumlichen Dimension mit Anfangsbedingungen,

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right).$$

Es fehlt ein multiplikativer Faktor. Finde die Korrektur.



Erstens merkt man, die Anfangsbedingungen sollen mit dem multiplikativen Faktor $\sqrt{\sqrt{2/\pi}/\sigma}$ so geändert werden,

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\sqrt{2/\pi}}{\sigma}} \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right)$$

damit erfüllt wird

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) \psi_0^*(x) dx = \\
& \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x + i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right) dx \\
& = \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2 + (x + i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right) dx \\
& = \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{2x^2 - 2\pi^2 \sigma^4/\lambda^2}{\sigma^2}\right) dx = \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2x^2}{\sigma^2}\right) dx \\
& \stackrel{x=\sigma z/\sqrt{2}}{=} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz = \frac{1}{2} [\operatorname{erf}(+\infty) - \operatorname{erf}(-\infty)] = 1.
\end{aligned}$$

Dann für $t > 0$ erfüllt eine Lösung der Schrödinger Gleichung

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) \psi^*(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi_t(x, t) \psi^*(x, t) + \psi(x, t) \psi_t^*(x, t)] dx = \\
& \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{i\hbar}{2m} \psi_{xx}(x, t) \right) \psi^*(x, t) + \psi(x, t) \left(\frac{i\hbar}{2m} \psi_{xx}(x, t) \right)^* \right] dx = \\
& \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi_{xx}(x, t) \psi^*(x, t) - \psi(x, t) \psi_{xx}^*(x, t)] dx = \\
& \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} D_x [\psi_x(x, t) \psi_x^*(x, t) - \psi(x, t) \psi_x^*(x, t)] dx = \\
& \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_x(x, t) \psi_x^*(x, t) - \psi(x, t) \psi_x^*(x, t) \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0
\end{aligned}$$

und daher folgt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) \psi^*(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) \psi_0^*(x) dx = 1.$$

Mit der oben stehenden Lösungsformel ist die Lösung des Anfangswertproblems hier gegeben durch die folgende Rechnung:

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_0(x - \xi)}{\sqrt{4\pi \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4 \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}\right) d\xi \\
&= \sqrt{\frac{1}{\sigma}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - \xi - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{m\xi^2}{2i\hbar t}\right) d\xi. \\
&= \sqrt{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m}{2\pi i \sigma \hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right) + \left(\frac{2(x - i\pi \sigma^2/\lambda)}{\sigma^2}\right) \xi - \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i\hbar t}\right) \xi^2\right] d\xi. \\
&= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\beta + \gamma \xi - \delta \xi^2] d\xi
\end{aligned}$$

mit

$$\alpha = \sqrt{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m}{2\pi i \sigma \hbar t}}, \quad \beta = \left(\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right), \quad \gamma = \left(\frac{2(x - i\pi \sigma^2/\lambda)}{\sigma^2}\right), \quad \delta = \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i\hbar t}\right).$$

Weiters mit $z = \sqrt{\delta}(\xi - \gamma/(2\delta))$ gilt

$$\begin{aligned} & \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\beta + \gamma\xi - \delta\xi^2] d\xi = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\delta\left(\xi - \frac{\gamma}{2\delta}\right)^2 + \frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta\right] d\xi \\ &= \alpha \exp\left(\frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\delta\left(\xi - \frac{\gamma}{2\delta}\right)^2\right] d\xi = \alpha \exp\left(\frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta\right) \underbrace{\sqrt{\frac{\pi}{\delta}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz}_{=1} \end{aligned}$$

und daher

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \alpha \sqrt{\frac{\pi}{\delta}} \exp\left(\frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta\right) \\ &= \sqrt{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \sigma \hbar t}} \sqrt{\frac{\pi}{(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i\hbar t})}}} \exp\left(\frac{\left(\frac{2(x - i\pi\sigma^2/\lambda)}{\sigma^2}\right)^2}{4(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i\hbar t})} - \left(\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right)\right) \\ &= \sqrt{\frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}} \exp\left(\frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^4(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i\hbar t})} - \frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2}\right) \\ &= \sqrt{\frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} \left(1 - \frac{2i\hbar t/m}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}\right)\right) \end{aligned}$$

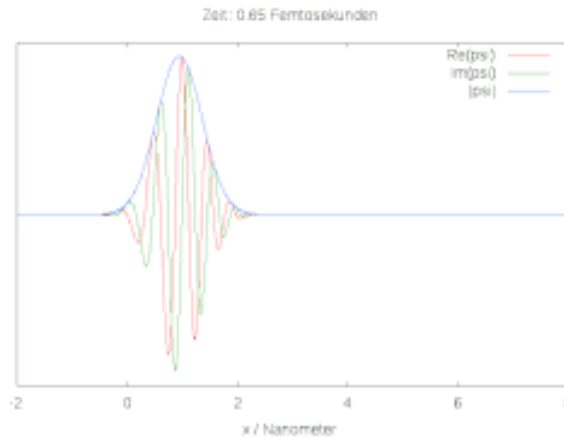
oder

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}\right).$$

Aufgabe: Die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Anfangsbedingung

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{\sqrt{2/\pi}}{\sigma}} \exp\left(-\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i x}{\lambda}\right).$$

wird auf der Wiki-Seite grafisch dargestellt. Finde die Lösung $\psi(x, t)$.



Wie bei der letzten Aufgabe gesehen, ist die Lösung der Schrödinger Gleichung mit Anfangsbedingungen $\psi_0(x)$ so gegeben,

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\psi_0(x - \xi)}{\sqrt{4\pi \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4 \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}\right) d\xi.$$

Mit der vorgegebenen Funktion $\psi_0(x) = \psi(x, 0)$ folgt

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \sqrt{\frac{\sqrt{2/\pi}}{\sigma}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - \xi - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i (x - \xi)}{\lambda} - \frac{m \xi^2}{2i \hbar t} \right) d\xi \\
&= \sqrt{\frac{1}{\sigma}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\left(\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{2\pi i x}{\lambda} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{2(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)}{\sigma^2} - \frac{2\pi i}{\lambda} \right) \xi - \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t} \right) \xi^2 \right] d\xi \\
&= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp [-\beta + \gamma \xi - \delta \xi^2] d\xi
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\alpha &= \sqrt{\frac{1}{\sigma}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}}, \quad \beta = \left(\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{2\pi i x}{\lambda} \right), \\
\gamma &= \left(\frac{2(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)}{\sigma^2} - \frac{2\pi i}{\lambda} \right), \quad \delta = \left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t} \right).
\end{aligned}$$

Weiters mit $z = \sqrt{\delta}(\xi - \gamma/(2\delta))$ gilt

$$\begin{aligned}
&\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp [-\beta + \gamma \xi - \delta \xi^2] d\xi = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\delta \left(\xi - \frac{\gamma}{2\delta} \right)^2 + \frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right] d\xi \\
&= \alpha \exp \left(\frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\delta \left(\xi - \frac{\gamma}{2\delta} \right)^2 \right] d\xi = \alpha \exp \left(\frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right) \underbrace{\sqrt{\frac{\pi}{\delta}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz}_{=1}
\end{aligned}$$

und daher

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \alpha \sqrt{\frac{\pi}{\delta}} \exp \left(\frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \sigma \hbar t}} \sqrt{\frac{\pi}{(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t})}} \times \\
&\exp \left(\frac{\left(\frac{2(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)}{\sigma^2} - \frac{2\pi i}{\lambda} \right)^2}{4(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t})} - \left(\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{2\pi i x}{\lambda} \right) \right) \\
&= \sqrt{\frac{\sigma \sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i \hbar t / m}} \exp \left(\frac{(x - 2i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^4 (\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t})} - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i x}{\lambda} \right)
\end{aligned}$$

oder nach Vereinfachungen,

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma \sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i \hbar t / m}} \exp \left(\frac{2\pi i}{\lambda} \left(x - \frac{\pi \hbar t}{\lambda m} \right) - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi \hbar t / (\lambda m) - i\pi \sigma^2 / \lambda)^2}{\sigma^2 + 2i \hbar t / m} \right).$$

Laut der Arbeit von [Heisenberg](#) können die Position und der Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig bestimmt werden. Die Unschärfe des Ortes x und des Impulses p werden jeweils durch deren statistische Streuung σ_x und σ_p definiert, und die Unschärferelation besagt

$$\sigma_x \cdot \sigma_p \geq \hbar/2.$$

[Dirac](#) hat gemeint, die klassische Mechanik kann als Grenzfall der Quantenmechanik angesehen werden, wenn \hbar gegen Null strebt. Dies soll heißen, Newtonsche Gesetze sollen sich von der Schrödinger

Gleichung ergeben, wenn $\hbar \rightarrow 0$. In der [Arbeit](#) wird im Detail über diesen Grenzübergang erklärt, den man hier z.B. im System für ρ und θ so sieht,

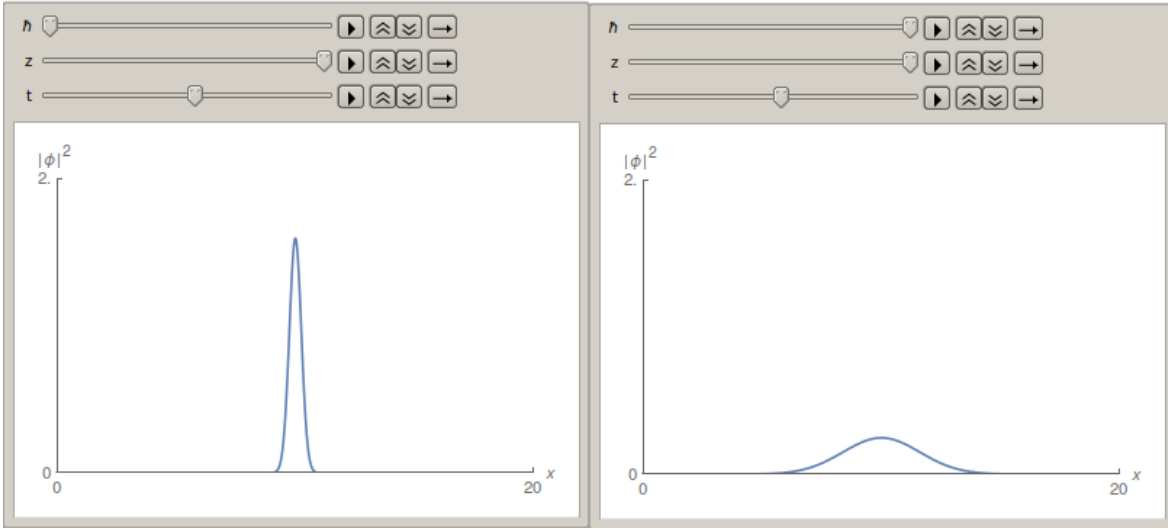
$$\begin{cases} \rho_t(x, t) + \frac{1}{m}[\theta_x(x, t)\rho(x, t)]_x = 0 \\ \theta_t(x, t) + \frac{1}{2m}\theta_x^2(x, t) + V(x, t) = 0. \end{cases}$$

Aufgabe: Mit $\hbar/\lambda = \text{Konstante}$ vergleiche die letzte Lösung für \hbar groß ($\hbar \approx 1$, quantum) und für \hbar klein ($\hbar \approx 0.1$, klassisch).

Die Lösung mit $\lambda = 4\pi\hbar/(mv)$ erfüllt

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}} \exp\left(-\frac{2\sigma^2(x - vt)^2}{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}\right)$$

mit der folgenden grafischen Darstellung für \hbar klein bzw. groß.



Hier für \hbar klein sieht man ein scharfes reisendes Materie-Paket (links). Für \hbar groß sieht man wie das Paket unscharf wird (rechts). Mit $\hbar \rightarrow 0$ oder $m \rightarrow \infty$ hat die Lösung die Form

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{\sigma^2/2}\right)$$

die einer reisenden Welle mit Geschwindigkeit v entspricht.

Aufgabe: Wiederhole die obigen Aufgaben für zwei räumliche Dimensionen, wobei die Bewegung immer noch von einem einzigen freien Teilchen simuliert wird.

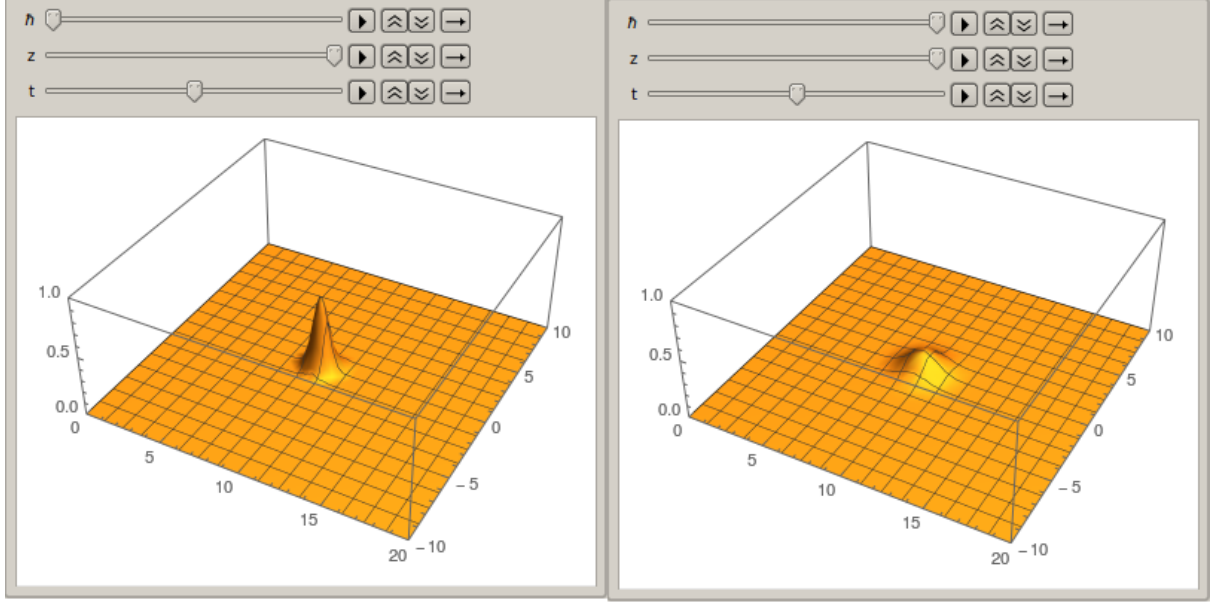
Die Lösung der Schrödinger Gleichung ist

$$\psi(x, y, t) = \frac{\exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda}\left(x - \frac{\pi t \hbar}{\lambda m}\right) - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi t \hbar/(\lambda m) - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2it\hbar/m} - \frac{y^2}{\sigma^2 + 2it\hbar/m}\right)}{(\sigma^2 + 2it\hbar/m)\sqrt{\pi/2}/\sigma}.$$

Die Lösung mit $\lambda = 4\pi\hbar/(mv)$ erfüllt

$$\rho(x, y, t) = |\psi(x, y, t)|^2 = \frac{\sigma^2(2/\pi)}{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2} \exp\left(-\frac{2\sigma^2((x - vt)^2 + y^2)}{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}\right)$$

mit der folgenden grafische Darstellung für \hbar klein ($\hbar \approx 0.1$, klassisch) bzw. groß ($\hbar \approx 1$, quantum).



Hier für \hbar klein sieht man ein scharfes reisendes Materie-Paket (links). Für \hbar klein sieht man wie das Paket unscharf wird (rechts). Mit $\hbar \rightarrow 0$ oder $m \rightarrow \infty$ hat die Lösung die Form

$$\rho(x, y, t) = \frac{2}{\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2 + y^2}{\sigma^2/2}\right)$$

die einer reisenden Welle mit Geschwindigkeit v entspricht.

Aufgabe: Wiederhole die obigen Aufgaben für zwei räumliche Dimensionen, wobei nun die Bewegung von zwei parallelen freien Teilchen simuliert wird.

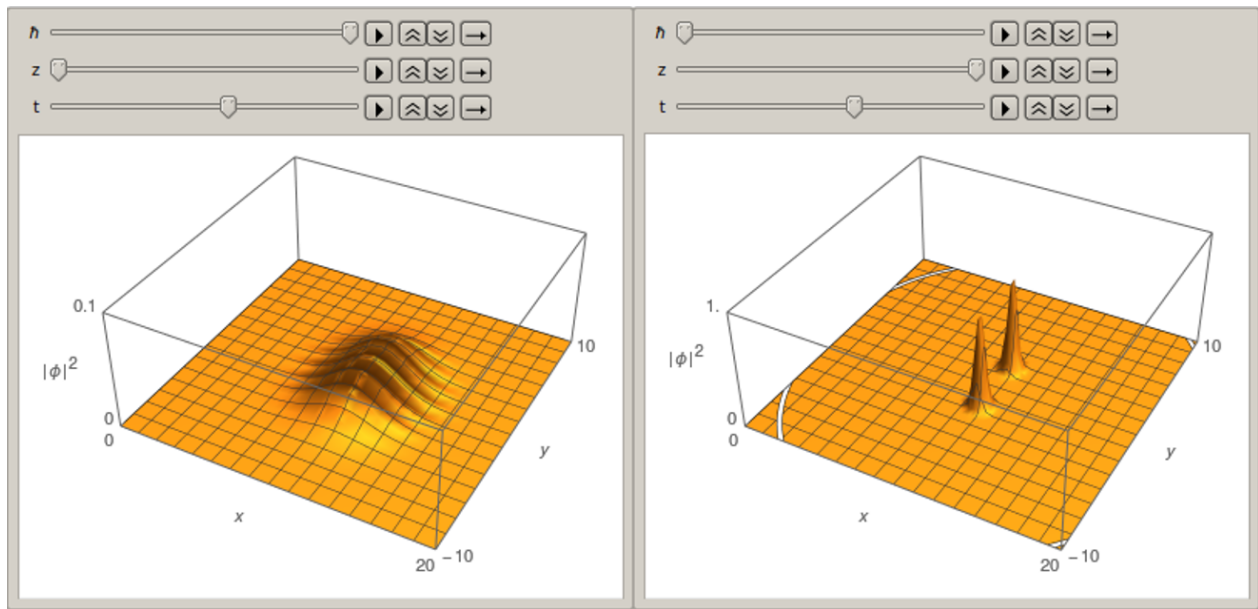
Die Lösung der Schrödinger Gleichung ist

$$\begin{aligned} \psi(x, y, t) = & \frac{\exp\left(-\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(y - \gamma)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda - 2\pi t\hbar/(\lambda m))^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m} + \frac{2i\pi}{\lambda}\left(x - \frac{\pi t\hbar}{\lambda m}\right)\right)}{\sqrt{1 + e^{-2\gamma^2/\sigma^2}(\sigma^2 + 2i\hbar t/m)}\sqrt{\pi}/\sigma} \\ & + \frac{\exp\left(-\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(y + \gamma)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m} - \frac{(x - i\pi\sigma^2/\lambda - 2\pi t\hbar/(\lambda m))^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m} + \frac{2i\pi}{\lambda}\left(x - \frac{\pi t\hbar}{\lambda m}\right)\right)}{\sqrt{1 + e^{-2\gamma^2/\sigma^2}(\sigma^2 + 2i\hbar t/m)}\sqrt{\pi}/\sigma}. \end{aligned}$$

Die Lösung $\rho(x, y, t) = |\psi(x, y, t)|^2$ mit $\lambda = 4\pi\hbar/(mv)$ erfüllt

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t) = & \frac{\sigma^2/\pi}{(1 + e^{2\gamma^2/\sigma^2})(\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2)} \exp\left(\frac{-2\gamma(\sigma^4 - 4\hbar^2 t^2/m^2) - 2\sigma^2((x - vt)^2 + 2y^2)}{\sigma^2(\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2)}\right) \times \\ & \left(\exp\left(\frac{(y - \gamma)^2}{\sigma^2 - 2i\hbar t/m}\right) + \exp\left(\frac{(y + \gamma)^2}{\sigma^2 - 2i\hbar t/m}\right)\right) \left(\exp\left(\frac{(y - \gamma)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}\right) + \exp\left(\frac{(y + \gamma)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar t/m}\right)\right) \end{aligned}$$

mit der folgenden grafische Darstellung für \hbar klein ($\hbar \approx 0.1$, klassisch) bzw. groß ($\hbar \approx 1$, quantum).



Hier für \hbar klein (rechts) sieht man zwei scharfe parallele reisende Materie-Pakete, und für \hbar groß (links) sieht man wie diese Pakete unscharf werden und mit einander interferieren. Mit $\hbar \rightarrow 0$ oder $m \rightarrow \infty$ hat die Lösung die Form

$$\rho(x, y, t) = \frac{\left(e^{(y-\gamma)^2/\sigma^2} + e^{(y+\gamma)^2/\sigma^2} \right)^2}{\pi\sigma^2(1 + e^{2\gamma^2/\sigma^2})} \exp\left(-\frac{(x-vt)^2 + \gamma^2 + 2y^2}{\sigma^2/2}\right)$$

die zwei reisenden Wellen mit der Geschwindigkeit v entspricht.

Im [Video](#) wird das Doppelspalt-Experiment erklärt. Es werden der Wellen-Charakter und der Teilchen-Charakter eines Elektrons veranschaulicht präsentiert. Die letzte Lösung stellt dar, wie unscharfe bzw. scharfe Teilchen das Gebiet an den Stellen $(x, y) = (0, \pm\gamma)$ eintreten und sich von links nach rechts parallel zur x -Achse bewegen. Mit einer numerischen Methode könnte eine Teilchenquelle bei $x < 0$ und $y = 0$ erstellt werden, aus der die Teilchen durch Spalten bei $(x, y) = (0, \pm\gamma)$ fliegen. Jedoch wäre das qualitative Verhalten gleich wie in oben stehenden Abbildung. Weiters wird eine numerische Lösung nicht ausreichend genau, wenn λ sehr klein ist.