Winter-Semester 2017/18

Moderne Theoretische Physik IIIa

Statistische Physik

Dozent: Alexander Shnirman
Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Do 11:30-13:00, Lehmann Raum 022, Geb 30.22

http://www.tkm.kit.edu/lehre/

Mikrokanonische Gesamtheit

Quantenmechanisch

$$\rho \equiv \sum_n W_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$$

$$W_n = \rho_{nn} = \frac{1}{dN(E)} \text{ für } E < E_n < E + dE$$
$$W_n = \rho_{nn} = 0 \text{ sonst}$$

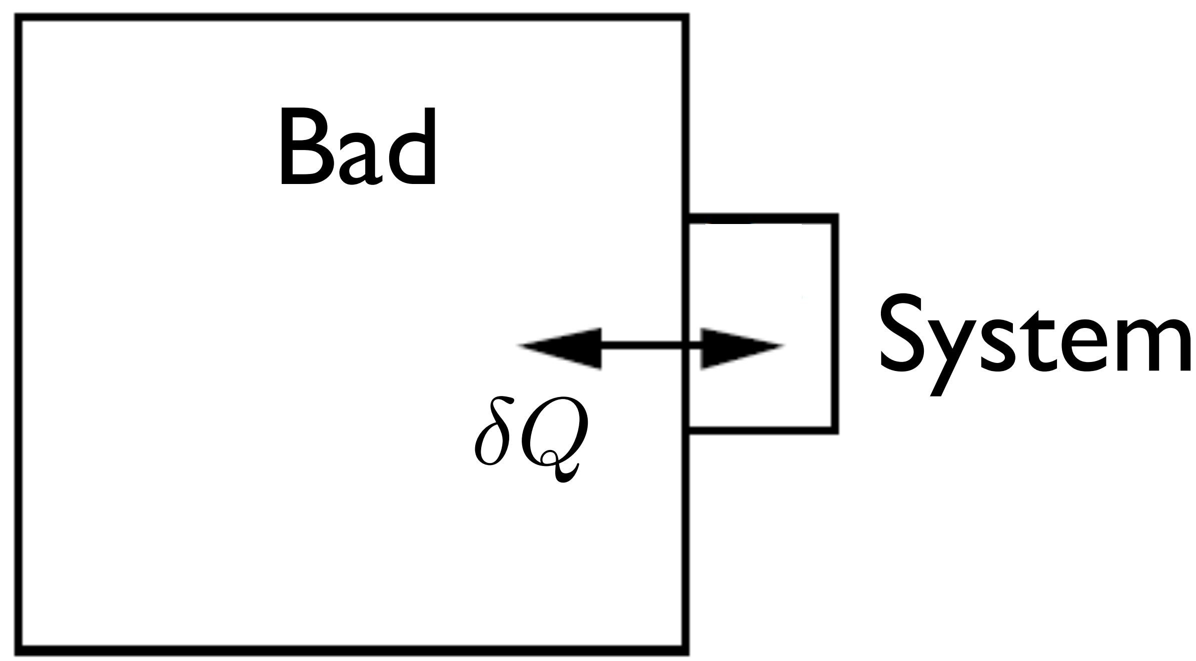
$dN(E)$ - Zahl der Zustände im Energiefenster $[E, E + dE]$

Volle Unbestimmtheit unter Bedingung $E < E_n < E + dE$

$$S \equiv -k_\mathrm{B} \sum_n W_n \ln W_n = k_\mathrm{B} \ln\left[dN(E)\right]$$

Kanonische Gesamtheit

Die kanonische Gesamtheit beschreibt Systeme, die an ein Wärmebad fester Temperatur T gekoppelt sind.



$$\langle E \rangle = U = const.$$

Das Wärmebad bestimmt den Mittelwert der Energie, außerdem ist V = const und N = const.

Kanonische Gesamtheit

Maximale Unbestimmtheit unter Bedingung $\langle E\rangle = U$

$$\rho \equiv \sum_n W_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \qquad H|\Psi_n\rangle = E_n\,|\Psi_n\rangle \qquad \sum_n W_n = 1$$

$$S \equiv -k_{\mathrm{B}} \sum_n W_n \ln W_n$$

$$U = \langle E\rangle = \mathrm{Tr}(\rho H) = \sum_n W_n E_n$$

Nebenbedingung, Methode von Lagrange

$$S_L = -k_{\mathrm{B}} \sum_n W_n \ln W_n - \lambda\left(\sum_n W_n - 1\right) - \alpha\left(\sum_n W_n E_n - U\right)$$

$$\frac{\partial S_L}{\partial W_n} = -k_{\mathrm{B}}(\ln W_n + 1) - \lambda - \alpha E_n = 0 \qquad W_n = const.\cdot e^{-\frac{\alpha E_n}{k_{\mathrm{B}}}}$$

Kanonische Gesamtheit

Maximale Unbestimmtheit unter Bedingung $\langle E \rangle = U$

$$\rho \equiv \sum_n W_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \qquad H|\Psi_n\rangle = E_n\,|\Psi_n\rangle$$

$$W_n = const. \cdot e^{-\frac{\alpha E_n}{k_\mathrm{B}}} = \frac{1}{Z}\,e^{-\beta E_n}$$

$$\sum_n W_n = 1 \quad \Rightarrow \quad Z(\beta, V, N) = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$U = \sum_n W_n E_n \quad \Rightarrow \quad U(\beta, V, N) = \frac{1}{Z}\sum_n E_n e^{-\beta E_n}$$

$$S \equiv -k_\mathrm{B} \sum_n W_n \ln W_n \quad \Rightarrow \quad S(\beta, V, N) = k_\mathrm{B}\beta U + k_\mathrm{B} \ln Z$$

Z - Zustandssumme (Engl.: partition function)

Kanonische Gesamtheit

$$W_n = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta E_n}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$U = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n}$$

$$\mapsto \quad U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

$$U = U(\beta)$$

$$\beta = \beta(U)$$

$$S = k_{\mathrm{B}} \beta U + k_{\mathrm{B}} \ln Z$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,N} = k_{\mathrm{B}}\beta + k_{\mathrm{B}} U \frac{\partial \beta}{\partial U} + k_{\mathrm{B}} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\, \frac{\partial \beta}{\partial U} = k_{\mathrm{B}}\beta = \frac{1}{T}$$

Kanonische Gesamtheit

$$W_n = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta E_n} \qquad k_{\mathrm{B}}\beta = \frac{1}{T} \qquad \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}} T}$$

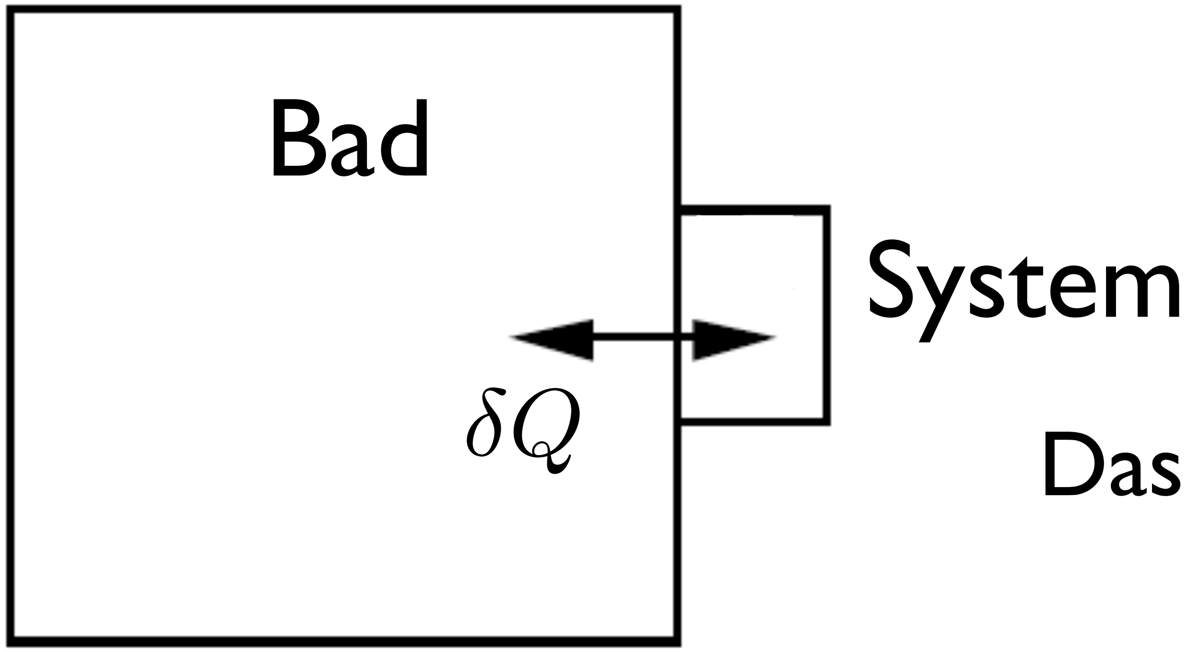
$$Z(T, V, N) = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$S = k_{\mathrm{B}} \beta U + k_{\mathrm{B}} \ln Z$$

$$\Downarrow$$

$$F(T, V, N) = U - TS = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z$$

Kanonische Gesamtheit
alternative Herleitung



$$E = E^S + E^B$$

$$E^S \ll E^B$$

Das Gesamtsystem (System + Bad)
ist mikrokanonisch

$$W_{n,m} = \frac{1}{dN(E)} \text{ für } E < E_n^S + E_m^B < E + dE, \text{ sonst } 0$$

$$W_n = \sum_m W_{n,m} = \frac{dN^B(E - E_n)}{dN(E)}$$

$$k_\mathrm{B} \ln W_n = k_\mathrm{B} \ln \left[dN^B(E - E_n) \right] - k_\mathrm{B} \left[dN(E) \right]$$

$$= S^B(E - E_n) - S = S^B(E) - E_n \frac{\partial S^B(E)}{\partial E} - S = const. - \frac{E_n}{T}$$

Kanonische Gesamtheit: Energie Schwankungen

$$W_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \qquad\qquad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} - \frac{1}{Z} \sum_n E_n^2 e^{-\beta E_n} = \langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle$$

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = (\Delta E)^2 = -\frac{\partial U}{\partial \beta} = k_\mathrm{B} T^2 \frac{\partial U}{\partial T} = k_\mathrm{B} T^2 C_V$$

Da $C_V \propto N$ und $U \propto N$ erhalten wir $\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \to 0$

Mikrokanonische und kanonische Gesamtheit sind äquivalent

Kanonische Gesamtheit: Thermodynamik

$$F(T,V,N) = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z$$

$$Z(T,V,N) = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}\bigg|_{V,N} \qquad P = -\frac{\partial F}{\partial V}\bigg|_{T,N} \qquad \mu = \frac{\partial F}{\partial N}\bigg|_{T,V}$$

u.s.w.