Mikrokanonisches Ensemble

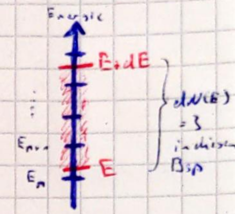
Im mikrokanonischen Ensemble werden abgeschlossene Systeme ($\rightarrow V, N$ vorgegeben und konstant) betrachtet, deren innere Energie U ebenfalls vorgegeben ist.

$\Rightarrow$ vollständig abgeschlossene Systeme

Die Dichtematrix wird (wie immer) als Diagonal angenommen und besitzt somit die Form

$$\rho = \sum_n W_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \qquad \text{mit} \qquad H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \qquad (F)$$

Aufgrund der Forderung, dass $|\psi_n\rangle$ Eigenzustand des Hamiltonian ist (F), ergibt sich die Wahrscheinlichkeit, dass ~~die~~ das System eine ~~die~~ Energie E_m im Intervall $[E, dE]$ besitzt zu



$$W_n = \begin{cases} \frac{1}{dN(E)} & , E \leq E_m \leq E + dE \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

wobei $dN(E)$ die Anzahl ~~der~~ von Energieeigenzuständen E_n im Energieintervall $[E, E+dE]$ beschreibt:

(Es wird also angenommen, dass alle Zustände im Intervall gleich wahrscheinlich sind)

Da die Entropie als $S = -k_B \operatorname{Tr}(\rho \ln \rho)$ def. ist und die Spur mit $\operatorname{Tr}(\cdot) = \sum_n \langle\psi_n| \cdot |\psi_n\rangle$ berechnet wird, ergibt sich:

$$S = -k_B \sum_n \left\langle \psi_n \middle| \sum_m |\psi_m\rangle W_m \langle\psi_m| \ln\left(|\psi_m\rangle W_m \langle\psi_m|\right) \middle| \psi_n \right\rangle$$

$\hat{}$ Durch TR darstellbar $\rightarrow$ Bras und Kets können miteinander vertauscht werden, ergeben $\langle\psi_m|\psi_m\rangle = 1$; $\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{nm}$

$$= -k_B \sum_{n,m} \underbrace{\langle\psi_n|\psi_m\rangle}_{=\delta_{nm}} W_m \left\langle\psi_m \middle| \ln\left(|\psi_m\rangle W_m \langle\psi_m|\right) \middle| \psi_n\right\rangle$$

$$= -k_B \sum_n W_n \ln W_n$$

$$= -k_B \underbrace{\sum_{n=1}^{dN}}_{\hat{=}\, dN} \frac{1}{dN} \ln \frac{1}{dN} = -k_B \ln \frac{1}{dN}$$

$$= + k_B \ln dN$$