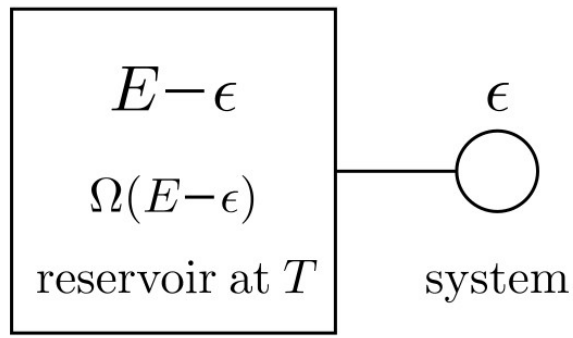
جلسه هشتم

مکانیک آماری

محمدرضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه قم
اسفند ۹۸

آنسامبل کانونیک

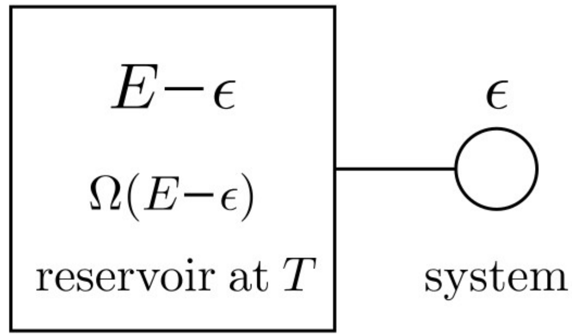
* دو سیستم جفت شده‌ای را مانند شکل زیر در نظر بگیرید که می‌توانند مبادله انرژی کنند.



* یکی از دو سیستم را منبع گرمایی می‌نامیم که می‌توان از آن انرژی بسیار زیادی دریافت کرد ولی با این حال منبع در همان دما باقی بماند. سیستم دیگر که کوچک است، به عنوان سیستم تحت بررسی در نظر می‌گیریم.

* منبع انرژی $E-\epsilon$ و سیستم انرژی ϵ خواهند گرفت. این وضعیت که سیستمی در تماس حرارتی با یک منبع بزرگ است به عنوان **آنسامبل کانونی** شناخته می شود.

آنسامبل کانونیک

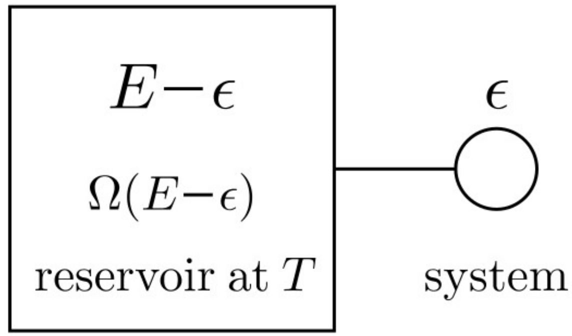


* احتمال اینکه انرژی سیستم ϵ باشد متناسب با **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس منبع** ضربدر **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس سیستم** است.

$$P(\epsilon) \propto \Omega(E-\epsilon) \times 1$$

* چون تعداد حالتهای در دسترس منبع بیشتر است. احتمال اینکه منبع مقدار انرژی $E-\epsilon$ را پذیرا باشد بیشتر از احتمال اینکه سیستم مقدار انرژی ϵ را پذیرا باشد.

آنسامبل کانونیک



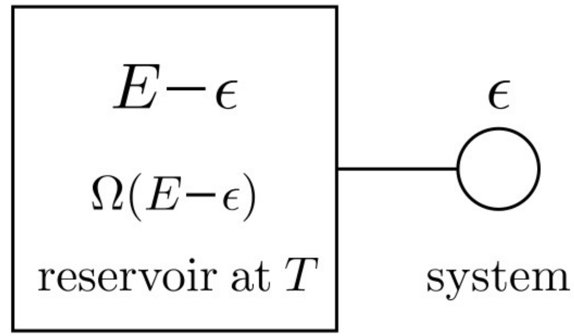
* احتمال اینکه انرژی سیستم ϵ باشد متناسب با **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس منبع** ضربدر **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس سیستم** است.

$$P(\epsilon) \propto \Omega(E-\epsilon) \times 1$$

* از آنجایی که $E \gg \epsilon$ است، می‌توان عبارت $\Omega(E-\epsilon)$ را برحسب ϵ بصورت زیر بسط داد،

$$\ln\Omega(E-\epsilon) = \ln\Omega(E) - \frac{d}{dE}\ln\Omega(E)\epsilon + \cdots$$

آنسامبل کانونیک



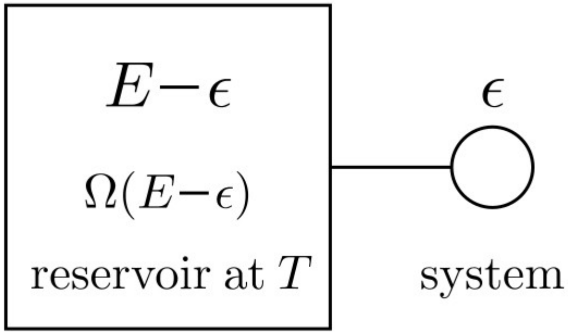
* احتمال اینکه انرژی سیستم ϵ باشد متناسب با **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس منبع** ضربدر **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس سیستم** است.

$$P(\epsilon) \propto \Omega(E-\epsilon) \times 1$$

* چون $\frac{d}{dE} \ln \Omega(E) = \frac{1}{k_B T}$

$$\ln \Omega(E-\epsilon) = \ln \Omega(E) - \frac{1}{k_B T}\epsilon + \cdots$$

آنسامبل کانونیک



* احتمال اینکه انرژی سیستم ϵ باشد متناسب با **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس منبع** ضربدر **تعداد میکروحالتهای قابل دسترس سیستم** است.

$$P(\epsilon) \propto \Omega(E-\epsilon) \times 1$$

$$\ln\Omega(E-\epsilon) = \ln\Omega(E) - \frac{1}{k_B T}\epsilon + \cdots$$

$$\ln P(\epsilon) \propto \text{const.} - \frac{1}{k_B T}\epsilon \Rightarrow P(\epsilon) \propto e^{-\epsilon/k_B T}$$

محمدرضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

$$\epsilon_1 : \quad P(\epsilon_1) \propto e^{-\epsilon_1/k_BT} \Longrightarrow P(\epsilon_1) = \frac{e^{-\epsilon_1/k_BT}}{\sum_i e^{-\epsilon_i/k_BT}}$$

$$\epsilon_2 : \quad P(\epsilon_2) \propto e^{-\epsilon_2/k_BT} \Longrightarrow P(\epsilon_2) = \frac{e^{-\epsilon_2/k_BT}}{\sum_i e^{-\epsilon_i/k_BT}}$$

$$\vdots$$

$$\epsilon_k : \quad P(\epsilon_k) \propto e^{-\epsilon_k/k_BT} \Longrightarrow P(\epsilon_k) = \frac{e^{-\epsilon_k/k_BT}}{\sum_i e^{-\epsilon_i/k_BT}}$$

$$\vdots$$

$$\sum_i e^{-\epsilon_i/k_BT} = e^{-\epsilon_1/k_BT} + e^{-\epsilon_2/k_BT} + \cdots + e^{-\epsilon_n/k_BT} + \cdots$$

آنسامبل کانونیک

* در اینجا N سیستم یکسان را در نظر می‌گیریم که انرژی E را بین آن‌ها تقسیم می‌شود.

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &: n_1 \\ \epsilon_2 &: n_2 \\ &\vdots \\ \epsilon_k &: n_k \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\sum_k n_k = N$$

$$\sum_k \epsilon_k n_k = NE$$

تعداد راههایی که می‌شود، انرژي E را بین N سیستم تقسیم کرد

$$\Omega = \frac{N!}{n_1!n_2!\cdots n_k!\cdots}$$

* محتمل‌ترین شیوه توزیع، شیوه‌ای خواهد بود که Ω برای آن حداکثر مقدار خود را داشته باشد.

آنسامبل کانونیک

$$\Omega = \frac{N!}{n_1!n_2!\cdots n_k!\cdots}$$

$$\ln\Omega = \ln N! - \ln n_1! - \ln n_2! - \cdots - \ln n_k! - \cdots$$

$$\ln\Omega = \ln N! - \sum_k \ln n_k!$$

$$\ln\Omega = N\ln N - \cancel{N} - \sum_k n_k \ln n_k + \cancel{\sum_k n_k}$$

$$\ln\Omega = N\ln N - \sum_k n_k \ln n_k$$

آنسامبل کانونیک

$$\begin{cases} \ln \Omega = N \ln N - \sum_k n_k \ln n_k \\ \sum_k n_k = N, \quad \sum_k \epsilon_k n_k = NE \end{cases}$$

$$\mathcal{L} = \ln \Omega + \alpha \left(N - \sum_k n_k \right) + \beta \left(EN - \sum_k \epsilon_k n_k \right)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_l} = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_l} = -\sum_k \left(\frac{\partial n_k}{\partial n_l} \right) \ln n_k - \sum_k \left(\frac{\partial n_k}{\partial n_l} \right) - \alpha \sum_k \left(\frac{\partial n_k}{\partial n_l} \right) - \beta \sum_k \epsilon_k \left(\frac{\partial n_k}{\partial n_l} \right) = 0$$

ضرایب لاگرانژ

آنسامبل کانونیک

$$\begin{cases} \ln\Omega = N\ln N - \sum_k n_k \ln n_k \\ \sum_k n_k = N, \quad \sum_k \epsilon_k n_k = NE \end{cases}$$

$$\mathcal{L} = \ln\Omega + \alpha\left(N - \sum_k n_k\right) + \beta\left(NE - \sum_k \epsilon_k n_k\right)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial n_l} = \delta_{kl}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_l} = -\sum_k \delta_{kl}\ln n_k - \sum_k \delta_{kl} - \alpha\sum_k \delta_{kl} - \beta\sum_k \epsilon_k \delta_{kl} = 0$$

آنسامبل کانونیک

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_l} = -\sum_k \delta_{kl} \ln n_k - \sum_k \delta_{kl} - \alpha \sum_k \delta_{kl} - \beta \sum_k \epsilon_k \delta_{kl} = 0$$

$$-\ln n_l - 1 - \alpha - \beta \epsilon_l = 0 \Rightarrow n_l = C e^{-\beta \epsilon_l}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\sum_k n_k = N$$

$$C \sum_k e^{-\beta \epsilon_k} = N \Rightarrow C = \frac{N}{\sum_k e^{-\beta \epsilon_k}}$$

$$n_l = N \frac{e^{-\beta \epsilon_l}}{\sum_k e^{-\beta \epsilon_k}} \Rightarrow \boxed{p_l = \frac{n_l}{N} = \frac{e^{-\beta \epsilon_l}}{\sum_k e^{-\beta \epsilon_k}}}$$

آنسامبل کانونیک

$$p_l = \frac{n_l}{N} = \frac{e^{-\beta\epsilon_l}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}$$

$$NE = \sum_k \epsilon_k n_k$$

$$\langle E\rangle = \sum_k \epsilon_k \frac{n_k}{N} = \sum_k \epsilon_k p_k$$

$$\boxed{\langle E\rangle = \frac{\sum_k \epsilon_k e^{-\beta\epsilon_k}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}}$$

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش

$$p_l = \frac{e^{-\beta\epsilon_l}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_k \epsilon_k e^{-\beta\epsilon_k}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}$$

$$\boxed{Z = \sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}$$

$$\langle E\rangle = \frac{\sum_k \epsilon_k e^{-\beta\epsilon_k}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}} = \frac{1}{Z}\sum_k \epsilon_k e^{-\beta\epsilon_k} = \frac{1}{Z}\left(-\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)$$

$$\boxed{\langle E\rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta}}$$

آنسامبل کانونیک

$$Z = \sum_k e^{-\beta \epsilon_k}$$

$$\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta}\langle E \rangle = -\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = -\frac{\partial}{\partial \beta}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right) = \frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)^2 - \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

$$\frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)^2 = \left[\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)\right]^2 = \langle E \rangle^2$$

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

$$Z=\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}$$

$$\sigma_E^2=\langle E^2\rangle-\langle E\rangle^2$$

$$\langle E\rangle=-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}=-\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta}$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle=-\frac{\partial^2\ln Z}{\partial\beta^2}=-\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)=\langle E\rangle^2-\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}$$

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}=\frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}=\frac{1}{Z}\sum_k\epsilon_k^2 e^{-\beta\epsilon_k}=\frac{\sum_k\epsilon_k^2 e^{-\beta\epsilon_k}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}=\langle E^2\rangle$$

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش

$$Z = \sum_k e^{-\beta\epsilon_k}$$

$$\sigma_E^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2$$

$$\langle E\rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta}$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = -\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial\beta^2} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right) = \langle E\rangle^2 - \langle E^2\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = \langle E\rangle^2 - \langle E^2\rangle = -\sigma_E^2 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = -\sigma_E^2, \quad \boxed{\sigma_E^2 = \frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln Z}$$

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش

$$Z = \sum_k e^{-\beta\epsilon_k}$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = -\sigma_E^2, \quad C_V = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = \frac{\partial T}{\partial\beta}\frac{\partial}{\partial T}\langle E\rangle = -\frac{1}{k_B\beta^2}C_V$$

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = -\sigma_E^2 \\ \frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = -\frac{1}{k_B\beta^2}C_V \end{array}\right. \Longrightarrow \boxed{\sigma_E^2 = \frac{1}{k_B\beta^2}C_V = k_B T^2 C_V}$$

آنسامبل کانونیک

$$Z = \sum_k e^{-\beta \epsilon_k}$$

$$F = U - TS, \quad U = \langle E \rangle$$

$$\mathrm{d}F = \mathrm{d}U + T\mathrm{d}S + S\mathrm{d}T$$

* قانون اول ترمودینامیک

$$\mathrm{d}U = -p\mathrm{d}V + T\mathrm{d}S$$

$$\mathrm{d}F = -p\mathrm{d}V + T\mathrm{d}S + S\mathrm{d}T$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$$

آنسامبل کانونیک

* عبارت گیبس برای آنتروپی

$$\boxed{S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i}$$

$$p_i = \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}} = \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{Z}$$

$$S = -k_B \sum_i \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{Z} \ln\left(\frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{Z}\right) = -k_B \sum_i \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{Z}\left(-\beta\epsilon_i - \ln Z\right)$$

$$S = k_B\beta\frac{1}{Z}\sum_i \epsilon_i e^{-\beta\epsilon_i} + k_B\frac{\ln Z}{Z}\sum_i e^{-\beta\epsilon_i} = \frac{U}{T} + k_B \ln Z$$

آنسامبل کانونیک

* عبارت گیبس برای آنتروپی

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

$$p_i = \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}} = \frac{e^{-\beta\epsilon_i}}{Z}$$

$$\xRightarrow{\times T} \quad ST = U + k_B T \ln Z \Rightarrow -k_B T \ln Z = U - TS$$

$$F = U - TS, \quad U = \langle E \rangle$$

$$\boxed{F = -k_B T \ln Z, \quad Z = e^{-\beta F}}$$

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

*** قانون همپاری**

انرژی جنبشی $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

انرژی پتانسیل فنر $E = \frac{1}{2}kx^2$ $\Longrightarrow$ $\langle E \rangle = \frac{1}{2}k_B T$

انرژی دورانی مولکول دو اتمی $E = \frac{1}{2}\mathbb{I}\omega^2 = \frac{L^2}{2\mathbb{I}}$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

انرژی جنبشی $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$: $\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} \mathrm{d}p}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} \mathrm{d}p}$

انرژی پتانسیل فنر $E = \frac{1}{2}kx^2$ $\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2}kx^2 e^{-\frac{\beta kx^2}{2}} \mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta kx^2}{2}} \mathrm{d}x}$

انرژی دورانی مولکول دو اتمی $E = \frac{1}{2}\mathbb{I}\omega^2 = \frac{L^2}{2\mathbb{I}}$ $\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{L^2}{2\mathbb{I}} e^{-\frac{\beta L^2}{2\mathbb{I}}} \mathrm{d}L}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta L^2}{2\mathbb{I}}} \mathrm{d}L}$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha y^2}\,\mathrm{d}y = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-\alpha y^2}\,\mathrm{d}y = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} = \sqrt{2m\pi k_B T}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \frac{1}{2m}\frac{1}{2}(2mk_B T)\sqrt{2\pi m k_B T}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \frac{1}{2}k_B T\sqrt{2\pi m k_B T}$$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} = \sqrt{2m\pi k_B T}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \frac{1}{2} k_B T \sqrt{2\pi m k_B T}$$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p} = \frac{\frac{1}{2} k_B T \sqrt{2\pi m k_B T}}{\sqrt{2\pi m k_B T}} = \frac{1}{2} k_B T$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

آنسامبل کانونیک

* **قانون همپاری**

انرژی جنبشی $E=\frac{1}{2}mv^2=\frac{p^2}{2m}:$ $\langle E\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p^2}{2m}e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p}=\frac{1}{2}k_BT$

انرژی پتانسیل فنر $E=\frac{1}{2}kx^2$ $\langle E\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}kx^2e^{-\frac{\beta kx^2}{2}}\,\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\beta kx^2}{2}}\,\mathrm{d}x}=\frac{1}{2}k_BT$

انرژی دورانی مولکول دو اتمی $E=\frac{1}{2}\mathbb{I}\omega^2=\frac{L^2}{2\mathbb{I}}$ $\langle E\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{L^2}{2\mathbb{I}}e^{-\frac{\beta L^2}{2\mathbb{I}}}\,\mathrm{d}L}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\beta L^2}{2\mathbb{I}}}\,\mathrm{d}L}=\frac{1}{2}k_BT$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$E = \sum_{i}^{n} \alpha_i x_i^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2) e^{-\beta(\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2)} \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n}{\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2)} \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n}$$

$$\langle E \rangle = \alpha_1 \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_1^2 e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right) \cdots \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right) \cdots \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}$$

$$+ \cdots + \alpha_n \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right) \cdots \left(\int_{-\infty}^{\infty} x_n^2 e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right) \cdots \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}$$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$E = \sum_{i}^{n} \alpha_i x_i^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2) e^{-\beta(\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2)} \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n}{\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2)} \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n}$$

$$\langle E \rangle = \alpha_1 \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_1^2 e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right) \cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)} \cdots \cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right) \cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)} \cdots \cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}}$$

$$+ \cdots + \alpha_n \frac{\cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)} \cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)} \cdots \left(\int_{-\infty}^{\infty} x_n^2 e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}{\cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)} \cancel{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)} \cdots \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}$$

محمدرضا مظفری

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$E = \sum_i^n \alpha_i x_i^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2) e^{-\beta(\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2)} \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n}{\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(\alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_n x_n^2)} \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_n}$$

$$\langle E \rangle = \alpha_1 \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_1^2 e^{-\beta \alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)} + \alpha_2 \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_2^2 e^{-\beta \alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)} + \cdots$$

$$\cdots + \alpha_n \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_n^2 e^{-\beta \alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}$$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$E = \sum_{i}^{n} \alpha_i x_i^2$$

$$\langle E \rangle = \alpha_1 \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_1^2 e^{-\beta \alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha_1 x_1^2} \mathrm{d}x_1\right)} + \alpha_2 \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_2^2 e^{-\beta \alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha_2 x_2^2} \mathrm{d}x_2\right)} + \cdots$$

$$\cdots + \alpha_n \frac{\left(\int_{-\infty}^{\infty} x_n^2 e^{-\beta \alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \alpha_n x_n^2} \mathrm{d}x_n\right)}$$

$$\langle E \rangle = \alpha_1 \langle x_1^2 \rangle + \alpha_2 \langle x_2^2 \rangle + \cdots + \alpha_n \langle x_n^2 \rangle = \langle \alpha_1 x_1^2 \rangle + \langle \alpha_2 x_2^2 \rangle + \cdots + \langle \alpha_n x_n^2 \rangle$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k_B T + \frac{1}{2} k_B T + \cdots + \frac{1}{2} k_B T = \frac{n}{2} k_B T$$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$E = \sum_{i}^{n} \alpha_i x_i^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} k_B T + \frac{1}{2} k_B T + \cdots + \frac{1}{2} k_B T = \frac{n}{2} k_B T$$

$$\langle E \rangle = n \frac{1}{2} k_B T \Rightarrow \langle E \rangle \propto T$$

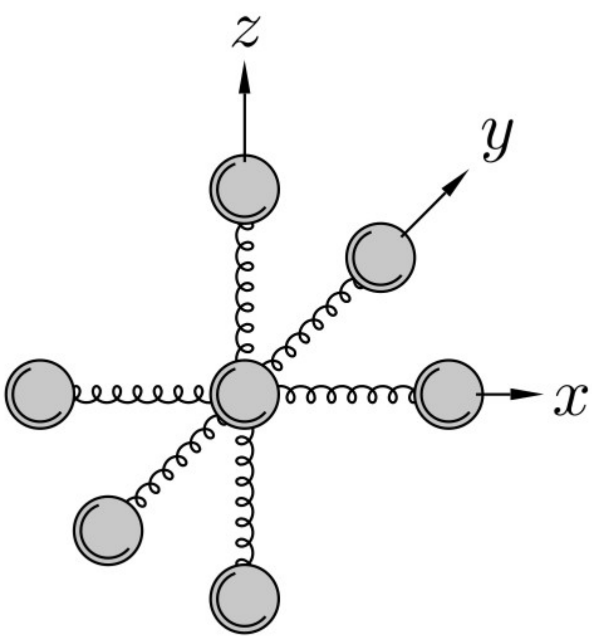
$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = n \frac{1}{2} k_B$$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}k_BT + \frac{1}{2}k_BT = k_BT$$



$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}ky^2 + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}kz^2$$

$$\langle E \rangle = k_BT + k_BT + k_BT = 3k_BT$$

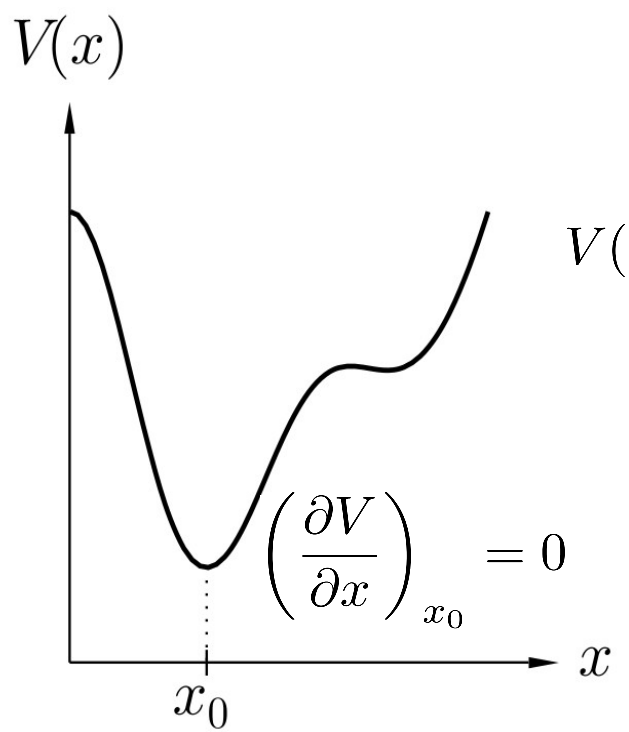
در یک جامد با N سلول

$$\langle E \rangle = Nk_BT + Nk_BT + Nk_BT = 3Nk_BT$$

آنسامبل کانونیک

* قانون همپاری بطور کلی فقط برای دماهای بالا معتبر است بطوریکه انرژی حرارتی بزرگ‌تر از فاصله انرژی بین ترازهای انرژی است. در این حالت طبیعت کوانتومی طیف انرژی صرفه‌نظر می‌شود.

* متغییر انرژی در قانون همپاری باید از مرتبه‌ی دو باشد.



$$V(x) = V(x_0) + \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_{x_0} (x - x_0)^2 + \cdots$$

تقریب هارمونیک : $\quad V(x) = \text{const.} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right)_{x_0} (x - x_0)^2 + \cdots$

جلسه نهم

مکانیک آماری

محمدرضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه قم
اسفند ۹۸

آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالته

$$\Delta$$

$$0$$

$$Z = 1 + e^{-\beta\Delta}$$

$$Z = e^{-\beta F} \Rightarrow F = -k_B T \ln Z$$

$$F = -k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta})$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = k_B \ln(1 + e^{-\beta\Delta}) + \frac{\Delta}{T}\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

$$\xrightarrow{\times T} \quad TS = k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta}) + \Delta\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالته

Δ

0

$$F = -k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta})$$

$$TS = k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta}) + \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

$$TS = -F + \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}, \quad TS = -F + U$$

$$U = \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B \left(\frac{\Delta}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{-\beta\Delta}}{(1 + e^{-\beta\Delta})^2}$$

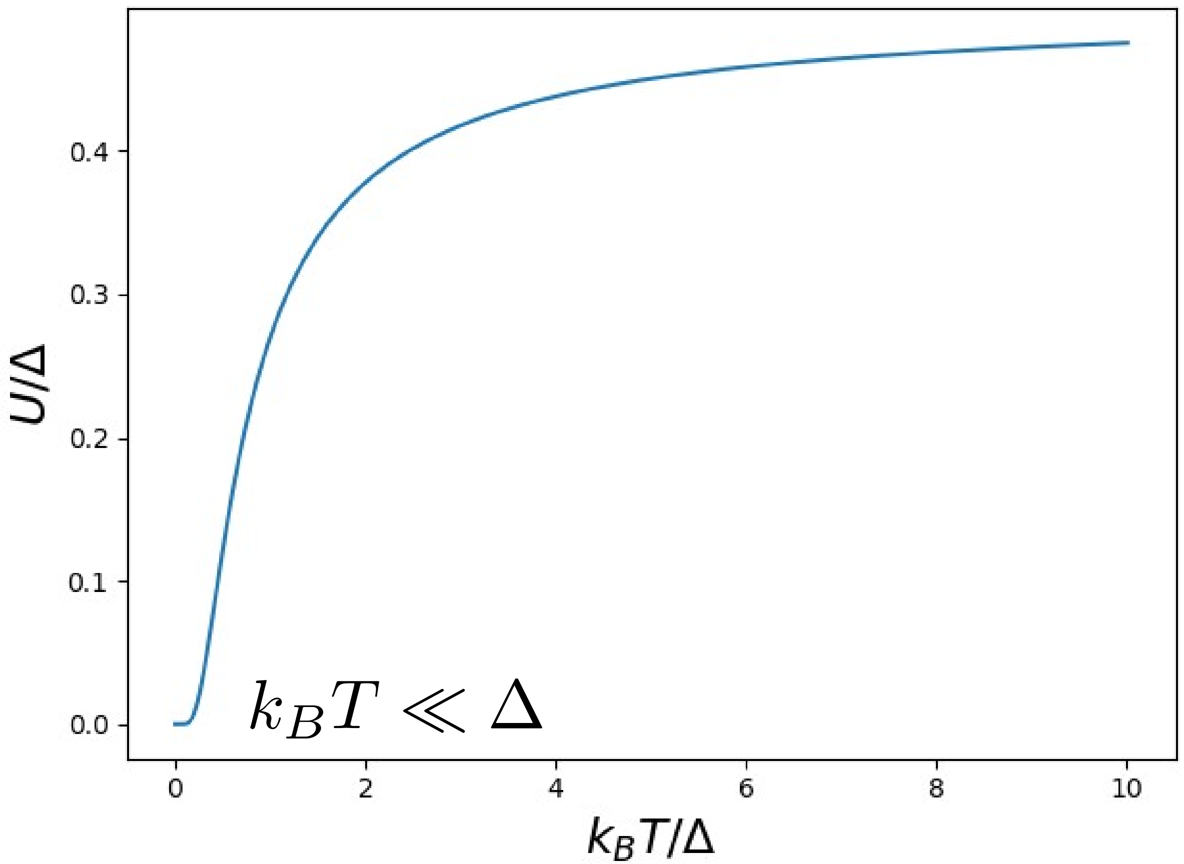
آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالته

Δ

0

$k_B T \gg \Delta$



آنسامبل کانونیک

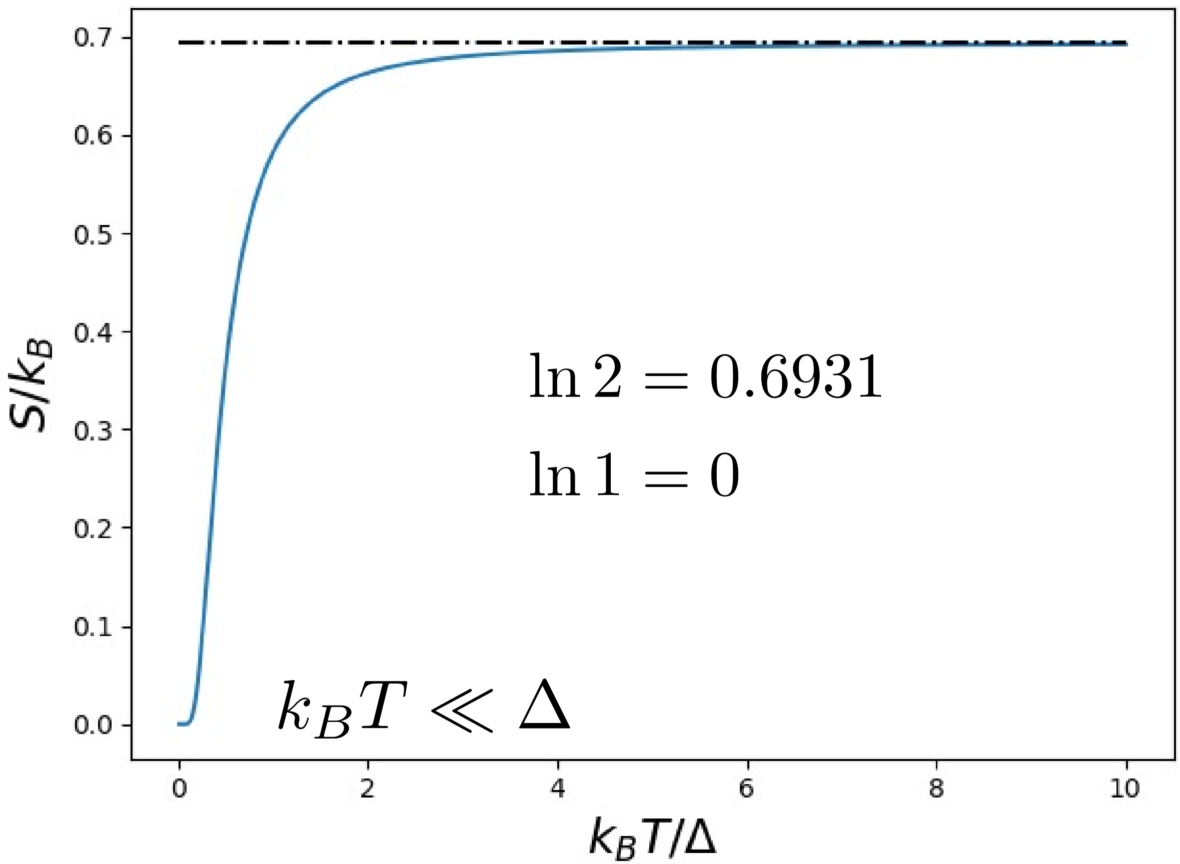
* سیستم دو حالته

Δ

0

$$S/k_B = \ln \Omega$$

$k_B T \gg \Delta$



$$\ln 2 = 0.6931$$

$$\ln 1 = 0$$

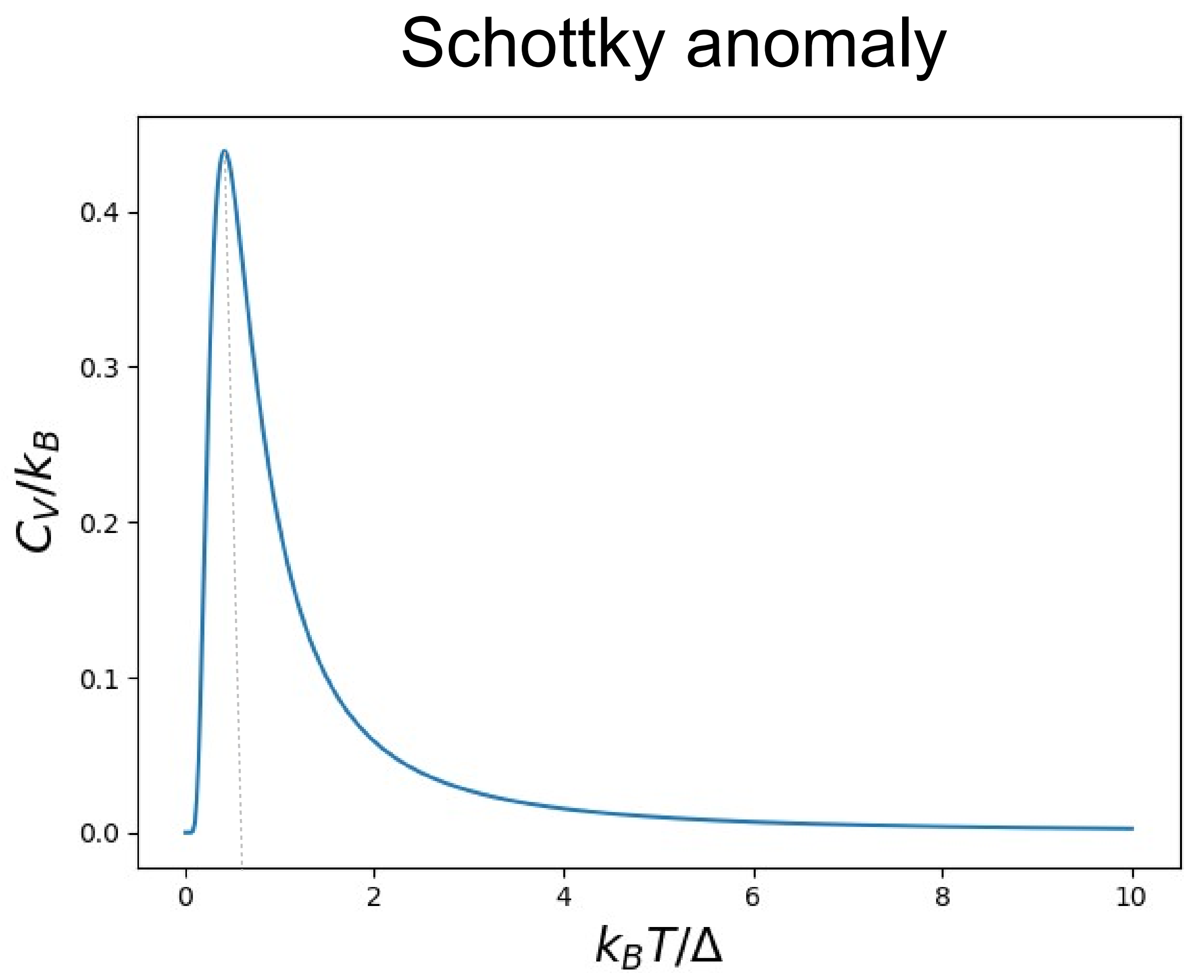
$k_B T \ll \Delta$

آنسامبل کانونیک

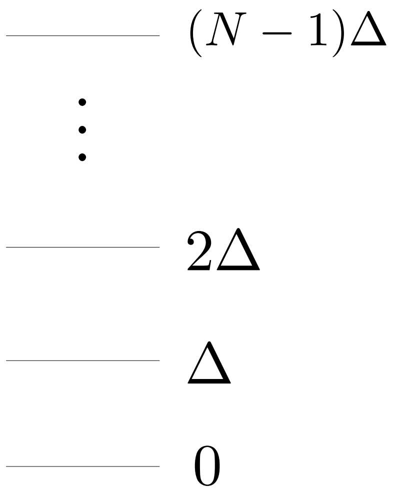
* سیستم دو حالته

Δ

0



آنسامبل کانونیک



* سیستم N حالته

$$Z = 1 + e^{-\beta\Delta} + e^{-2\beta\Delta} + \cdots + e^{-(N-1)\beta\Delta}$$

$$x \ll 1 : \quad 1 + x + x^2 + \cdots + x^n = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$$

$$n \to N - 1, \quad x = e^{-\beta\Delta}$$

$$Z = \frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}}$$

$$F = -k_B T \ln\left(\frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}}\right) = -k_B T[\ln(1 - e^{-N\beta\Delta}) - \ln(1 - e^{-\beta\Delta})]$$

آنسامبل کانونیک

$(N-1)\Delta$

$\vdots$

2Δ

Δ

0

* سیستم N حالته

$$F = -k_B T[\ln(1-e^{-N\beta\Delta}) - \ln(1-e^{-\beta\Delta})]$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)$$

$$S = k_B \ln\left(\frac{1-e^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right) - \frac{\Delta}{T}\left(\frac{Ne^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-N\beta\Delta}}\right) + \frac{\Delta}{T}\left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

$$\xrightarrow{\times T} ST = k_B T \ln\left(\frac{1-e^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right) - \Delta\left(\frac{Ne^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-N\beta\Delta}}\right) + \Delta\left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالته

$$F = -k_B T \ln\left(\frac{1-e^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

$$ST = k_B T \ln\left(\frac{1-e^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right) - \Delta\left(\frac{Ne^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-N\beta\Delta}}\right) + \Delta\left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

$$ST = -F - \Delta\left(\frac{Ne^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-N\beta\Delta}}\right) + \Delta\left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

$$U = -\Delta\left(\frac{Ne^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-N\beta\Delta}}\right) + \Delta\left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالته

$$U = -\Delta\left(\frac{Ne^{-N\beta\Delta}}{1-e^{-N\beta\Delta}}\right) + \Delta\left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1-e^{-\beta\Delta}}\right)$$

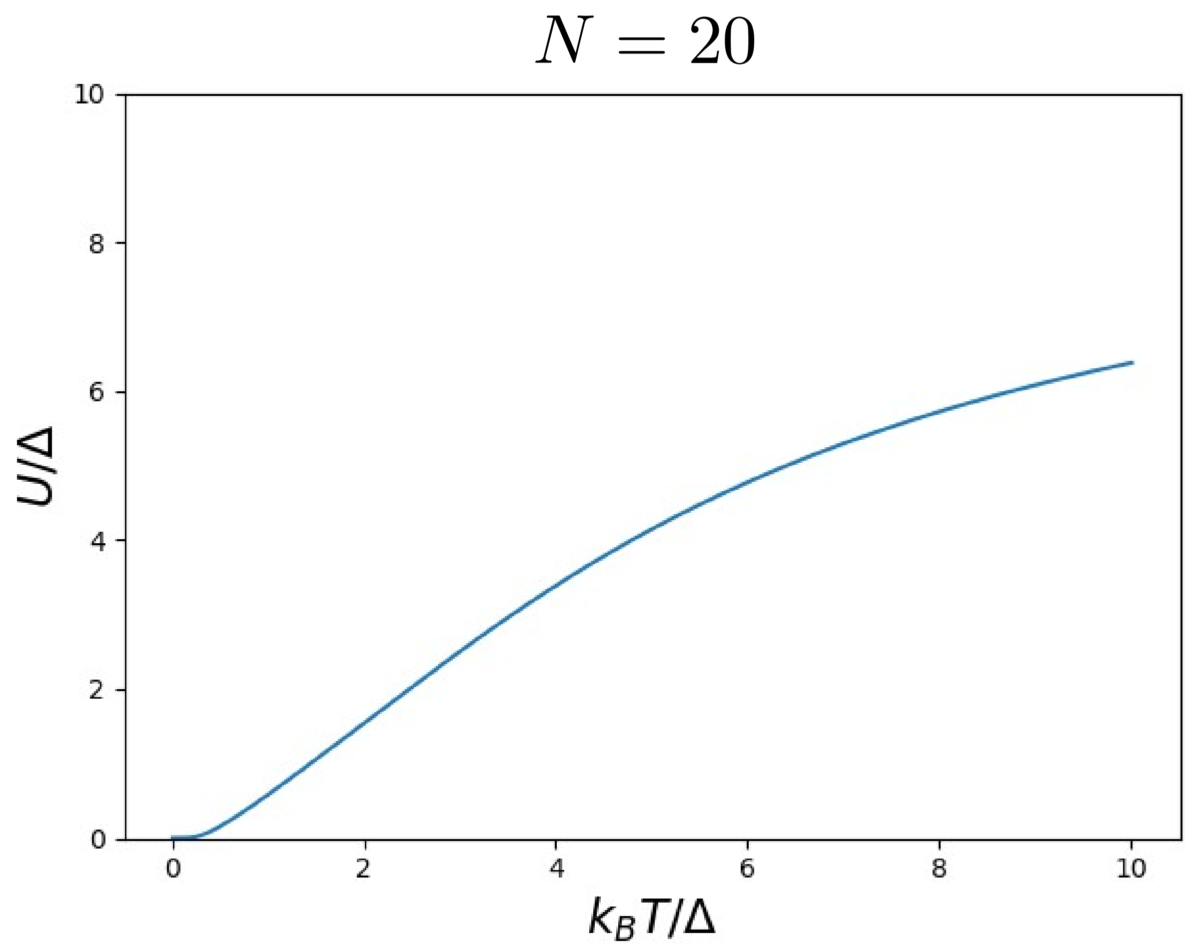
$$U = \Delta\left(\frac{N}{1-e^{N\beta\Delta}}\right) - \Delta\left(\frac{1}{1-e^{\beta\Delta}}\right)$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$C_V = -k_B(\beta\Delta)^2\left[\frac{N^2 e^{N\beta\Delta}}{(1-e^{N\beta\Delta})^2} - \frac{e^{\beta\Delta}}{(1-e^{\beta\Delta})^2}\right]$$

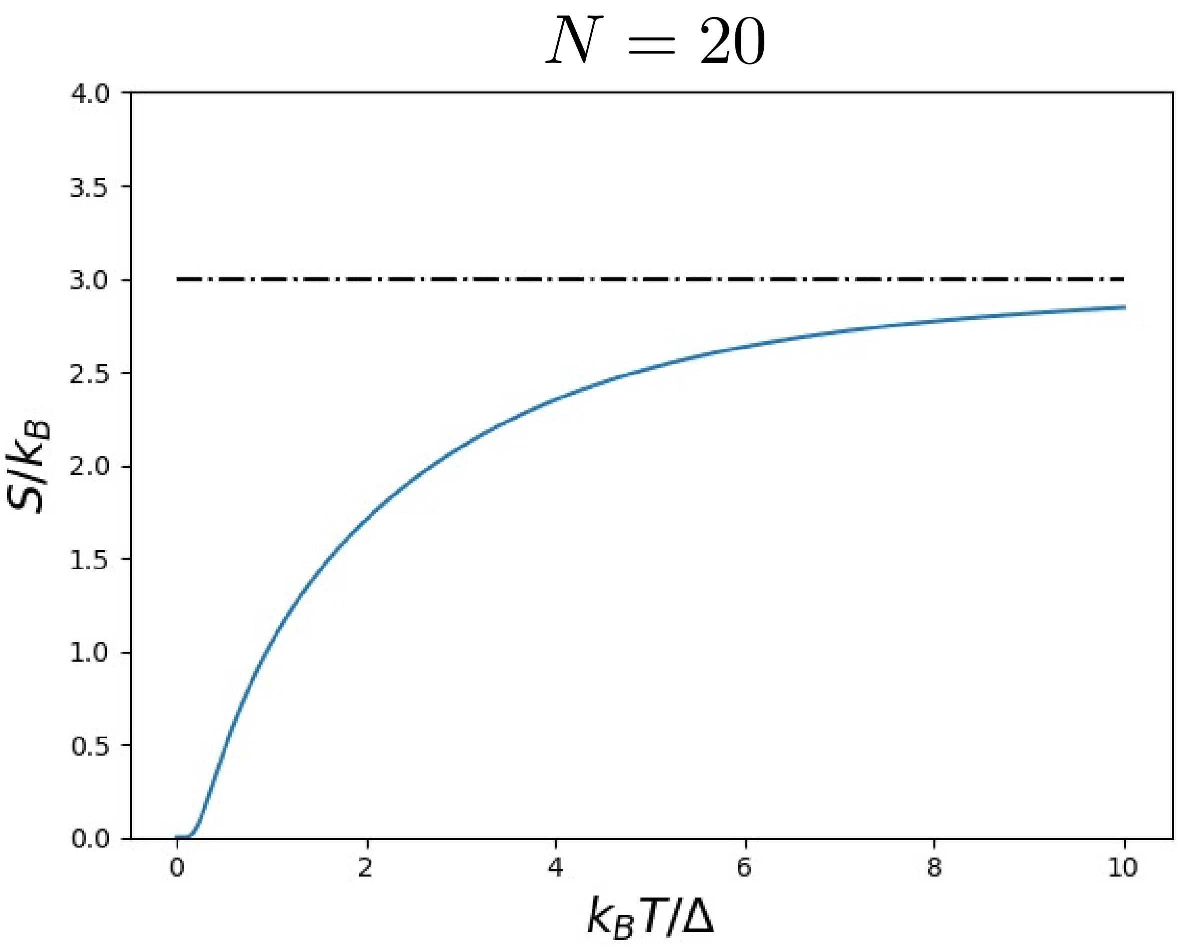
آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالته



آنسامبل کانونیک

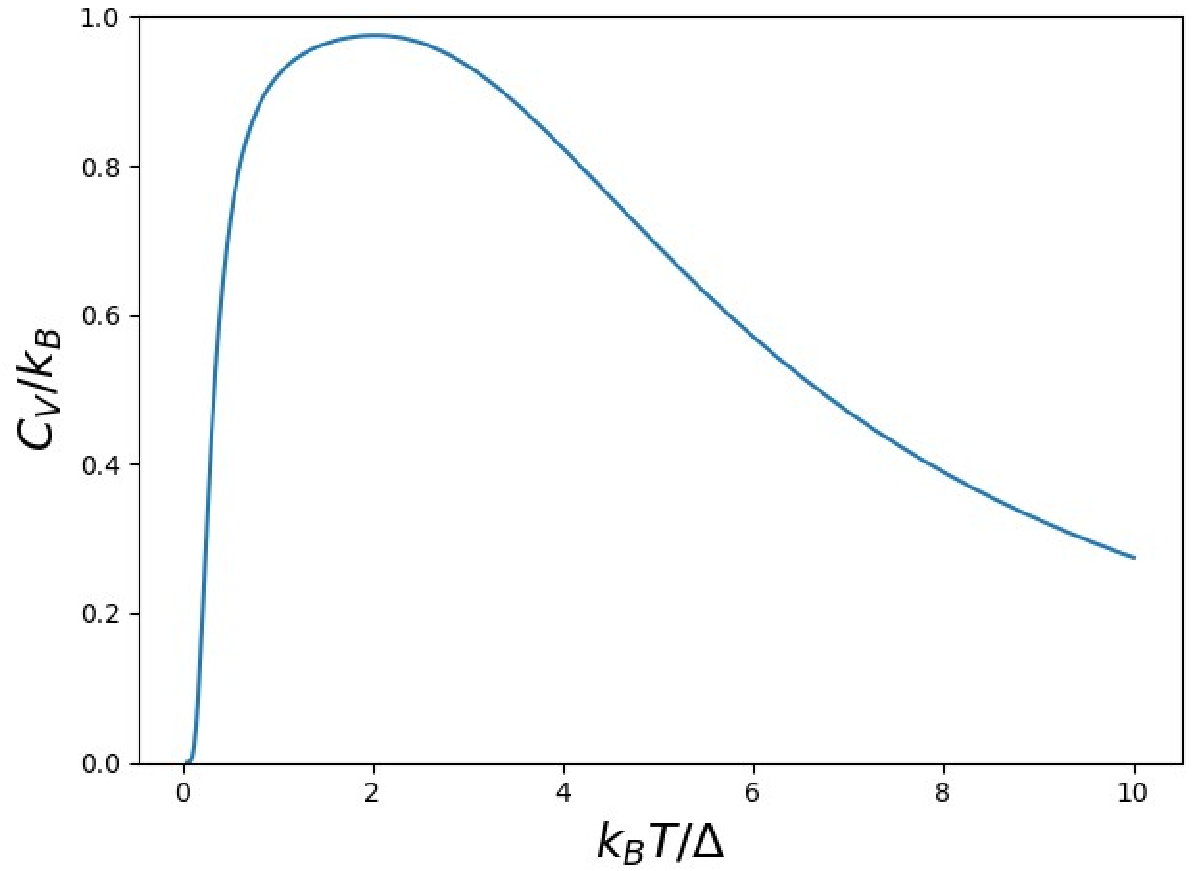
* سیستم N حالته



آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالته

$$N = 20$$



آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

$$\vdots$$

$5\hbar\omega/2$

$3\hbar\omega/2$

$\hbar\omega/2$

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

$$Z = \sum_k e^{-\beta\epsilon_k} = \sum_k e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)}$$

$$Z = \sum_k e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = e^{-\beta\hbar\omega/2}\sum_k e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$$

$\vdots$

$5\hbar\omega/2$

$3\hbar\omega/2$

$\hbar\omega/2$

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$F = -k_B T \ln Z = k_B T\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \ln(1-e^{-\beta\hbar\omega})\right)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = -k_B \ln(1-e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{\hbar\omega}{T}\frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$U = F + TS = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

$\vdots$

$5\hbar\omega/2$

$3\hbar\omega/2$

$\hbar\omega/2$

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$U = F + TS = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial U}{\partial \beta}$$

$$C_V = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{-\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}(1 - e^{-\cancel{\beta\hbar\omega}}) - \hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}\cancel{e}^{-\beta\hbar\omega}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^2} = k_B(\beta\hbar\omega)^2\frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^2}$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

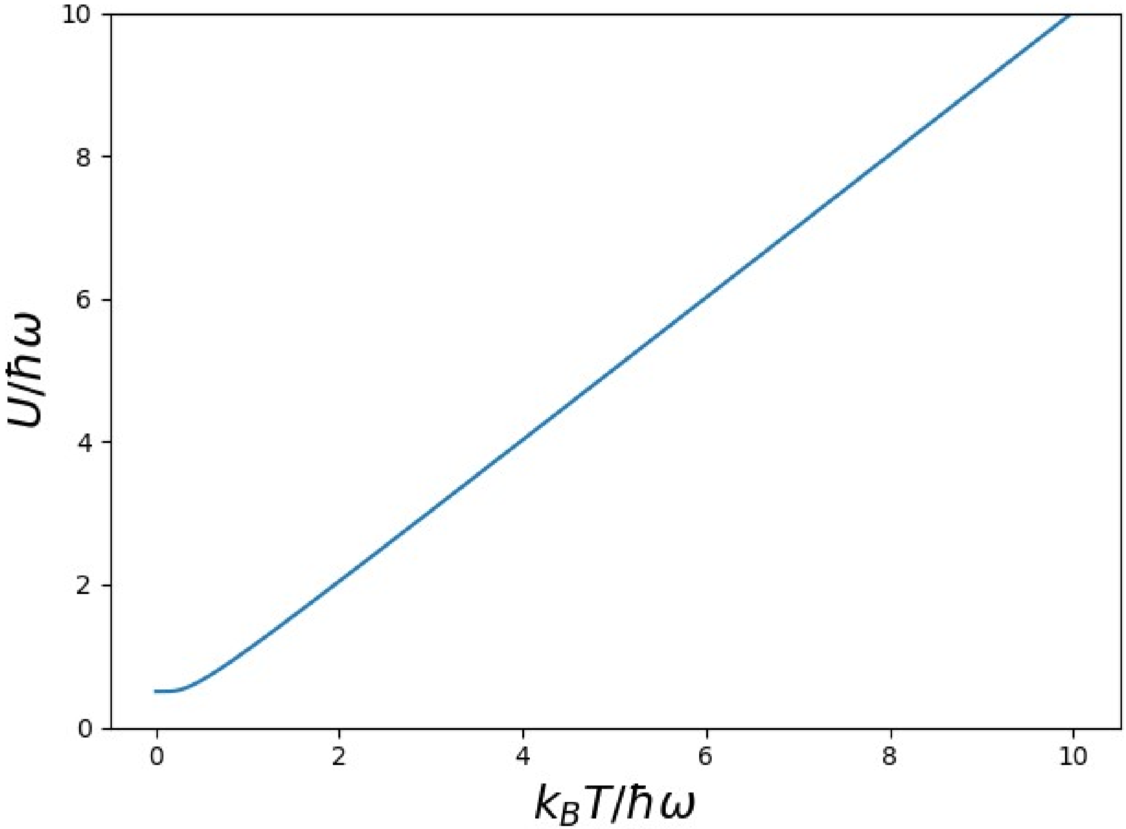
$$k_B T \gg \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \ll 1$$

$$U = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$U = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right)$$

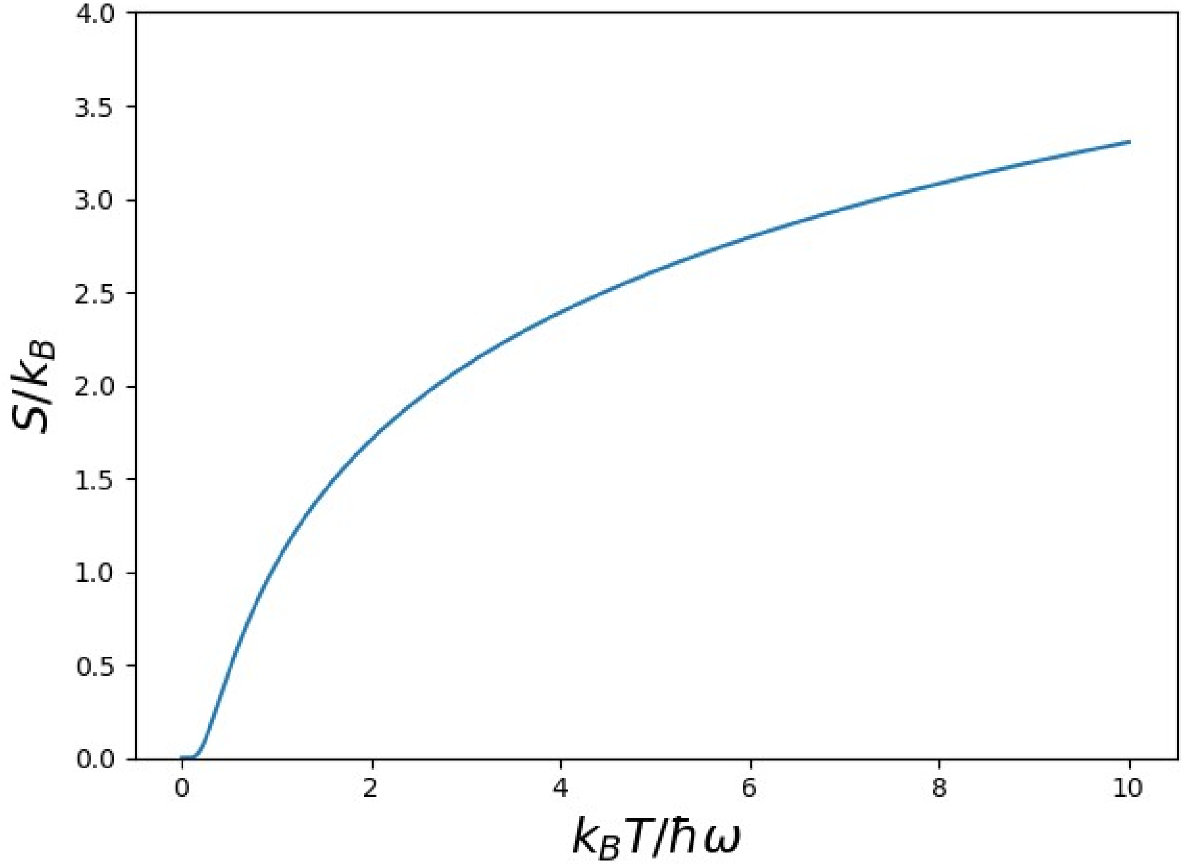
$$U = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{(1 + \beta\hbar\omega + \cdots) - 1}\right)$$

$$U \simeq \frac{\hbar\omega}{2} + k_B T$$



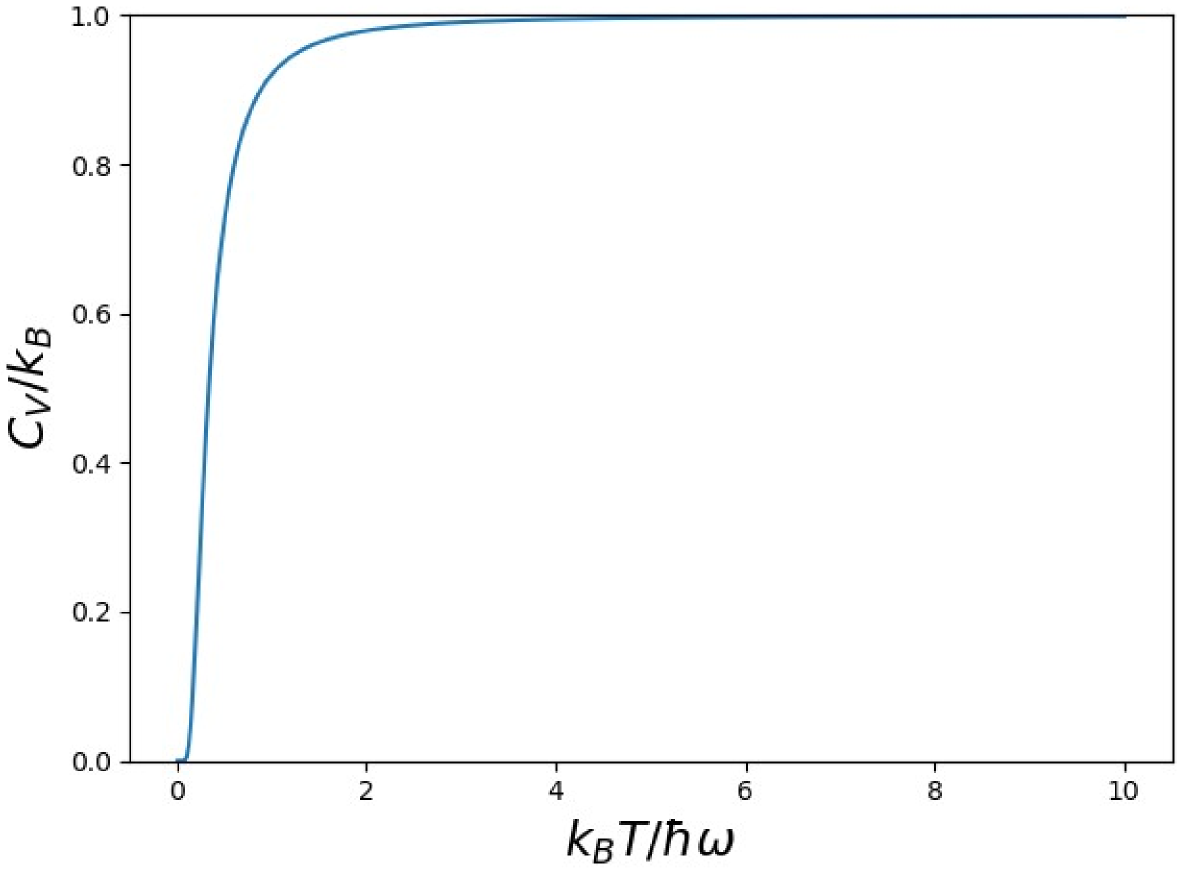
آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده



آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده



$$k_BT \gg \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \ll 1$$

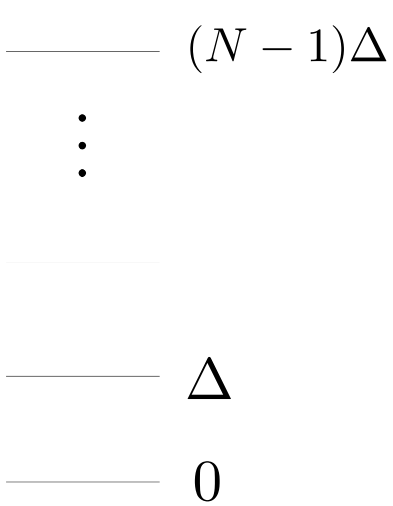
$$U \simeq \frac{\hbar\omega}{2} + k_BT$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} \simeq k_B$$

$$\frac{C_V}{k_B} \to 1$$

آنسامبل کانونیک

* اگر k_BT بسیار کمتر از فاصله بین پایین‌ترین تراز انرژی و اولین تراز برانگیخته باشد ، سیستم در پایین ترین تراز قرار خواهد گرفت.



* اگر مجموعه‌ای محدود از ترازهای انرژی وجود داشته باشد و k_BT بسیا ر بزرگتر از فاصله انرژی بین پایین‌ترین و بالاترین تراز باشد، در این صورت هر تراز انرژی با احتمال برابر اشغال می شود.

آنسامبل کانونیک

* اگر نردبان نامتناهی از سطوح وجود داشته باشد و k_BT بسیار بزرگتر از فاصله انرژی بین ترازهای مجاور باشد، در این صورت میانگین انرژی بطور خطی با T افزایش می یابد و نتیجه مطابق با **قانون همپاری** بدست می آورد.

$$\infty$$

$$\vdots$$

$$5\hbar\omega/2$$

$$3\hbar\omega/2$$

$$\hbar\omega/2$$

محمدرضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

جلسه دهم

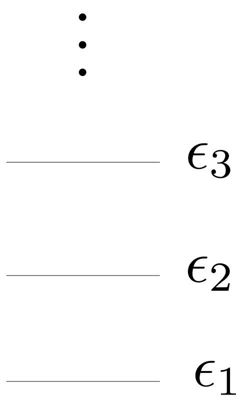
مکانیک آماری

محمدرضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه قم
اسفند ۹۸

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش

$$p_l = \frac{e^{-\beta\epsilon_l}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$



$$Z = \sum_k e^{-\beta\epsilon_k}, \quad Z = e^{-\beta F}, \quad F = -k_B T \ln Z$$

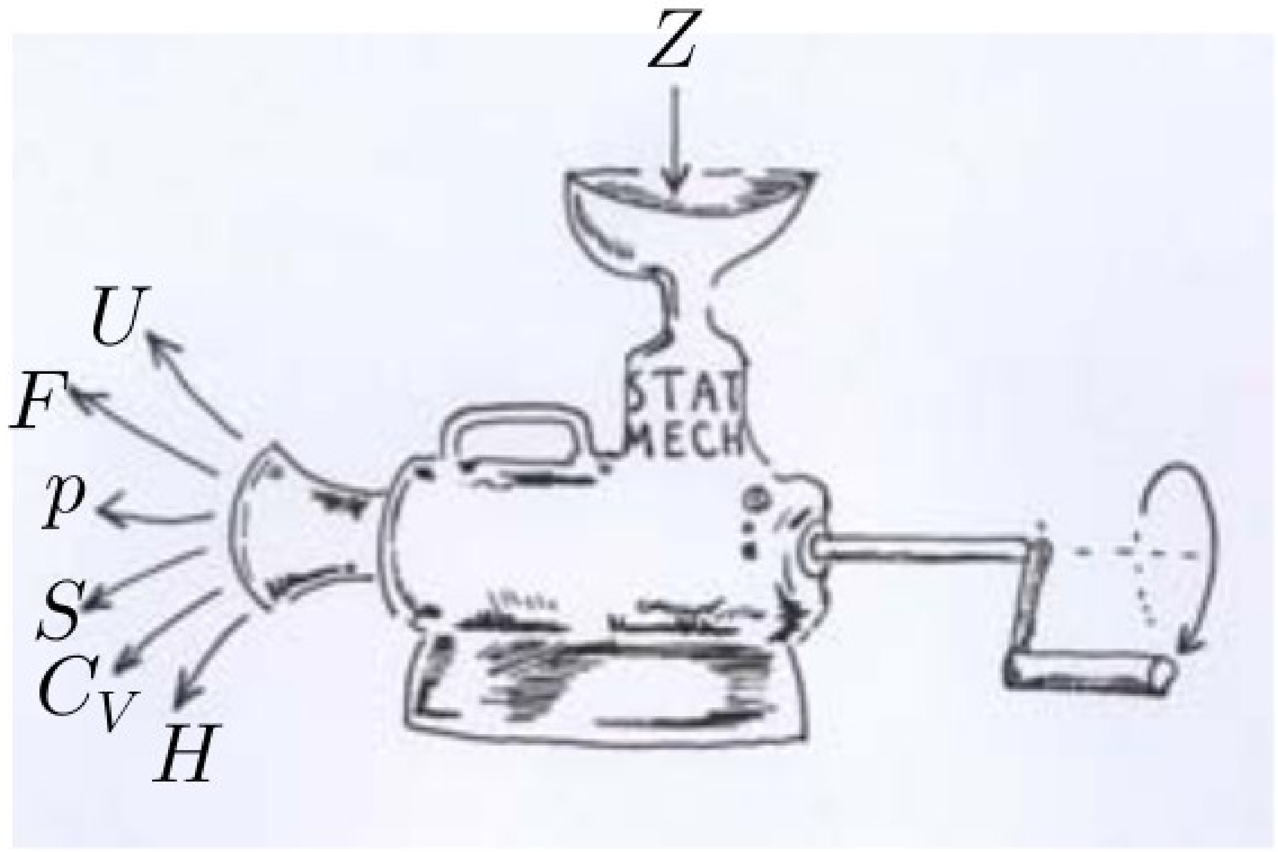
$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_k \epsilon_k e^{-\beta\epsilon_k}}{\sum_k e^{-\beta\epsilon_k}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2}{\partial\beta^2} \ln Z = k_B T^2 C_V$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش



آنسامبل کانونیک

* حالتی که انرژی سیستم از سهم های مختلف و مستقل تشکیل شده باشد

$$E_{i,j} = E_i^{(a)} + E_j^{(b)}$$

$$Z = \sum_{i,j} e^{-\beta E_{i,j}} = \sum_i \sum_j e^{-\beta (E_i^{(a)} + E_j^{(b)})}$$

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i^{(a)}} \sum_j e^{-\beta E_j^{(b)}}$$

$$Z = \left(\sum_i e^{-\beta E_i^{(a)}} \right) \left(\sum_j e^{-\beta E_j^{(b)}} \right) = Z^{(a)} Z^{(b)}$$

آنسامبل کانونیک

* حالتی که انرژی سیستم از سهم های مختلف و مستقل تشکیل شده باشد

$$E_{i,j} = E_i^{(a)} + E_j^{(b)}$$

$$Z = Z^{(a)} Z^{(b)}$$

$$\ln Z = \ln Z^{(a)} + \ln Z^{(b)}$$

$$-k_B T \ln Z = -k_B T \ln Z^{(a)} - k_B T \ln Z^{(b)} \Rightarrow F = F^{(a)} + F^{(b)}$$

$$U = \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z^{(a)} - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z^{(b)} = U^{(a)} + U^{(b)}$$

آنسامبل کانونیک

* یک ذره با اسپین برابر با $\frac{1}{2}$ که در یک میدان مغناطیسی B در راستای z قرار داده شده است، می‌تواند در یکی از دو ویژه حالت $|\uparrow\rangle$ و $|\downarrow\rangle$ قرار می‌گیرد.

* $|\uparrow\rangle$ حالتی است که اسپین ذره **موازی** با میدان B است و $|\downarrow\rangle$ حالتی است که اسپین ذره **پادموازی** با میدان B است.

* $|\uparrow\rangle$ ممان مغناطیسی $-\mu_B$ در ذره القاء می‌کند و $|\downarrow\rangle$ ممان مغناطیسی $+\mu_B$ در ذره القاء می‌کند .

* انرژي حالتهای اسپینی ذره بوسیله رابطه $+\mu_B B$ برای حالتی که اسپین ذره $|\uparrow\rangle$ و رابطه $-\mu_B B$ برای حالتی که اسپین ذره $|\downarrow\rangle$ داده می‌شود.

آنسامبل کانونیک

* انرژي حالتهای اسپینی ذره بوسیله رابطه $+\mu_B B$ برای حالتی که اسپین ذره $|\uparrow\rangle$ و رابطه $-\mu_B B$ برای حالتی که اسپین ذره $|\downarrow\rangle$ داده می‌شود.

$$|\uparrow\rangle : +\mu_B B$$
$$|\downarrow\rangle : -\mu_B B$$

$$E = -\vec{m}\cdot\vec{B} = -m_z B$$

$$m_z^{|\uparrow\rangle} = -\mu_B$$
$$m_z^{|\downarrow\rangle} = +\mu_B$$

* تابع پارش تک ذره

$$Z_1 = e^{\beta\mu_B B} + e^{-\beta\mu_B B}$$

$$Z_1 = 2\cosh(\beta\mu_B B)$$

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش تک ذره

$$Z_1 = 2\cosh(\beta\mu_B B)$$

* یک سیستم پارامغناطیس از N ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ تشکیل شده است که هیچ برهمکنشی با یکدیگر ندارند.

$$\cdots \uparrow \cdots$$

$$\cdots \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow \cdots$$

$$Z_N = Z_1^N = (2\cosh(\beta\mu_B B))^N$$

$$F = -k_B T \ln Z_N = -N k_B T \ln Z_1 \Rightarrow \boxed{F = -N k_B T \ln(2\cosh(\beta\mu_B B))}$$

آنسامبل کانونیک

قانون اول ترمودینامیک

$$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S + \text{đ}W$$

$$(T, V, p): \qquad \text{đ}W = -p\mathrm{d}V$$

$$(T, B, m): \qquad \text{đ}W = -\vec{m}\cdot\mathrm{d}\vec{B} = -m\mathrm{d}B$$

$$F = U - TS \Rightarrow \mathrm{d}F = \mathrm{d}U - S\mathrm{d}T - T\mathrm{d}S = \cancel{T\mathrm{d}S} + \text{đ}W - S\mathrm{d}T - \cancel{T\mathrm{d}S}$$

$$\mathrm{d}F = \text{đ}W - S\mathrm{d}T$$

$$(T, p, V): \quad \mathrm{d}F = -p\mathrm{d}V - S\mathrm{d}T$$

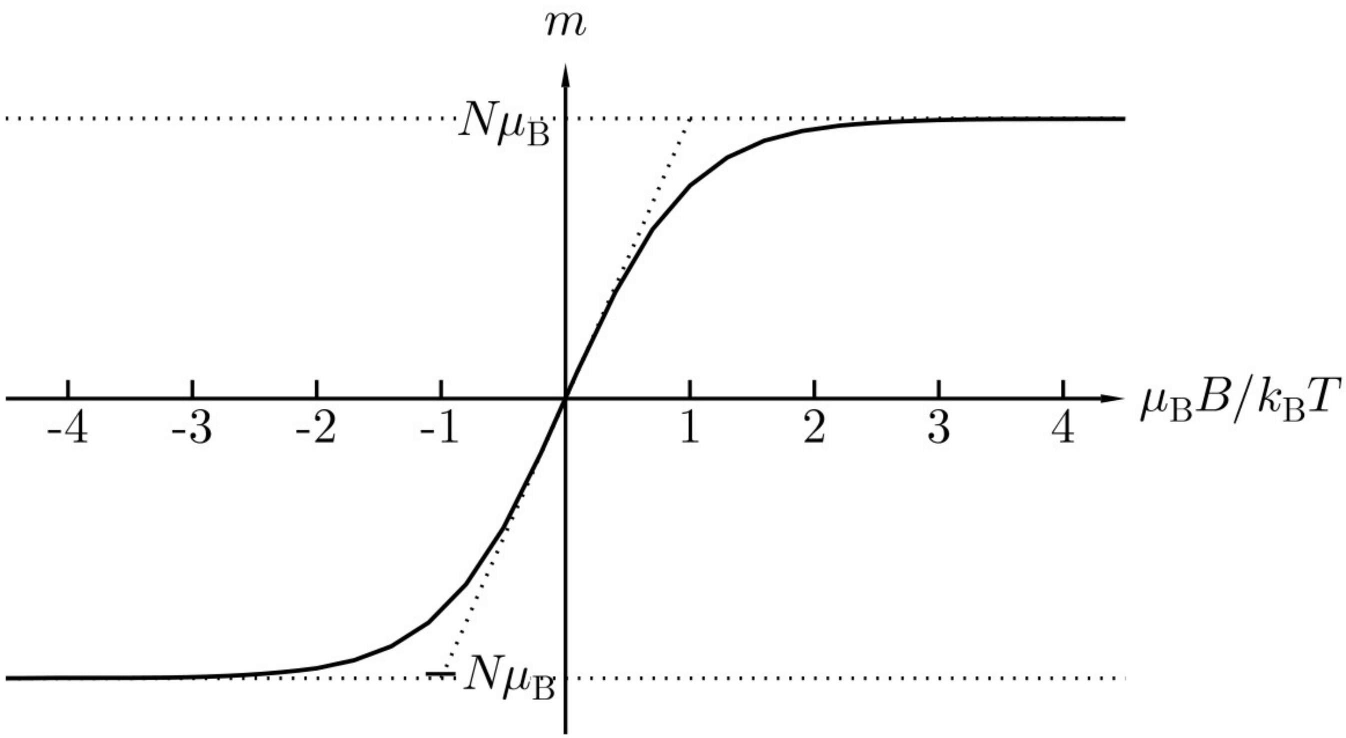
$$(T, m, B): \quad \mathrm{d}F = -m\mathrm{d}B - S\mathrm{d}T$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \quad m = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T$$

آنسامبل کانونیک

* تابع هلمهولتز یک سیستم پارامغناطیس N ذره‌ای

$$F = -Nk_BT\ln(2\cosh(\beta\mu_B B))$$



$$m = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T$$

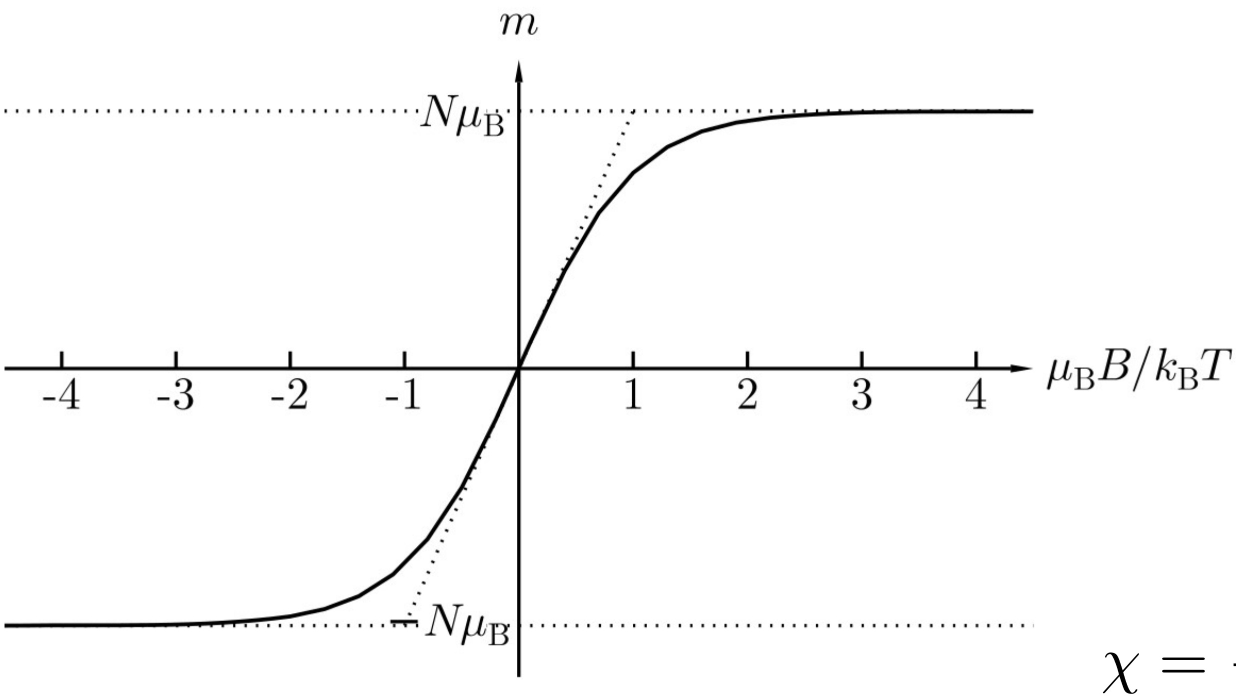
$$m = N\mu_B\tanh(\beta\mu_B B)$$

آنسامبل کانونیک

* مغناطش در واحد حجم

$$M = \frac{m}{V} = \frac{N\mu_B}{V}\tanh(\beta\mu_B B)$$

* پذیرفتاری مغناطیسی



$$\chi = \lim_{H\to 0}\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T$$

$$M = \frac{N\mu_B^2 B}{k_B T V} = \frac{N\mu_B^2\mu_0 H}{k_B T V}$$

$$\chi = \frac{N\mu_B^2\mu_0 H}{k_B T V} \propto \frac{1}{T}$$ قانون کوری

آنسامبل کانونیک

$$F = -Nk_B T \ln(2\cosh(\beta\mu_B B))$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_B = Nk_B \ln(2\cosh(\beta\mu_B B)) - \frac{N\mu_B B}{T}\frac{\sinh(\beta\mu_B B)}{\cosh(\beta\mu_B B)}$$

$$\boxed{S = -\frac{F}{T} - \frac{N\mu_B B}{T}\tanh(\beta\mu_B B)} \Rightarrow ST = -F - N\mu_B B\tanh(\beta\mu_B B)$$

$$F = U - ST \Rightarrow ST = -F + U$$

$$\boxed{U = -N\mu_B B\tanh(\beta\mu_B B)}$$

آنسامبل کانونیک

$$U = -N\mu_B B \tanh(\beta\mu_B B)$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T}\frac{\partial U}{\partial \beta}$$

$$C = -N\mu_B B\left(\frac{-1}{k_B T^2}\right)\mu_B B\frac{\cosh^2(\beta\mu_B B) - \sinh^2(\beta\mu_B B)}{\cosh^2(\beta\mu_B B)}$$

$$C = Nk_B(\beta\mu_B B)^2\frac{1}{\cosh^2(\beta\mu_B B)}$$

$$\boxed{\frac{C}{Nk_B} = \frac{(\beta\mu_B B)^2}{\cosh^2(\beta\mu_B B)}}$$

آنسامبل کانونیک

$\Delta + \mu_B B$

Δ

$\Delta - \mu_B B$

0

* سیستم مغناطیسی شامل چهار تراز انرژی

$$Z_1 = 1 + e^{-\beta(\Delta - g\mu_B B)} + e^{-\beta\Delta} + e^{-\beta(\Delta + g\mu_B B)}$$

$$Z_N = Z_1^N$$

$$Z_N = \left[1 + e^{-\beta(\Delta - g\mu_B B)} + e^{-\beta\Delta} + e^{-\beta(\Delta + g\mu_B B)}\right]^N$$

$$Z_N = \left[1 + (1 + 2\cosh(\beta g\mu_B B))e^{-\beta\Delta}\right]^N$$

$$F = -k_B T \ln Z_N$$

$$F = -Nk_B T \ln\left[1 + (1 + 2\cosh(\beta g\mu_B B))e^{-\beta\Delta}\right]$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم مغناطیسی شامل چهار تراز انرژی

$\Delta + \mu_B B$

Δ

$\Delta - \mu_B B$

0

$$F = -N k_B T \ln\left[1 + \left(1 + 2\cosh(\beta g \mu_B B)\right) e^{-\beta\Delta}\right]$$

$$m = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T = N k_B T \frac{2\beta\, g\mu_B e^{-\beta\Delta} \sinh(\beta\, g\mu_B B)}{1 + e^{-\beta\Delta}(1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B))}$$

$$m = 2N g\mu_B \frac{\sinh(\beta\, g\mu_B B)}{e^{\beta\Delta} + 1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B)}$$

$$M = \frac{m}{V} = 2n g\mu_B \frac{\sinh(\beta\, g\mu_B B)}{e^{\beta\Delta} + 1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B)}, \qquad n = \frac{N}{V}$$

آنسامبل کانونیک

$\Delta + \mu_B B$ ———

Δ ———

$\Delta - \mu_B B$ ———

0 ———

* سیستم مغناطیسی شامل چهار تراز انرژی

$$M = 2ng\mu_B \frac{\sinh(\beta\, g\mu_B B)}{e^{\beta\Delta} + 1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B)}$$

$$\chi = \mu_0 \lim_{B\to 0}\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T$$

$$\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = 2ng\mu_B \left(\frac{\beta\, g\mu_B \cosh(\beta\, g\mu_B B)}{e^{\beta\Delta} + 1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B)} - \frac{2\beta\, g\mu_B \sinh^2(\beta\, g\mu_B B)}{[e^{\beta\Delta} + 1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B)]^2}\right)$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم مغناطیسی شامل چهار تراز انرژی

$\Delta + \mu_B B$

Δ

$\Delta - \mu_B B$

0

$$M = 2ng\mu_B \frac{\sinh(\beta\, g\mu_B B)}{e^{\beta\Delta} + 1 + 2\cosh(\beta\, g\mu_B B)}$$

$$\chi = \mu_0 \lim_{B\to 0}\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T$$

$$\lim_{B\to 0}\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = \frac{2ng^2\mu_B^2}{k_B T}\frac{1}{3+e^{\beta\Delta}}$$

$$\chi = \frac{2ng^2\mu_0\mu_B^2}{k_B T}\frac{1}{3+e^{\beta\Delta}}$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر هارمونیک ساده در سه‌بعد

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$Z = \sum_{n_x,n_y,n_z} e^{-\beta(n_x+n_y+n_z+3/2)\hbar\omega}$$

$$Z = e^{-3\beta\hbar\omega/2} \sum_{n_x,n_y,n_z} e^{-\beta(n_x+n_y+n_z)\hbar\omega}$$

$$Z = e^{-3\beta\hbar\omega/2}\left(\sum_{n_x} e^{-n_x\beta\hbar\omega}\right)\left(\sum_{n_y} e^{-n_x\beta\hbar\omega}\right)\left(\sum_{n_z} e^{-n_x\beta\hbar\omega}\right)$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر هارمونیک ساده در سه‌بعد

$$Z = e^{-3\beta\hbar\omega/2}\left(\sum_{n_x} e^{-n_x\beta\hbar\omega}\right)\left(\sum_{n_y} e^{-n_x\beta\hbar\omega}\right)\left(\sum_{n_z} e^{-n_x\beta\hbar\omega}\right)$$

$$Z = e^{-3\beta\hbar\omega/2}\left(\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)\left(\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)\left(\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$Z = \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$Z = \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)^3$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر هارمونیک ساده در سه‌بعد

$$Z = \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^3$$

$$Z_N = Z^N = \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)^{3N}$$

$$F = -k_B T \ln Z_N = -3Nk_B T \ln \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)$$

$$\boxed{F = -k_B T \ln Z_N = \frac{3N\hbar\omega}{2} + 3Nk_B T \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega})}$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر هارمونیک ساده در سه‌بعد

$$F = -3Nk_BT\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = 3Nk_B\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right) + 3Nk_BT\left(\frac{\partial\beta}{\partial T}\right)\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$S = -\frac{F}{T} - \left(\frac{3N}{T}\right)\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right) \Rightarrow ST = -F - 3N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$U = -3N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر هارمونیک ساده در سه‌بعد

$$U = -3N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

$$U = -3N\frac{\partial}{\partial\beta}\left[-\beta\frac{\hbar\omega}{2} - \ln(1-e^{-\beta\hbar\omega})\right] = 3N\left[\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right]$$

$$U = 3N\hbar\omega\left[\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right] = 3N\hbar\omega\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]$$

$$k_BT \gg \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \ll 1$$

$$U = 3N\hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{(1+\beta\hbar\omega+\cdots)-1}\right) \Rightarrow U \simeq \frac{3N\hbar\omega}{2} + 3Nk_BT$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر هارمونیک ساده در سه‌بعد

$$U = 3N\hbar\omega\left[\frac{1}{2}+\frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right] = 3N\hbar\omega\left[\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial U}{\partial \beta}$$

$$C_V = 3Nk_B(\beta\hbar\omega)^2\frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{(1-e^{-\beta\hbar\omega})^2}$$

$$k_B T \gg \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \ll 1$$

$$U \simeq \frac{3N\hbar\omega}{2} + 3Nk_B T \Rightarrow C_V = 3Nk_B$$