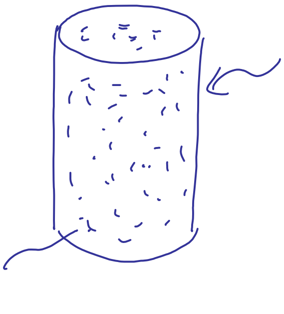
Beispiel 2): Ideales Gas:



N Teilchen im Behälter von Volumen V;

Gebiet $G \subset \mathbb{R}^3$,

$$\int_G d^3\vec{r} = V$$

<u>Zustand</u>: $x = (\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N) \in G^N \times \mathbb{R}^{3N} \equiv \Gamma$

<u>Hamiltonian</u>: $H(x) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m}$

$$\rightarrow \quad Z(E) = \int_{E-\Delta E \leq H(x) \leq E} d\Gamma \; 1 = \int_{G^N} d^{3N}\vec{r} \cdot \int_{1-\frac{\Delta E}{E} \leq \frac{\sum|\vec{p}_i|^2}{2mE} \leq 1} d^{3N}\vec{p}$$

$$= V^N (2mE)^{3N/2} \underbrace{\int_{1-\frac{\Delta E}{E} \leq \sum_i |\vec{u}_i|^2 \leq 1} d^{3N}\vec{u}}_{\text{unabhängig von } E, V\,!}$$

$\vec{p}_i = \vec{u}_i \cdot (2mE)^{1/2}$

$$\rightarrow \quad Z(E) = c \cdot V^N E^{\frac{3N}{2}}$$

$$\rightarrow \quad S(E) = k_B \ln Z(E) = N k_B \ln V + \frac{3N}{2} k_B \ln E + \tilde{c}$$

$$\rightarrow \quad \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{3N k_B}{2} \frac{1}{E}$$

d.h. $\boxed{\frac{3}{2} N k_B T = E}$ ← kalorische Zustandsgleichung des Idealen Gases

wg. $E = H(x) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m}$ folgt

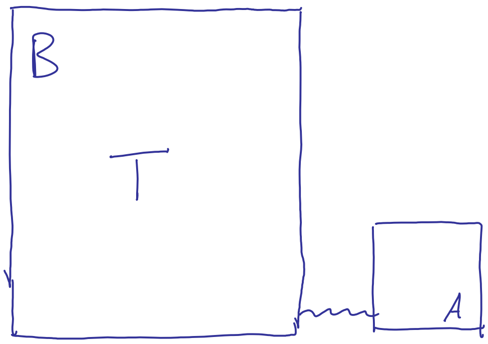
mittlere kin. Energie/Teilchen: $\overline{\frac{|\vec{p}|^2}{2m}} \equiv \frac{1}{N} \sum_i \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T$, im Übereinstimmung mit kinetischen und thermodynamischen Relationen für das Ideale Gas.

<u>Kanonische Verteilung</u> (auch <u>Boltzmann-Verteilung</u>)

<u>Ausgangspunkt</u>: System A sei im thermodyn. Gleichgewicht mit <u>Wärmebad B</u> der <u>Temperatur T</u>.

$= \left(\frac{\partial S_B}{\partial E}\right)^{-1}$

beliebig „groß" im Vergleich zu A



$A: \Gamma_A, \quad H_A(x_A)$

$B: \Gamma_B, \quad H_B(x_A)$

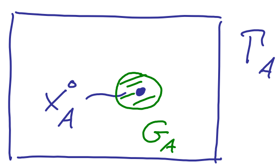
$AB: \Gamma_A \times \Gamma_B, \quad H_A(x_A) + H_B(x_B)$

$x_A = ?$

Gesamt-Energie E

$$\boxed{\text{Mit welcher Wkt liegt System } A \text{ im Zustand } x_A^\circ \text{ vor?}}$$

Wkts dichte $\varrho_T(X_A)$:



$|G_A| \to 0$

$$\varrho_T(X_A^\circ) \cdot |G_A| = \text{Wkt, dass } A \text{ in Zustand } x_A \in G_A$$

$$\stackrel{!}{=} \text{Wkt, dass } AB \text{ in Zustand } (x_A, x_B) \in G_A \times \Gamma_B$$

$$= \int_{G_A \times \Gamma_B} d\Gamma \; \varrho_E^{AB}(x_A, x_B)$$

$$= \frac{1}{Z(E)} \int_{G_A} d\Gamma_A \int_{\Gamma_B} d\Gamma_B \; \delta(H_A(x_A) + H_B(x_B) - E)$$

$$= \frac{|G_A|}{Z(E)} \underbrace{\int_{\Gamma_B} d\Gamma_B \; \delta\big(H_A(x_A^0) + H_B(x_B) - E\big)}_{\stackrel{!}{=}\; Z^B(E - H_A(x_A^0))}$$

$|G_A| \to 0+$

also $$\rho_T(x_A^0) = \frac{1}{Z(E)} \; Z^B\big(E - H_A(x_A^0)\big) \; ;$$

$$= \frac{1}{Z(E)} \exp\left(\frac{1}{k_B} \; S_B\big(E - H_A(x_A^0)\big)\right)$$

$S_B = k_B \ln Z^B$

wegen "$B \gg A$" sicher auch $E_A^0 := H_A(x_A^0) \ll E$

$$\to \quad S_B(E - E_A^0) = S_B(E) - \frac{\partial S_B}{\partial E} \cdot E_A^0 + \cancel{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_B}{\partial E^2} E_A^{0\,2}} + \dots$$

$$= S_B(E) - \frac{1}{T} \cdot E_A^0$$

$\frac{\partial S_B}{\partial E} = \frac{1}{T}$!

d.h. $$\rho_T(x_A^0) = \underbrace{\frac{e^{S_B(E)}}{Z(E)}}_{} \; e^{-\frac{H_A(x_A^0)}{k_B T}}$$

bestimmt durch $\int_{\Gamma_A} \rho_T(x_A)\, d\Gamma_A \stackrel{!}{=} 1$

→ Kanonische Verteilung (eines Systems mit Phasenraum Γ, Hamiltonian H) der Temperatur T:

$$\boxed{\rho_T(x) = \frac{1}{Z(T)} \; e^{-\frac{H(x)}{k_B T}}}$$

mit kanonischer Zustandssumme

$$\boxed{Z(T) = \int d\Gamma \; e^{-H(x)/k_B T}}$$

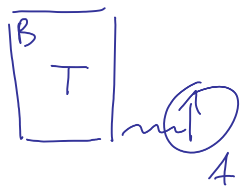
falls Phasenraum diskret:

$$\varrho_T(x_i) = \frac{1}{Z(T)} \, e^{-H(x_i)/k_B T}$$

$$Z(Z) = \sum_i e^{-H(x_i)/k_B T}$$

Beispiel: ein Ising-Spin bei Temperatur T im ext. Magnetfeld B:

$S = \pm 1 \;\hat{=}\; \uparrow, \downarrow$



$$H(S) = \mu_0 B S$$

$$\rightarrow \quad Z(T) = \sum_{S=\pm 1} e^{-\mu_0 B S/kT}$$

$$= e^{+\mu_0 B/kT} + e^{-\mu_0 B/kT}$$

$$= 2 \cosh \frac{\mu_0 B}{kT}$$

$$\rightarrow \quad \varrho_T(S) = \frac{e^{-\mu_0 B S/kT}}{2 \cosh \mu_0 B/kT}$$

$$\rightarrow \quad m = (-1)\, \varrho_T(-1) + (+1)\, \varrho_T(+1)$$

$$= \frac{1}{2 \cosh \frac{\mu_0 B}{kT}} \left(- e^{\mu_0 B/kT} + e^{-\mu_0 B/kT} \right)$$

$$= - \frac{\sinh \mu_0 B/kT}{\cosh \mu_0 B/kT} = - \tanh \frac{\mu_0 B}{kT} \quad \checkmark$$