19.1.2006

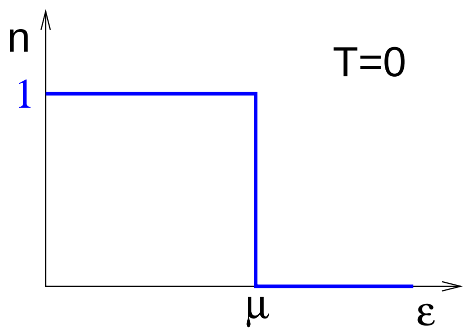
Bsp. für mikroskopische Observable:

$$
\begin{aligned}
n_l := \langle \hat{n}_l \rangle &= \frac{1}{Z_\mu} \,\mathrm{Sp}\,(\hat{n}_l e^{-\beta \sum_j (\epsilon_j-\mu)\hat{n}_j}) \\
&= \frac{1}{Z_\mu} \,\mathrm{Sp}\,(-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \epsilon_l} e^{-\beta \sum_j (\epsilon_j-\mu)\hat{n}_j}) \\
&= -\frac{1}{Z_\mu \beta}\frac{\partial}{\partial \epsilon_l} \,\mathrm{Sp}\,(e^{-\beta \sum_j (\epsilon_j-\mu)\hat{n}_j}) \\
&= -\frac{1}{Z_\mu \beta}\frac{\partial}{\partial \epsilon_l} Z_\mu = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \epsilon_l} \ln Z_\mu \\
&= \frac{\partial \Omega}{\partial \epsilon_l} \\
&= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_l-\mu)} \pm 1} \qquad (12.4)\\
&= \frac{1}{x_l^{-1} \pm 1} \qquad (12.5)
\end{aligned}
$$

Also tatsächlich

$$\sum_j n_j = \sum_j \langle \hat{n}_j \rangle = \langle \sum_j \hat{n}_j \rangle = \langle \hat{N} \rangle = N$$

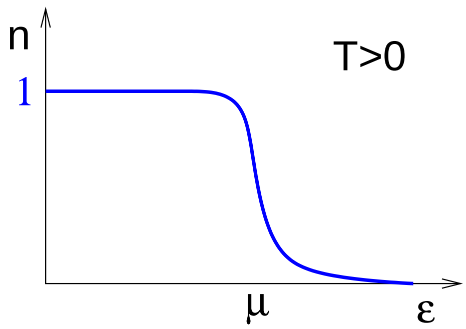
<u>Fermi-Fall</u>



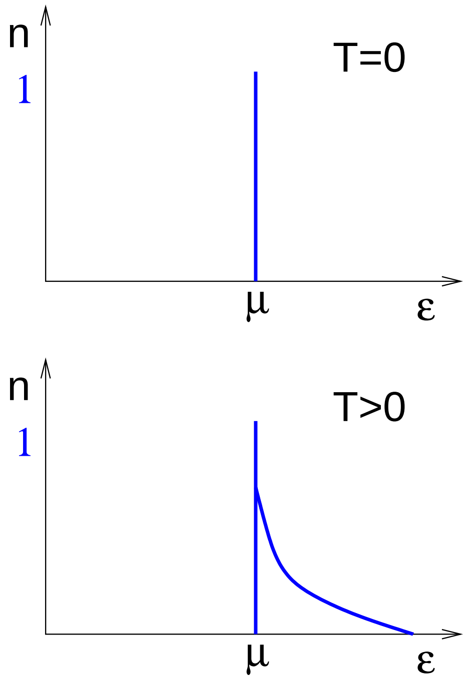
<u>$T \to 0\,(\beta \to \infty)$</u>
Es sei $\epsilon_n < \mu < \epsilon_{n+1} \Rightarrow$

$$\langle n_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für } \epsilon_j < \mu \\ 0 & \text{für } \epsilon_j > \mu \end{cases}$$

alle Zustände bis μ besetzt



<u>$T > 0$</u>:
hier: $\epsilon_F := \mu =$ <u>Fermi-Energie</u>



Bose-Fall

$T \to 0$
Wg. $\mu < \epsilon_j \,\forall j \Rightarrow \langle n_j \rangle = 0 \,\forall j$
$\Rightarrow \langle N \rangle = 0$ (bei vorgegebenen μ)

Sei umgekehrt N vorgegeben
$\Rightarrow \mu \to \epsilon_0$ für $T \to 0$
$\Rightarrow \langle n_0 \rangle = N$ (gilt auch für $0 < T < T_{BE}$, hängt vom genauen System ab)
Makroskopische Besetzung des Grundzustandes (Bose-Einstein Kondensation)

Druck: $p = \frac{\partial \Omega}{\partial V}$ über Volumenabhängigkeit der Ein-Teilchenenergien $\epsilon_j(V)$

[AKTIVATOR]
Berechnen Sie die Entropie $S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}$ und zeigen Sie damit dass sich für innere Energie $U = \Omega + TS + \mu N$ der (erwartete) Wert $\langle \sum_j \epsilon_j n_j \rangle = \langle H \rangle$ ergibt.

Kapitel 13

Grundzüge der Theorie der Schwankungen

Statistische Mechanik erlaubt Eigenschaften zu berechnen, die über TD hinausgehen: Schwankungen (Fluktuationen) TD Größen.

Dabei auch: reale System z.B. $N = 10^{24}$; entspricht das schon $N \to \infty$?

Schwankungen treten sowohl zwischen verschiedenen Messungen am gleichen System, als auch innerhalb eines (makroskopisch homogenen) auf System

13.1 Schwankungen TD Variablen

Relative Schwankung einer Observablen

$$\Gamma(\hat{A}) := \frac{\Delta(\hat{A})}{\langle\hat{A}\rangle} = \sqrt{\frac{\langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle}{\langle\hat{A}\rangle^2}} \tag{13.1}$$

= Maß für Schärfe von $\hat{A}$

Bsp.: Schwankung der inneren Energie (kanonisches Ensemble)

$$\begin{aligned}
\Delta^2(\hat{H}) &= \langle(\hat{H} - \langle\hat{H}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{H}^2 - 2\hat{H}\langle\hat{H}\rangle + \langle\hat{H}\rangle^2\rangle \\
&= \langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2 \\
&= \frac{1}{Z_N}\,\mathrm{Sp}\,(\hat{H}^2 e^{-\beta\hat{H}}) - \left(\frac{1}{Z_N}\,\mathrm{Sp}\,(\hat{H}e^{-\beta H})\right)^2 \\
&= \frac{1}{Z_N}\frac{\partial^2 Z_N}{\partial\beta^2} - \left(\frac{1}{Z_N}\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{1}{Z_N}\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right) = \frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln Z_N = -\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}(\beta F)
\end{aligned} \tag{13.2}$$

Mit

$$\frac{\partial\beta F}{\partial\beta} = F + \beta\frac{\partial F}{\partial\beta} = F + \frac{1}{k_B T}\frac{\partial F}{\partial T}\Big/\frac{\partial\beta}{\partial T} = F + \frac{1}{k_B T}\frac{\partial F}{\partial T}\Big/\frac{-1}{k_B T^2} = F - T\frac{\partial F}{\partial T}$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \Delta^2(\hat{H}) &= -\frac{\partial}{\partial\beta}(F - T\frac{\partial F}{\partial T}) \\
&= -\underbrace{\frac{\partial T}{\partial \beta}}_{-k_B T^2}\frac{\partial}{\partial T}(F - T\frac{\partial F}{\partial T}) \\
&= k_B T^2(\frac{\partial F}{\partial T} - \frac{\partial F}{\partial T} - T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}) \\
&= k_B T^3 \frac{\partial S}{\partial T} \stackrel{\text{Def.} N c_V = T\partial S/\partial T}{=} k_B T^2 N c_V
\end{aligned}
\tag{13.3}
$$

Hinweis: Vergleichen Sie mit Gleichung für $D(E)e^{-\beta E}$ nach (10.71)
Anmerkung: Obwohl $\Delta^2(\hat{H})$ keine TD Größe ist, hängt es nur von TD Größen ab!

$$
\Rightarrow \quad \Gamma(\hat{H}) = \sqrt{\frac{k_B T^2 N c_V}{U^2}} = \sqrt{\frac{k_B T^2 N c_V}{N^2 u'^2}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \tag{13.4}
$$

- Für große Systeme kann die Energie (relativ) scharf werden.
- Für $T \to 0$ verschwinden auch in kleinen Systemen die Fluktuationen
- Falls c_V (formal) divergiert/sehr groß wird (passiert bei Phasenübergängen) $\Rightarrow$bei makroskopischen Systemen Fluktuationen (ggf. sogar divergent, aber in endlicher Meßzeit nicht sichtbar)

Großkanonisches Ensemble
[AKTIVATOR]
Drücken Sie analog $\Delta^2(\hat{N})$ durch $\partial\Omega/\partial\mu$ aus. (Anmerkung: $\Rightarrow\Gamma(N) \sim 1/\sqrt{N}$ findet man mit etwas längerer Rechnung)

Für die Fluktuationen von $\hat{H}$: Bei Ableiten nach β bzw. μ entstehen Terme $\hat{H} - \mu N$ bzw. $\beta\hat{N}$, aber nie $\hat{H}$ alleine
$\Rightarrow$verwende $\langle\hat{H}\rangle = \langle H - \mu N\rangle + \mu\langle\hat{N}\rangle$ und $\langle\hat{H}^2\rangle = \langle(\hat{H} - \mu\hat{N})^2\rangle + 2\mu\langle(\hat{H} - \mu\hat{N})\hat{N}\rangle + \mu^2\langle\hat{N}^2\rangle$
$\Rightarrow$wieder $\Gamma(\hat{H}) \sim 1/\sqrt{N}$