

Mikrozustand, mikrokanonische Verteilung („mikrokan. Ensemble“):

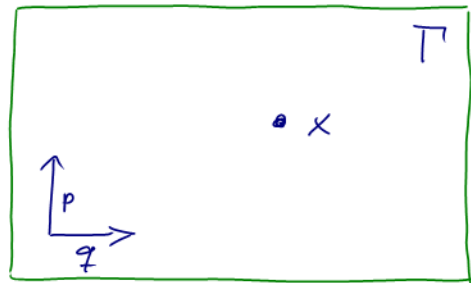
Erwartungswert, Zustandssumme, Wktsverteilung

Mikrozustand = „mikroskopischer“ Zustand eines (makroskopischen) Systems gemäß

(a) Hamiltonscher Mechanik:

— = Phasenraumpunkt $x \in \Gamma$ $\nwarrow$ Zustandsraum

Γ z.B. • 1 Teilchen: $x = (q, p) \in \mathbb{R}^2 \equiv \Gamma$:



• N Teilchen: $x = (\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N} \equiv \Gamma$

(b) Quantenmechanik

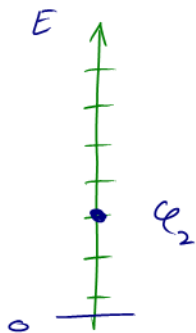
Mikrozustand = Energieeigenzustand φ_E
(des System-Hamiltonoperators H)

z.B. harmonischer Oszillator :

Zustandsmenge
↓

Menge aller Mikrozustände = $\{ \varphi_n \}_{n=0,1,2,\dots} \equiv \Gamma$

$$\hookrightarrow E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$$



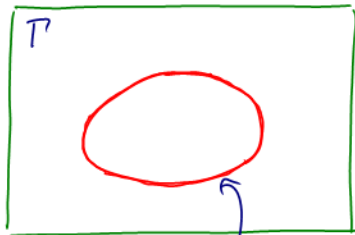
beachte: (a) : kontinuierlicher Zustandsraum

(b) : diskrete Zustandsmenge (i. d. R.)

Grundlegende Annahme:
(S.o.)

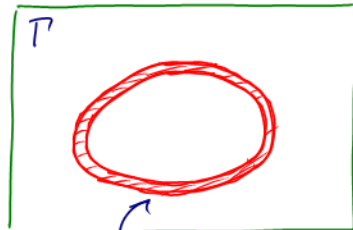
alle Mikrozustände einer geg. Energie
E repräsentieren das f.-d. Gleichgewicht,
bis auf vernachlässigbar wenige Ausnahmen

(a)



$$\underline{\underline{\Omega(E) = \{x \in T \mid H(x) = E\}}}$$

alternativ:

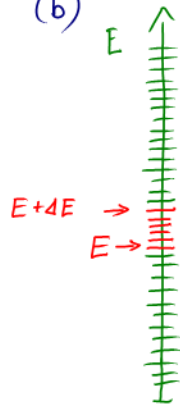


$$\underline{\underline{\Omega_{\Delta E}(E) = \{x \in T \mid E \leq H(x) \leq E + \Delta E\}}}$$

$\Delta E \ll E$

„Energieschale“

(b)



$$\rightarrow \Omega_{\Delta E}(E) = \{ \varphi_i \mid E \leq E_i \leq E + \Delta E \}$$

$\approx$

→ Wert einer Größe A im thermodyn. Gleichgewicht bei Energie E ist gegeben durch

mikrokanonischen Erwartungswert:

$$(a) \quad \langle A \rangle_E := \frac{1}{\text{Vol}(\Omega_{\Delta E}(E))} \int_{\Omega_{\Delta E}(E)} dx \quad A(x)$$

$$(b) \quad \langle A \rangle_E := \frac{1}{\text{Anzahl Zust. in } \Omega_{\Delta E}(E)} \sum_{\varphi \in \Omega_{\Delta E}(E)} \langle \varphi, A \varphi \rangle$$

Zweckmäßig:

mikrokanonische Zustandssumme, $Z(E)$:

$$(a) \quad Z(E) := \text{Vol}(\Omega_{\Delta E}(E)) = \int_{\Omega_{\Delta E}(E)} dx \quad 1$$

$$\text{falls } \Delta E = 0: \quad Z(E) = \int_{\Gamma} dx \quad \delta(H(x) - E)$$

$$(b) \quad Z(E) := \text{Anzahl Zust. in } \Omega_{\Delta E}(E) = \sum_{\varphi \in \Omega_{\Delta E}(E)} 1$$

$$(a) \quad \langle A \rangle_E = \frac{1}{Z(E)} \int_{\Omega_{\Delta E}(E)} dx \quad A(x)$$

falls $\Delta E = 0$:

$$\langle A \rangle_E = \frac{1}{Z(E)} \int_{\Gamma} dx \quad \delta(H(x) - E) A(x)$$

$$(b) \quad \langle A \rangle_E = \frac{1}{Z(E)} \sum_{\varphi \in \Omega_{\Delta E}(E)} \langle \varphi, A \varphi \rangle$$

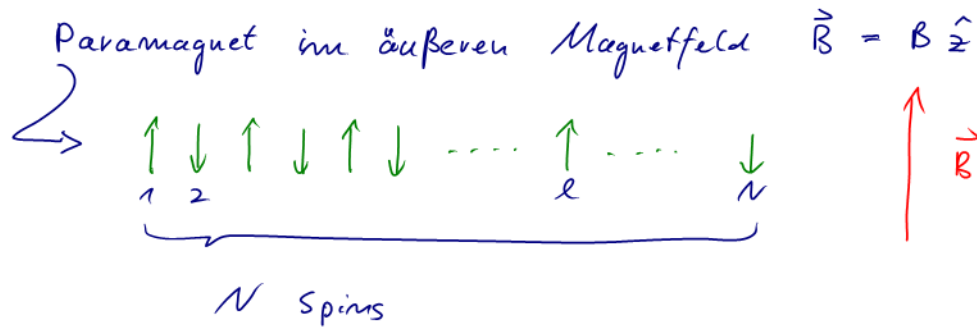
Mittels mikrokanonischer Wktsverteilung

$$S_E(x) := \frac{1}{Z(E)} \int_{\Delta E} (H(x) - E)$$

lautet (a) :

$$\langle A \rangle_E = \int_{\Gamma} dx \quad A(x) S_E(x)$$

Beispiel:



Energieeigenzustand des l -ten Spins: $|s_l\rangle$ mit $s_l \in \{+1, -1\}$
 $\hat{=} \{\downarrow, \uparrow\}$

zur Energie $E_l = \mu_0 B s_l$

$\rightarrow |S\rangle = |s_1 s_2 s_3 \dots s_N\rangle$ ist Energieeigenzustand des Paramag.

zur Energie $E(S) = \sum_{l=1}^N E_l = \mu_0 B \sum_{l=1}^N s_l$

mikrokanonische Zustandssumme $\mathcal{Z}(E) = ?$



$Z(E) = \text{Anzahl Energieeigenzustände } |s\rangle = |s_1 s_2 \dots s_N\rangle \text{ mit}$
 Energie $E(s) = \mu_0 B \sum_{\ell} s_{\ell} \stackrel{!}{=} E$

für $|s\rangle = |s_1 s_2 \dots s_N\rangle$ sei N_+ Anzahl spins im Zustand $|+1\rangle = |\downarrow\rangle$
 N_- Anzahl spins im Zustand $|-1\rangle = |\uparrow\rangle$

$$\rightarrow \sum_{\ell=1}^N s_{\ell} = N_+ - N_- \quad \text{und somit} \quad E(s) = \mu_0 B (N_+ - N_-)$$

$$= \mu_0 B (2N_+ - N)$$

$$\uparrow$$

$$N_+ + N_- = N$$

$\rightarrow$ für vorgegebene Energie E folgt für Zustand $|s\rangle$ mit $E(s) = E$
 also

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

es gibt $\binom{N}{N_+} = \frac{N!}{N_+! (N-N_+)!}$ Möglichkeiten, N_+ viele $|+1\rangle$ Zustände

auf N viele Spins zu verteilen;

folglich gibt es $\binom{N}{N_+}$ viele Energieeigenzustände $|s\rangle$ mit Energie $E(s) \doteq E$!

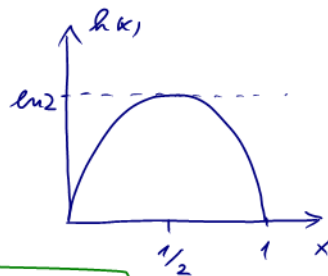
$$\leadsto Z(E) = \binom{N}{N_+} \stackrel{(1)}{=} \binom{N}{\left(\frac{1}{2} + \frac{E}{N\mu_0 B}\right) N}$$

Näherung des Binomialkoeffizienten $\binom{N}{\lambda N} = \frac{N!}{(\lambda N)!(N-\lambda N)!}$

für große N :

$$\binom{N}{\lambda N} \approx e^{N h(\lambda)} \quad (2)$$

mit "binärer Entropie" $h(x) = -x \ln x - (1-x) \ln(1-x)$:



$$\leadsto Z(E) = \exp\left(N h\left(\frac{1}{2} + \frac{E}{N\mu_0 B}\right)\right)$$

(später mehr dazu...)

Γ (2) folgt mittels Stirling-Näherung $n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n$, vgl. Übung