
5.12.2005

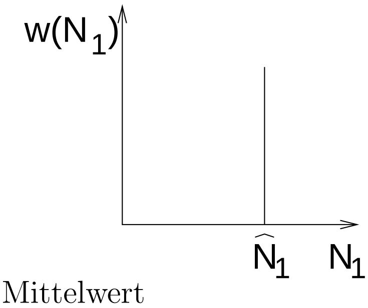
Nun: Näherung um Maximum herum, x =Abweichung von $\hat{N}_1$: $N_1 = \hat{N}_1 + x$ ($x \in O(N)$, $x/\hat{N}_1 \ll 1$)⇒

$$\begin{aligned}
\ln N_1! &= \ln(\hat{N}_1 + x)! \\
&= \ln \hat{N}_1!(\hat{N}_1+1)\cdots(\hat{N}_1+x) \\
&= \ln \hat{N}_1! + \sum_{y=1}^{x} \ln(\hat{N}_1 + y) \\
\ln(N-N_1)! &= \ln(N-\hat{N}_1-x)! \\
&= \ln(N-\hat{N}_1)! \left[(N-\hat{N}_1)(N-\hat{N}_1-1)\cdots(N-\hat{N}_1-x+1)\right]^{-1} \\
&= \ln(N-\hat{N}_1)! - \sum_{y=1}^{x} \ln(N-\hat{N}_1-y+1) \\
&\approx \ln(N-\hat{N}_1)! - \sum_{y=1}^{x} \ln(N-\hat{N}_1-y)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \ln N_1!(N-N_1)! &= \ln \hat{N}_1!(N-\hat{N}_1)! + \sum_{y=1}^{x} \ln \frac{\hat{N}_1 + y}{N-\hat{N}_1-y} \\
&= \ln \hat{N}_1!(N-\hat{N}_1)! + \sum_{y=1}^{x} \ln \frac{\hat{N}_1(1+\frac{y}{\hat{N}_1})}{(N-\hat{N}_1)(1-\frac{y}{N-\hat{N}_1})} \\
&\overset{(10.22)\ \ln(1\pm x)\approx \pm x}{\approx} \ln \hat{N}_1!(N-\hat{N}_1)! + \sum_{y=1}^{x} \left(\ln \frac{p_1}{1-p_1} + y \underbrace{\left(\frac{1}{\hat{N}_1} + \frac{1}{N-\hat{N}_1}\right)}_{=\frac{N}{\hat{N}_1(N-\hat{N}_1)} = \frac{1}{Np_1(1-p_1)}} \right) \\
&\overset{\sum_x x = x(x+1)/2 \approx x^2/2}{\approx} \ln \hat{N}_1!(N-\hat{N}_1)! + x \ln \frac{p_1}{1-p_1} + \frac{x^2}{2\underbrace{Np_1(1-p_1)}_{=(\Delta N_1)^2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad w_N(N_1) &= \frac{N!}{(N-N_1)!N_1!} p_1^{\hat{N}_1+x}(1-p_1)^{N-\hat{N}_1-x} \\
&= \frac{N!}{(N-\hat{N}_1)!\hat{N}_1!} p_1^{-x}(1-p_1)^{x} \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta N_1)^2}\right) p_1^{\hat{N}_1+x}(1-p_1)^{N-\hat{N}_1-x} \\
&= w_N(\hat{N}_1) \exp\left(-\frac{x^2}{2(\Delta N_1)^2}\right) \qquad (10.23)
\end{aligned}$$

⇒Gaußverteilung in der Nähe des Maximums



Relative Breite der Verteilung
z.B. $p_1 = p_2 = 0.5, N = 0.25 \times 10^{22}$:

$$\frac{(\Delta N_1)}{N} = \sqrt{\frac{p_1(1-p_1)}{N}} = \sqrt{\frac{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}{\frac{1}{4}10^{22}}} = 10^{-11}$$

⇒Verteilung <u>sehr scharf</u>

⇒Im Rahmen der Messgenauigkeit misst man fast immer den Mittelwert

10.3 Übergang vom Mikro zum Makrozustand

Zuerst klassische Mechanik, dann QM.

<u>Erinnerung an klassische Mechanik</u>:
Gegeben: klass. N-Teilchen System mit <u>Hamilton-Funktion</u> $H(\underline{q}, \underline{p})$, $\underline{q}$ =Konfiguration, $\underline{q}$ = generalisierter Impuls, $\underline{\pi} = (\underline{q}, \underline{p})$ =Punkt im $6N$-dimensionalen Phasenraum Γ
Hamiltonsche <u>Bewegungsgleichungen</u>

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1 \ldots, 3N) \tag{10.24}$$

Bewegungsgleichung für <u>Observablen</u> $F(\underline{q}, \underline{p}, t)$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} - \{H, F\}_{\underline{q},\underline{p}} \tag{10.25}$$

wobei die <u>Poisson-Klammer</u>

$$\{F, G\}_{\underline{q},\underline{p}} := \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i} \right) \tag{10.26}$$

Damit: $\{q_i, p_k\}_{\underline{q},\underline{p}} = \delta_{i,k}$ und $\{q_i, q_k\}_{\underline{q},\underline{p}} = \{p_i, p_k\}_{\underline{q},\underline{p}} = 0$

Eine <u>Phasentransformation</u> $\underline{\pi} = (\underline{q}, \underline{p}) \to \underline{\pi}' = (\underline{q}', \underline{p}')$ ist genau dann <u>kanonisch</u> (d.h. Bewegungsgleichungen (10.24) bleiben invariant), wenn auch $\{q_i', p_k'\}_{\underline{q},\underline{p}} = \delta_{i,k}$ und $\{q_i', q_k'\}_{\underline{q},\underline{p}} = \{p_i', p_k'\}_{\underline{q},\underline{p}} = 0$ gilt. (Dann gilt auch $\{F(\underline{\pi}), G(\underline{\pi})\}_{\underline{\pi}} = \{F(\underline{\pi}'), G(\underline{\pi}')\}_{\underline{\pi}'}$)

Isoliertes System mit N Teilchen
⇒Energie erhalten $= U$
Alle Trajektorien liegen auf $6N - 1$-dim. Hyperflächen $S_U = \{\underline{\pi} | H(\underline{\pi}) = U\}$

Für Gleichgewichts-TD von Interesse: Zeitgemittelte explizit zeitunabhängige Observablen ($F \neq F(t)$) im Grenzfall langer Zeiten ($\underline{\pi_0}$=Anfangszustand bei $t = 0$)

$$\overline{F}^{t_0} = \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} dt\, F(\underline{\pi}(t|\underline{\pi}_0)) \tag{10.27}$$

Für reale Systeme

- exakte Messung des Anfangszustandes $\underline{\pi}_0$ ist unmöglich (Messungenauigkeit, endliche Messzeit, Unschärferelation).

  Wegen "chaotischer" Zeitentwicklung ⇒$\underline{\pi}(t|\underline{\pi}_0)$ nicht vorhersagbar.

- Statistik $\equiv$ große Teilchezahl N (System makroskopisch)
  $\Rightarrow$Nur an asymptotischen Verhalten $N \to \infty$ interessiert
- Empirisch festgestellt für viele Systeme: Für $t_0 \to \infty$ existiert das TD Gleichgewicht ($\exists$ aber auch viele Ausnahmen $\to$ Nichtgleichgewichts TD)
- Ob Gleichgewicht vorliegt, lässt sich nur an "makroskopischen Observablen" (ohne genaue Def.) feststellen.

Ergoden<u>hypothese</u> (nicht allgemein beweisbar, schon für einfache Modelle schwierig): Für makroskopische Observablen F existiert der Grenzwert

$$\overline{F} = \lim_{t_0 \to \infty} \overline{F}^{t_0} \tag{10.28}$$

und ist (fast, d.h. bis auf Maß 0) unabhängig von den Anfangsbedingungen.

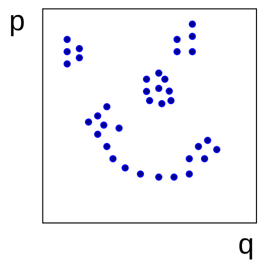
Def.: $\overline{\rho}(\underline{\pi}, t_0|\underline{\pi}_0)d\underline{\pi}$ = Anteil den System innerhalb $[0, t_0]$ im Phasenraumelement $d\underline{\pi}$ um $\underline{\pi}$ verbracht hat. Also gilt

$$\overline{F}^{t_0} = \int d\underline{\pi}\, F(\underline{\pi})\overline{\rho}(\underline{\pi}, t_0|\underline{\pi}_0))$$

Ergodenhypothese bedeutet $\lim_{t_0\to\infty} \overline{\rho}(\underline{\pi}, t_0|\underline{\pi}_0)) = \overline{\rho}(\underline{\pi})$ für fast alle $\underline{\pi}_0$

$$\Rightarrow \quad \overline{F} = \int d\underline{\pi}\, F(\underline{\pi})\overline{\rho}(\underline{\pi})$$

Sieht aus wie Mittwelwert einer W.-Dichte
$\Rightarrow$Einführung <u>statistische Gesamtheit</u>
= sehr große Zahl G identischer Systeme (d.h. gleiche Hamiltonfunktion)
$g(\underline{\pi})$ = Verteilungsdichte (z.Zeit t_0) im Phasenraum Γ
(g = Fkt von $6N$-dim Vektor)
$g(\underline{\pi})d\underline{\pi}$ =Zahl der Systeme im Phasenraumelement
$d\underline{\pi} = dq_1 \ldots dq_{3N}dp_1 \ldots dp_{3N}$ um $\underline{\pi}$
$\Rightarrow\int_\Gamma g(\underline{\pi})d\underline{\pi} = G$
$\Rightarrow\rho(\underline{\pi}) = g(\underline{\pi})/G$ = <u>Phasenraum-dichte</u>



Anmerkung: Bei reiner QM Gesamtheit sind alle Systeme (ohne Messunge) zur Zeit allen Zeiten $[0, t_0]$ im gleichen Zustand $\psi(t)$ ($\to$ statistische Messwerte), hier nicht da sonst langweilig

<u>Dynamische Entwicklung</u> der Systeme
$\Rightarrow g = g(\underline{\pi}, t)$ (erstmal anders als $\overline{\rho}$), und zwar deterministisch