جلسه دهم

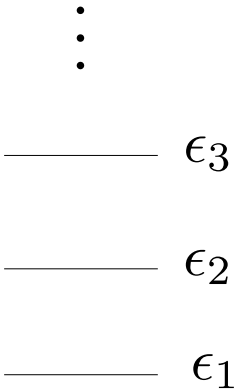
مکانیک آماری

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

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش

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



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

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

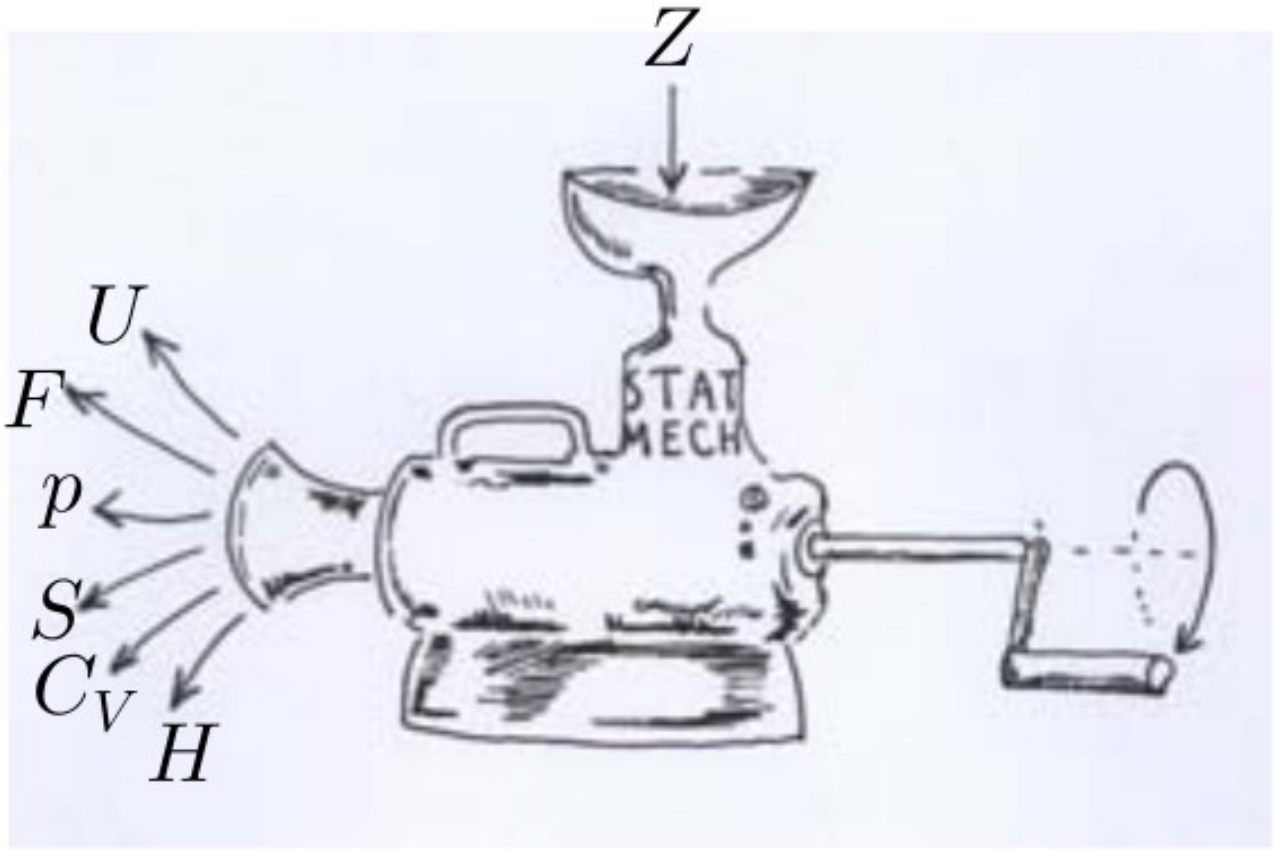
$$\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z = k_B T^2 C_V$$

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

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

* تابع پارش



محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

یادآوری

آنسامبل کانونیک

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

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

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

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

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

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

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

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

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

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

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

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

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

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.

$$|\uparrow\rangle : +\mu_B B \quad \text{———}$$
$$|\downarrow\rangle : -\mu_B B \quad \text{———}$$

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

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

* تابع پارش تک ذره

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

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

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

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

$$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S + đW$$

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

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

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

$$\mathrm{d}F = đW - S\mathrm{d}T$$

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

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

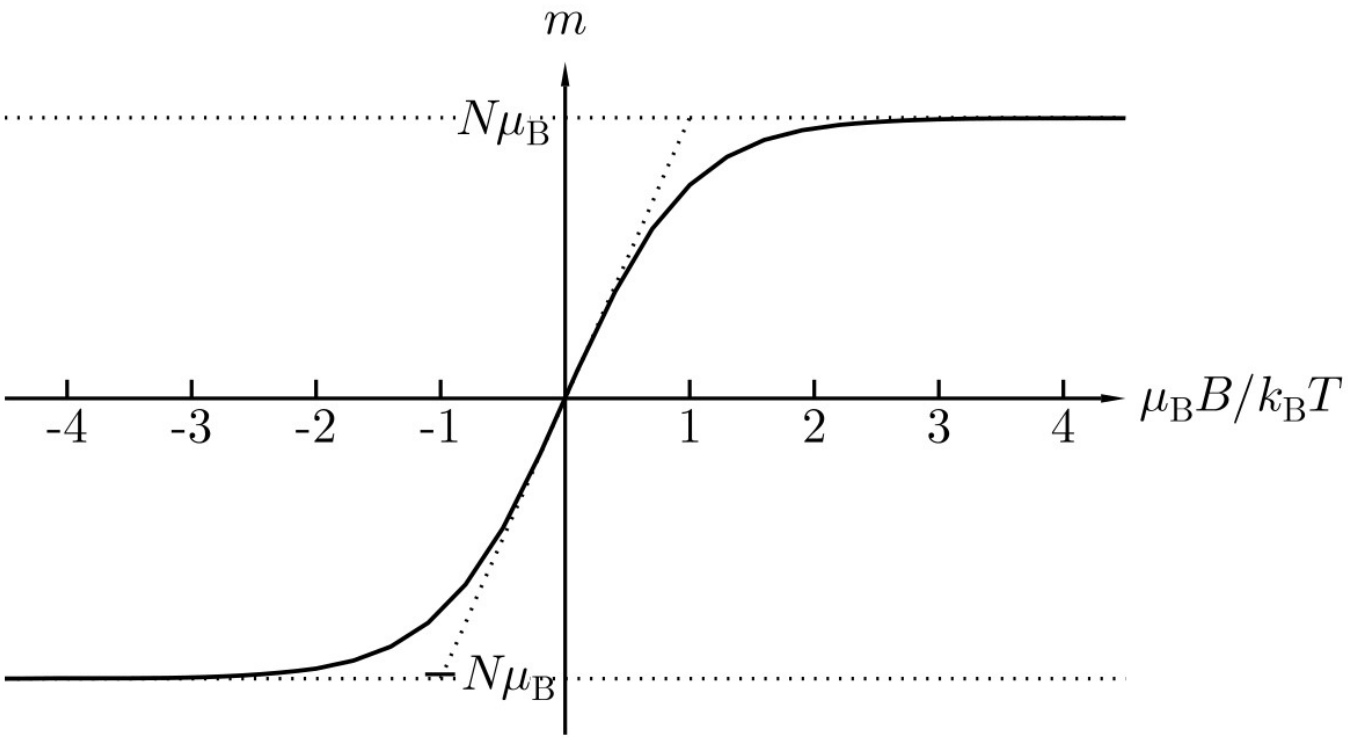
$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T, \quad m = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T$$

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

* تابع هلمهولتز یک سیستم پارامغناطیس N ذره‌ای

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



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

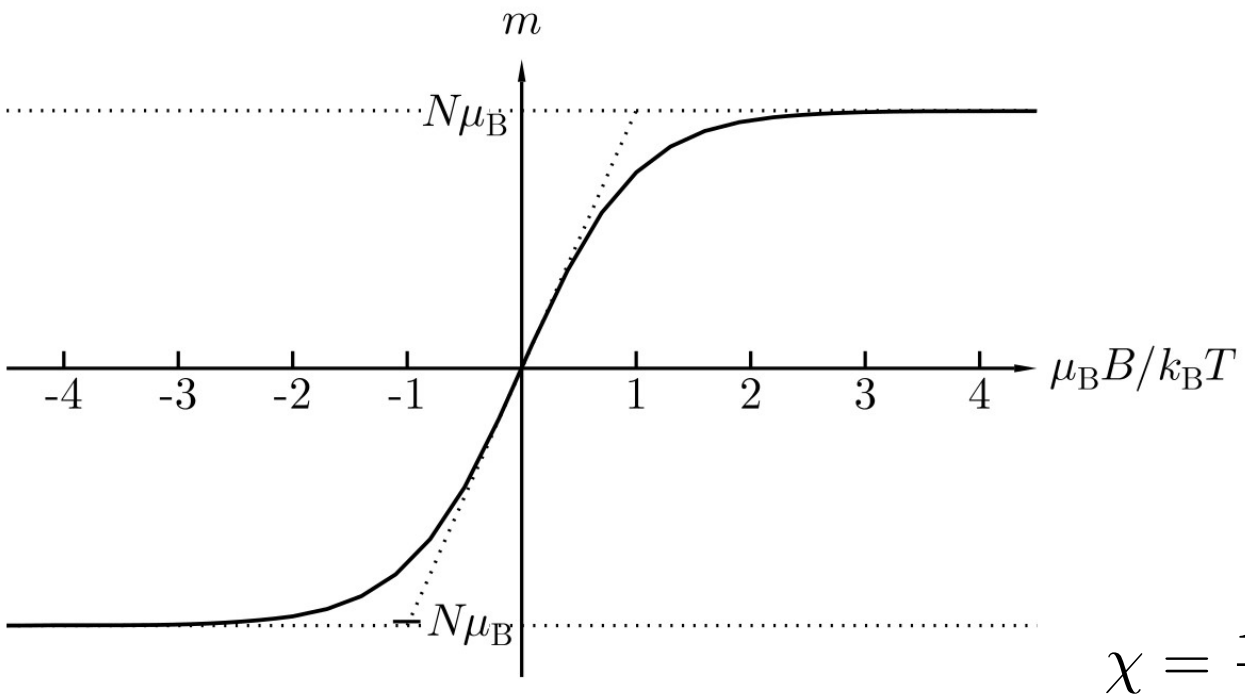
$$m = N\mu_B\tanh(\beta\mu_B B)$$

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

* مغناطش در واحد حجم

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



* پذیرفتاری مغناطیسی

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

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

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

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

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

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

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

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

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

آنسامبل کانونیک

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

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

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

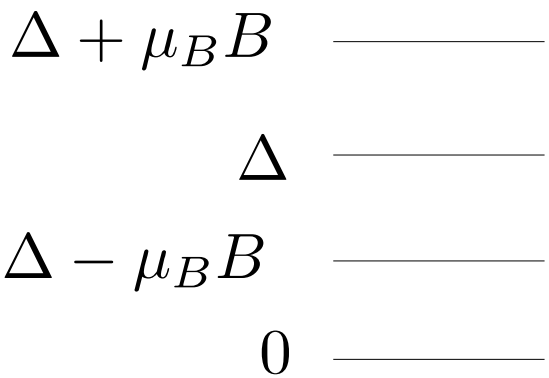
$$C = N k_B (\beta\mu_B B)^2 \frac{1}{\cosh^2(\beta\mu_B B)}$$

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

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم

آنسامبل کانونیک

* 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 ———

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

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

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

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

آنسامبل کانونیک

* سیستم مغناطیسی شامل چهار تراز انرژی

$\Delta + \mu_B B$ ———

Δ ———

$\Delta - \mu_B B$ ———

0 ———

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

مثال

محمدرضا مظفری گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم