

Wiederholung

Thermodyn.

$$T_A \stackrel{!}{=} T_B$$

$\Leftrightarrow$ A und B
im Gleichgew.

Stat. Phys.

$$\beta_A \stackrel{!}{=} \beta_B$$

$$\beta = (\ln Z(E))'$$

$\hookrightarrow$ Def:

• $\frac{1}{T(E)} = k \frac{\partial}{\partial E} \ln Z(E)$ Temp.

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

• $\beta = \frac{\partial}{\partial E} \ln Z(E)$ inv. Temp.

• $S(E) = k \ln Z(E)$ Entropie

$\hookrightarrow$

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

$$Z(E) = e^{\frac{1}{k} S(E)}$$

Beispiele $\leadsto$

Ideales Gas: • $Z(E) = \propto V^N E^{3/2}$

$$\rightarrow \frac{1}{T} = k \frac{\partial}{\partial E} \ln Z(E) = \frac{3}{2} \frac{Nk}{E}$$

$$\rightarrow \overline{E}_{kin} = \frac{E}{N} = \frac{3}{2} kT \quad \checkmark$$

Paramagnet: • $Z(E) = \binom{N}{N_+(E)} = e^{N h(N_+/N)}$

$$\rightarrow S(E) = Nk \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{E}{\mu_0 B N} \right)$$

$$\rightarrow \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{k}{\mu_0 B} \ln' \left(\frac{1}{2} + \frac{E}{\mu_0 B N} \right)$$

$$\rightarrow \frac{\mu_0 B}{kT} = \ln \left(\frac{1-m}{1+m} \right)$$

$$E = \mu_0 B N \frac{m}{2}$$

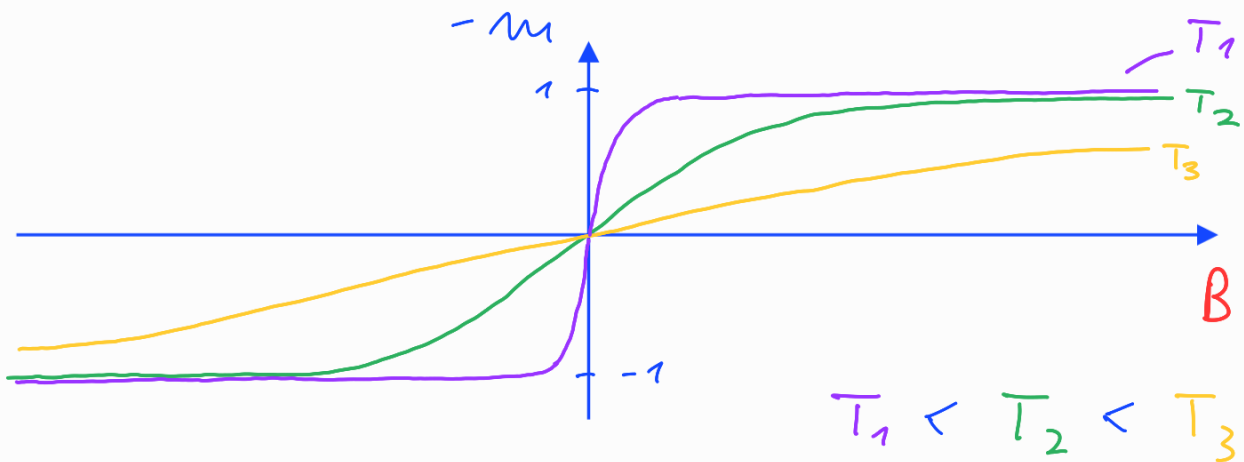
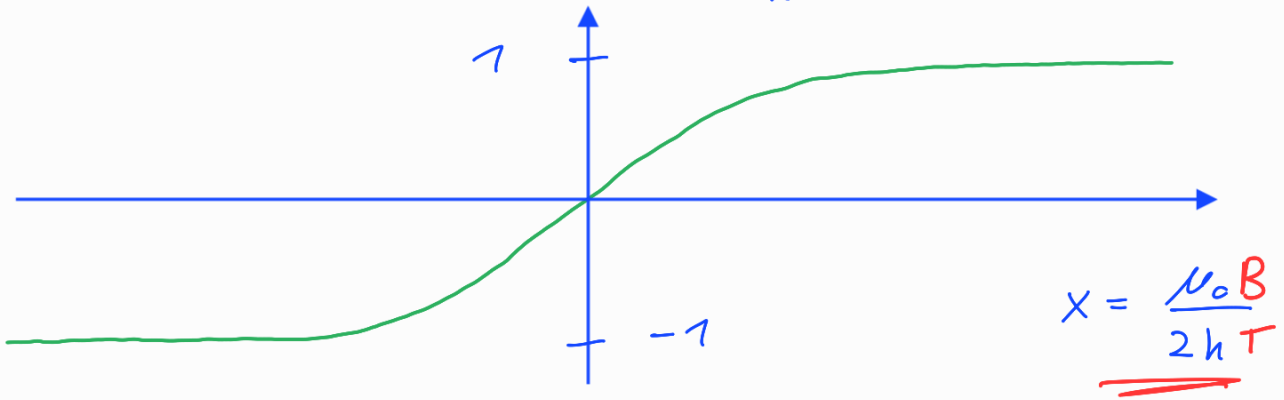
$$\rightarrow m(B, T) = - \tanh \left(\frac{\mu B}{2kT} \right)$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\ell=1}^N s_{\ell}, \quad \tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x}$$

^

→

$$-m = \tanh \frac{\mu_0 B}{2kT}$$



Näherung für $\mu_0 B \ll kT$:

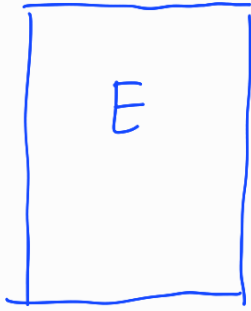
$$m(B) = - \frac{\mu_0}{2k} \cdot \frac{B}{T} \quad (\text{Curie-Gesetz})$$

$$(|x| \ll 1: \tanh x \approx x)$$

Thermodynamisches Gleichgewicht bei vorgegebener

Temperatur: kanonische Verteilung

bisher



isoliertes System $\rightarrow$ konstante Energie E

$$\rightarrow \Omega(E) \rightarrow Z(E) \rightarrow S(E)$$

$$\rightarrow \langle A \rangle_E$$

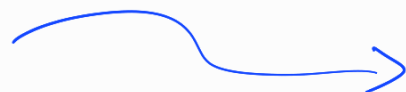
$$\rightarrow \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \rightarrow E(T)$$

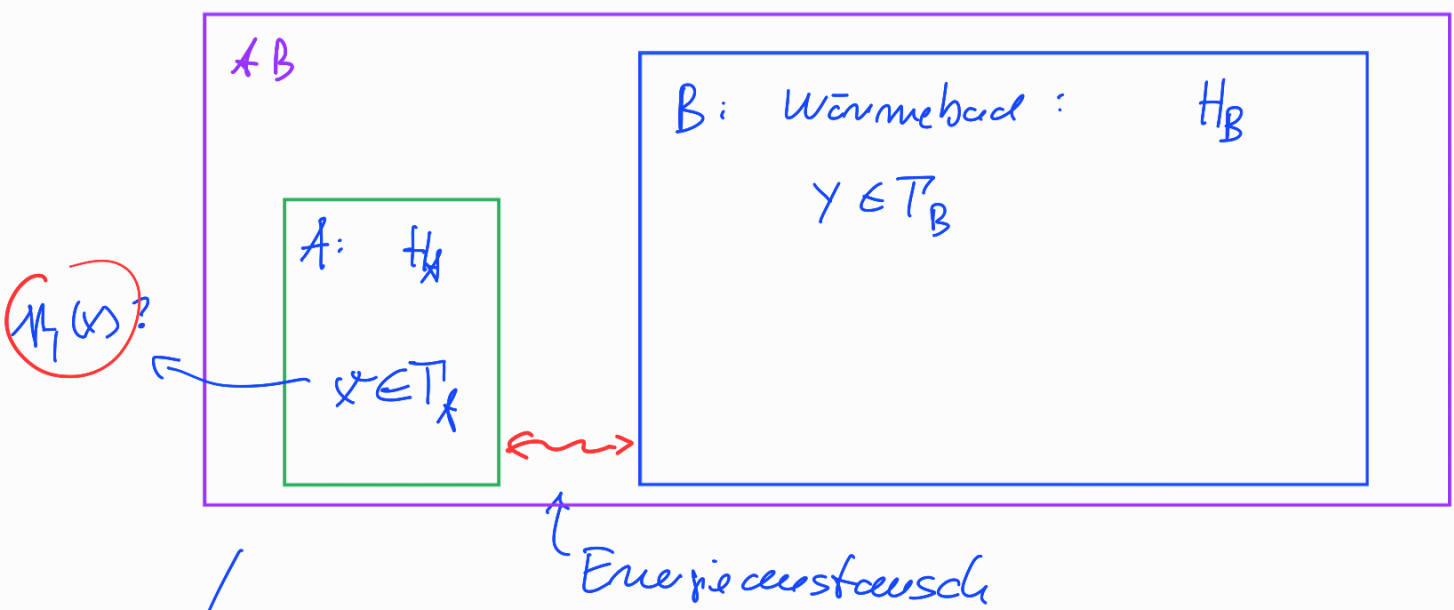
$$\langle A \rangle_T \stackrel{!}{=} \langle A \rangle_{E(T)}$$

Ziel: einfache Berechnung für Gleichgewichtswert
einer Größe bei gg. Temperatur!

Idee: bringe System ^{$\nearrow A$} in thermischen Kontakt
zu einem Wärmebad vorgegebener
Temperatur T _{$\searrow B$}

$\rightarrow$ beschreibe AB mikrokanonisch!





→ konstante Gesamtenergie $E = E_B + E_A$

" $B \gg A$ " : $E_A \ll E$

→ $E_B \simeq E$ so, daß $T_B \stackrel{!}{=} T_{\parallel}$

Mit welcher Wkt. $\mu_T(x)$ liegt im System A Mikrozustand $x \in T_A$ vor?

→ Gleichgewichtswert einer Größe:

$$\langle A \rangle_T = \begin{cases} \int_{T_A} dx A(x) \mu_T(x) \\ \sum_{x \in T_A} A(x) \mu_T(x) \end{cases}$$

Bestimmung von $\mu_T(x)$:

$$\mu_T(x) = \frac{\text{Anzahl aller Mikrozust. von B s.d. } E_B + H_A(x) = E}{\text{Anzahl aller Mikrozust. von AB mit Energie } E}$$

$$= \frac{\text{Anzahl Mikrozust. in } \Omega_B(E - H_A(x))}{\text{Anzahl Mikrozust. in } \Omega_{AB}(E)}$$

$$= \frac{Z_B(E - H_A(x))}{Z_{AB}(E)}$$

!
 meiste $H_A(x) \ll E$
 (nach Voraussetzung)

Nebenrechnung:

$$\underline{Z_B(E - H_A(x))} = \exp\left(\frac{1}{k} S_B(E - H_A(x))\right) = \underline{Z_B(E)} e^{\frac{-H_A(x)}{kT}}$$

$S = k \ln Z$
 $Z = e^{S/k}$

$$\underline{H_A(x) \ll E}$$

Taylor-Entwicklung:

$$S_B(E - H_A(x)) = S_B(E) - \boxed{\frac{\partial S_B(E)}{\partial E}} H_A(x) + \cancel{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_B}{\partial E^2} H_A^2(x) + \dots}$$

$$\simeq S_B(E) - \frac{1}{T} H_A(x) \quad (*)$$

$$\leadsto n_T(x) = \frac{Z_B(t)}{Z_{AB}(E)} e^{-H(x)/kT}$$

$\hookrightarrow e$: bestimmt durch

Normierung der Wkt. $n_T(x)$:

$$\int_{\Gamma_A} dx \, n_T(x) \stackrel{!}{=} 1 \quad / \quad \sum_x n_T(x) \stackrel{!}{=} 1$$

Seh.: Kanonische Verteilung

(a) Im t.d. Gleichgewicht der Temperatur T

liegt ein Mikrozustand $x \in \Gamma$ eines Systems

mit Hamiltonfkt H mit der Wkt

$$n_T(x) = \frac{1}{Z(T)} e^{-H(x)/kT}$$

Kanonische

Wkt-verteilung

vor.

$$Z(T) = \int_{\Gamma} dx \, e^{-H(x)/kT}$$

Kanonische

Zustandssumme

→ Gleichgewichts-~~wert~~ einer Größe $A(x)$:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_T &= \int_{\Gamma} dx \, \rho_T(x) A(x) \\ &= \frac{1}{Z(T)} \int_{\Gamma} dx \, A(x) e^{-H(x)/kT}\end{aligned}$$

kanonische
Erwartungswert
der Größe A

(b) Energieeigenzust. $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$ mit
Eigenenergien $E_0, E_1, E_2, \dots$

$|\varphi_i\rangle$ liegt bei Temperatur T mit Wkt.

$$\rho_i = \frac{1}{Z(T)} e^{-E_i/kT}$$

$$Z(T) = \sum_i e^{-E_i/kT}$$

$$\langle \hat{A} \rangle_T = \sum_i \rho_i \langle \hat{A} \rangle_{|\varphi_i\rangle}$$

Bemerkungen:

- kanonische Verteilung gilt auch für mikroskopische Systeme

- $e^{-H(x)/kT}$: "Boltzmann-Faktor"

- $kT = \frac{1}{\beta}$:

$$p(x) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H(x)}$$

$$Z(\beta) = \int_{\Gamma} dx e^{-\beta H(x)}$$

Beispiele:

1) Paramagnet im B-Feld,

$$N \text{ Spins} = N \times (\underline{1 \times \text{Spin}})$$

1 Spin: Energieeigenzust. $| -1 \rangle, | +1 \rangle$

$\uparrow B \hat{z}$

Energieeigenwerte $E_{-1} = -\frac{\mu_0 B}{2}$; $E_{+1} = +\frac{\mu_0 B}{2}$

$\rightarrow$ kan. Zust. s. : $Z(T) = e^{+\mu_0 B / 2kT} + e^{-\mu_0 B / 2kT}$

$$= 2 \cosh\left(\frac{\mu_0 B}{2kT}\right)$$

harmonischen E.W. der Dimensionen lösen

Magnetisierung: $m \cdot \quad | +1 \rangle \rightarrow m = +1$

$| -1 \rangle \rightarrow m = -1$

$$((\langle \hat{m} \rangle_{H_D} = \pm 1))$$

$$\rightarrow \langle m \rangle_T = \frac{1}{Z(T)} \left((-1) e^{+\frac{\mu_0 B}{2kT}} + (+1) e^{-\frac{\mu_0 B}{2kT}} \right)$$

$$= \frac{1}{Z(T)} 2 \sinh \left(- \frac{\mu_0 B}{2kT} \right)$$

$$= - \tanh \left(\frac{\mu_0 B}{2kT} \right)$$

(genau wie mikromagnetisch!)