21.11.

21.11.

$$P(e_1, \dots, e_N) \rightarrow p^{pN} (1-p)^{(1-p)N}$$

$$\equiv 2^{N J_2 [p]}$$

0 : W. p

1 : W. $1-p$

Shannon Information : $\mathcal{I}_2[p] = p \log_2 p + (1-p) \log_2 (1-p)$

typ. Nachrichten haben alle gleiche W. $2^{N \mathcal{I}_2[p]}$

$\rightarrow$ für große N gibt es höchstens $2^{-N \mathcal{I}_2[p]}$ typ. Nachrichten.

$\rightarrow$ höchstens $-N \mathcal{I}_2[p]$ Bits benötigt

- Extremfälle $p = \frac{1}{2} \Rightarrow -N \mathcal{I}_2[p] =$

$$= -N \left\{ \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} \right\} = N$$

$$p = 1 \Rightarrow -N \mathcal{I}_2[p] = 0$$

__Def:__ Die Folge $e_1, \dots, e_N$ heißt ε-typisch, falls $2^{N \mathcal{I}_2[p] - \varepsilon} \leq p(e_1, \dots, e_N) \leq 2^{N \mathcal{I}_2[p] + \varepsilon}$

__Noiseless Coding Theorem (Shannon)__

$\forall\ \varepsilon > 0,\ \delta > 0 \quad \exists\ N$ (groß) so daß die W., daß eine Folge $e_1, \dots, e_N$ ε typisch ist, mindestens $1 - \delta$ beträgt.

__Konstruktion der W-Verteilung__ P_α

$$\hat{A} \psi_\alpha = E_\alpha \psi_\alpha$$

1. sämtliche Information über die p_α in der Form

$$a_n = \langle A^{(n)} \rangle = \sum_\alpha p_\alpha A_\alpha^{(n)} \quad \langle \alpha | A^{(n)} | \alpha \rangle$$

„Nebenbedingungen", z.B. Mittelwert d. Energie sei bekannt

$$n = 1, \dots, N_M$$

$$1 = \sum_\alpha p_\alpha$$ (Normierung, formal als $A^{(0)} \equiv \hat{1}$, $a_0 = 1$)

2. Abgesehen von diesen Mittelwerten keine weitere I/O.

<u>Prinzip</u>: Wähle p_α so, daß die Shannon-Information minimal wird.

$$\Rightarrow \quad J[p_\alpha] \equiv \sum_\alpha p_\alpha \ln p_\alpha$$ muß minimiert werden, so daß die Nebenbedingungen erfüllt sind.

$$J[p_\alpha] = \sum_\alpha p_\alpha \ln p_\alpha \longrightarrow \delta J[p_\alpha] = \sum_\alpha (\ln p_\alpha + 1)\, \delta p_\alpha = 0$$

$$a_n = \sum_\alpha p_\alpha A_\alpha^{(n)} \longrightarrow 0 = \sum_\alpha A_\alpha^{(n)} \delta p_\alpha$$

Lagrange-Multiplikatoren einführen, $\lambda^{(n)}$

$$\Rightarrow \quad 0 = \sum_\alpha (\ln p_\alpha + 1)\, \delta p_\alpha + \sum_n \lambda^{(n)} \sum_\alpha A_\alpha^{(n)} \delta p_\alpha$$

$$= \sum_\alpha \left(\ln p_\alpha + 1 + \sum_n \lambda^{(n)} A_\alpha^{(n)} \right) \delta p_\alpha$$

Wegen der N_M+1 Nebenbedingungen sind nur $d - N_M - 1$ Gleichungen unabhängig ($\sum_{\alpha=1}^{d}$, $d = \dim \mathcal{H}$)

$\lambda^{(n)}$ so wählen, daß N_M+1 Koeffizienten der δp_α verschwinden. Restlichen δp_α frei wählbar.

$\Rightarrow$ Jetzt $\left(\ln p_\alpha + 1 + \sum_n \lambda^n A_\alpha^{(n)}\right) = 0$

$$\Rightarrow \quad p_\alpha = e^{-1-\lambda^{(0)} - \sum_{n=1}^{N_M} \lambda^{(n)} A_\alpha^{(n)}}$$

Normierung: $1 = \sum_\alpha p_\alpha = \sum_\alpha \dfrac{e^{-\sum_n \lambda^{(n)} A_\alpha^{(n)}}}{e^{1+\lambda^{(0)}}}$

Definition: $$Z \equiv e^{1+\lambda^{(0)}} = \sum_\alpha e^{-\sum_{n=1}^{N_M} \lambda^{(n)} A_\alpha^{(n)}}$$

„Zustandssumme"

Definition: $$p_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{n=1}^{N_M} \lambda^{(n)} A_\alpha^{(n)}}$$

verallgemeinerte kanonische Verteilung

Die kanonische Verteilung

Bekannte makroskopische Information.

Energie E

Gesamtimpuls $\underline{P}$

Gesamtdrehimpuls $\underline{L}$

Für die kanonische Verteilung:

Energie $\quad \mathcal{U} = \langle H \rangle$ als Nebenbedingung

Jetzt $N_M = 1 \Rightarrow p_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\lambda^{(1)} \hat{A}_\alpha}$

Umbenennung: $\boxed{\lambda^{(1)} = \beta}$

$$\Rightarrow p_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{A}_\alpha}, \quad \hat{A}_\alpha = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = E_\alpha$$

kan. Verteilung
$$\boxed{\begin{aligned} p_\alpha &= \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha} \\ Z &= \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha} \quad (\text{qm.}) \end{aligned}}$$

$$\begin{aligned} J[p_\alpha] &= \sum_\alpha p_\alpha \ln p_\alpha = \sum_\alpha \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha} \ln \frac{e^{-\beta E_\alpha}}{Z} \\ &= \sum_\alpha \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha} \left(-\beta E_\alpha - \ln Z \right) \\ &= -\beta \underbrace{\sum_\alpha E_\alpha p_\alpha}_{\langle \hat{A} \rangle = \mathcal{U}} - \frac{1}{Z} \underbrace{\sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha}}_{Z} \ln Z \\ &= -\beta \mathcal{U} - \ln Z \end{aligned}$$

Abhängigkeit von $\mathcal{U}$: $\boxed{\frac{\partial J}{\partial \mathcal{U}} = -\beta}$

Dimensionsanalyse: $\dim[\beta] = \text{erg}^{-1}$

Thermodynamik: $\quad \frac{\partial S}{\partial \mathcal{U}} = \frac{1}{T} \quad$ (abs. Temp.)

Def: Shannon-Entropie

$$S \equiv -k_B \sum_\alpha p_\alpha \ln p_\alpha = -k_B\, J[p_\alpha]$$

Entropie

$$\boxed{\beta = \frac{1}{k_B T}}$$

$$J = -\ln Z - \beta U \implies -k_B T \ln Z = U + k_B T J$$

$$-\ln Z = J + \beta U \;/\; \cdot k_B T \iff -k_B T \ln Z = U - TS$$

Es muß gelten: $\boxed{F = -k_B T \ln Z}$

Beispiel: $$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i}, \quad m_i \neq m_j \text{ für } i \neq j$$

$$|\alpha\rangle = |\underline{k}_1, \dots, \underline{k}_N\rangle$$

$$E_\alpha = \langle \underline{k}_1, \dots, \underline{k}_N | \hat{H} | \underline{k}_1, \dots, \underline{k}_N \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i} \equiv \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{\underline{k}_i},$$

Zustandsumme

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_\alpha} = \sum_{\underline{k}_1,\dots,\underline{k}_N} \underbrace{e^{-\beta(\varepsilon_{k_1}+\dots+\varepsilon_{k_N})}}_{\text{faktorisiert}}$$

$$= \sum_{\underline{k}_1} e^{-\beta \varepsilon_{k_1}} \sum_{\underline{k}_2} e^{-\beta \varepsilon_{k_2}} \cdots \sum_{\underline{k}_N} e^{-\beta \varepsilon_{k_N}}$$

$$= \prod_{i=1}^{N} Z_i, \quad Z_i \equiv \sum_{\underline{k}_i} e^{-\beta \varepsilon_{k_i}}$$

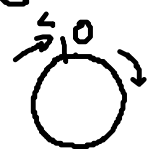
Z faktorisiert (Energie E_α ist additiv, keine Ww).

Z_i: Zustandssumme für 1 Teilchen

Kasten der Dimension d mit Volumen L^d

Wellenvektor $\underline{k} = (k_1,\dots,k_d)$

A) periodische RB: eine kart. Komp. hat Werte



$$k = \frac{2\pi}{L} n,$$

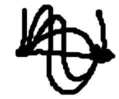
ebene Wellen $\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \psi_k(x)$ (1d)

Summen $\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L}\sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\frac{n}{L}\right) = \int_{-\infty} dx\, f(x)$

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L}\sum_{k} f\left(k=\frac{2\pi n}{L}\right) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, f(k)$$

Anpassen

B) feste RB : $k = \frac{\pi n}{L}$, $n = 1, 2, 3, \dots$



WF sind $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right)$

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L}\sum_{n=0}^{\infty} f\left(\frac{n}{L}\right) = \int_{0}^{\infty} dx\, f(x)$$

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L}\sum_{k} f\left(k=\frac{\pi n}{L}\right) = \frac{1}{\pi}\int_{0}^{\infty} dk\, f(k),$$ falls $f(k) = f(-k)$

$$= \underbrace{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, f(k)}$$

$$\varepsilon(\underline{k}) = \left(k_1^2 + k_2^2 + \dots + k_d^2\right)\frac{\hbar^2}{2m}$$

Zustandssumme für ein Teilchen faktorisiert in die d Summen für die kartes. Komponenten

$$Z_1 = \sum_{\underline{k}} e^{-\beta\varepsilon_{\underline{k}}} = \sum_{k_1} e^{-\beta\frac{\hbar^2}{2m}k_1^2} \cdots \sum_{k_d} e^{-\beta\frac{\hbar^2}{2m}k_d^2}$$

$$\overset{L\to\infty}{=} \left(\frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-\beta\frac{\hbar^2}{2m}k^2}\right)^d$$

$$\equiv \frac{L}{\lambda_i^d})$$

$$\lambda_i \equiv \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_i k_B T} \right)^{1/2}$$ thermische Wellenlänge

$\hat{=}$ de-Broglie Wellenlänge eines freien Teilchens in $d=1$ der Energie $E = \pi k_B T$.