Mikrokanonische Verteilung

äquivalente Bezeichnungen:

- Wkts dichte / Verteilung ρ $\equiv$ statistisches Ensemble $\mathcal{E}$ (des TD Gleichgewichts)

- zufälliger Zustand $x \in \Gamma$ gemäß ρ $\equiv$ Element des Ensembles

Speziell:

- mikrokanonische Verteilung:

$$\boxed{\rho_E(x) = \frac{1}{|\Omega_E|} \, \delta(H(x) - E)}$$

- mikrokanonische Zustandssumme:

$$\boxed{Z(E) = \int d\Gamma \, \delta(H(x) - E)} \quad (= |\Omega_E|)$$

d.h. $\rho_E(x) = \frac{1}{Z(E)} \, \delta(H(x) - E)$

- mikrokanischer Erwartungswert:

$$\boxed{\langle A \rangle_E = \int d\Gamma \, A(x) \, \rho(x)}$$

Variante (äquivalent, oft praktischer):

$\longrightarrow$

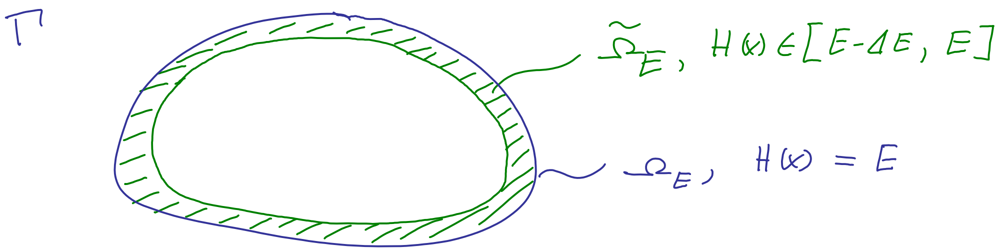
wähle hinreichend kleines ΔE

$$\rightarrow \quad \tilde{\Omega}_E := \{ x \in \Gamma \mid E - \Delta E \le H(x) \le E \} \subset \Gamma$$

"<u>verbreiterte</u> Hyperfläche konstanter Energie E"

- $$\tilde{Z}(E) = \int_{\tilde{\Omega}_E} d\Gamma \equiv \text{Phasenraumvolumen von } \tilde{\Omega}_E$$

- $$\tilde{\rho}_E(x) = \begin{cases} \frac{1}{\tilde{Z}(E)} & : x \in \tilde{\Omega}_E \\ 0 & : x \notin \tilde{\Omega}_E \end{cases}$$



Variante lässt sich verallgemeinern für Systeme mit <u>diskretem</u> Zustandsraum

$$\Gamma = \{ x_1, x_2, x_3, \dots \}$$

mit <u>Energie-Funktion</u>
$$H : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$$
$$x_i \mapsto H(x_i) \equiv E_i$$

allg. <u>Observable</u>
$$A : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$$
$$x_i \mapsto A(x_i) \equiv A_i$$

dann:
- $\tilde{\Omega}_E = \{ x_i \in \Gamma \mid E - \Delta \le E_i \le E \}$
- $\tilde{Z}(E) = \sum_{x \in \tilde{\Omega}_E} 1 = $ Anzahl Zustände in $\tilde{\Omega}_E$

(• $\tilde{\rho}_E(x)$ wie zuvor)

• $\langle A \rangle_E = \sum_{x \in \tilde{\Omega}_E} A(x)\, \rho_E(x)$

etwa: x_i = i-ter Energieeigenzustand $|\varphi_i\rangle$ eines q.m. Systems

$$\rightarrow \quad E_i = \langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_i \rangle$$
$$A_i = \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_i \rangle$$

Beispiel: Paramagnet, bestehend aus $N \gg 1$ Ising-Spins $s_1, s_2, \ldots, s_N$ mit $s_\ell \in \{-1, +1\}$
$\equiv \{\downarrow, \uparrow\}$

$\rightarrow$ Zustand $x = (s_1, s_2, \ldots, s_N) \in \{-1, +1\}^N \equiv \Gamma$

etwa: $x = (-1, -1, +1, +1, -1, \ldots, +1)$
$\hat{=} (\downarrow \; \downarrow \; \uparrow \; \uparrow \; \downarrow \; \cdots \; \uparrow)$

+ externes Magnetfeld $\vec{B} = B\hat{z}$

$\rightarrow$ Energie des ℓ-ten Spins: $E_\ell = \mu_0 B s_\ell$

$\rightarrow$ Gesamtenergie $H(x) = \sum_\ell E_\ell = \mu_0 B \sum_\ell s_\ell$;

mit Magnetisierung $M(x) = \sum_\ell s_\ell$ also

$$\boxed{H(x) = \mu_0 B\, M(x)}$$

$\rightarrow \quad \Omega_E = \{ x \in \{-1,1\}^N \mid \mu_0 B M(x) = E \}$

E gegeben $\rightarrow \boxed{M(x) = E/\mu_0 B}$;

zur <u>Abzählung</u> der Zustände in E verwenden wir:

N_+ = Zahl der Spins im Zustand $+1 \hat{=} \uparrow$

N_- = " " " " $-1 \hat{=} \downarrow$

offenbar $M \overset{!}{=} N_+ - N_- \underset{N_- = N - N_+}{=} 2N_+ - N$;

für geg. E erhalten wir $2N_+(E) - N = E/\mu_0 B$,

also $\boxed{N_+(E)} = \frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{\mu_0 B}\right) = \boxed{N\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{2\mu_0 B N}\right)}$

- $Z(E)$ = Anzahl Zustände mit Energie E

  = " " mit $N_+(E) =$

  = Anzahl Möglichkeiten, $N_+(E)$ „↑-Spins" auf N Plätze zu verteilen

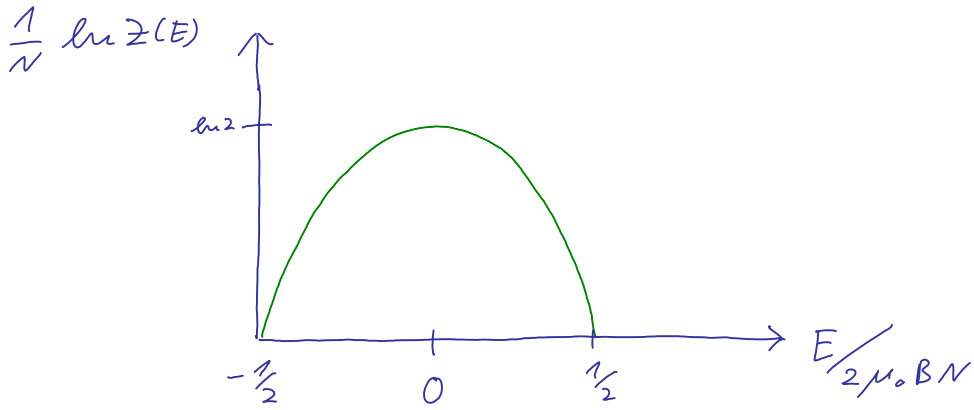
  $\overset{!}{=} \binom{N}{N_+(E)} = \binom{N}{\underbrace{\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{2\mu_0 B N}\right)}_{\lambda} N}$

nach Aufgabe 34 : $\binom{N}{\lambda N} \approx e^{N h(\lambda)}$

mit <u>binärer Entropie</u> $h(x) = -x \ln x - (1-x)\ln(1-x)$,

somit also

$$\boxed{\ln Z(E) = N h\Big(\overbrace{\tfrac{1}{2} - \underbrace{\tfrac{E}{2\mu_0 B N}}_{\in [-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}]}}^{\in [0,1]}\Big)}$$



$\frac{1}{N} \ln Z(E)$
$\ln 2$
$-1/2$
0
$1/2$
$E/2\mu_0 B N$