Hingað til

Lokað kerfi með
stórsætt ástand
(N, S), eða (U, N)
.....

Reikna fjölda smá-
sorra ástanda g

Reikna óreiðu

$$\sigma(N,U) = \ln\{g(N,U)\}$$

tengja við hitastig

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{\partial\sigma}{\partial U}\right)_N$$

til þess að finna $U(\tau)$....

síðan má finna ýmsa
eiginleika kerfisins

Höfum líka kannað áhrif
varmatengsla tveggja lokaðra
kerfa

Viljum breyta sjókerfi okkar

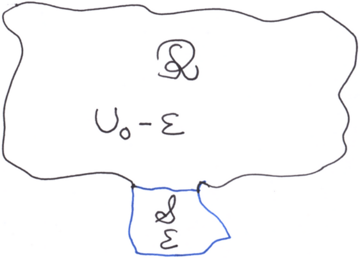
Viljum tilgreina hitastig kerfis í upphafi

Og reikna eiginleika kerfisins $\mathcal{S}$ sem fall af hitastigi

til þess að kerfi hafi vel skilgreint hitastig þarf það að vera í varmasambandi við mjög stórt kerfi, varmageymi (reservoir) $\mathcal{R}$

Hugsum lokað kerfi

$$\mathcal{R} + \mathcal{S}$$



Heildarorka U_0

Hugsum okkur að kerfið sé í skammtaástandinu s með orku Σ_s

Þá er $$g_{\mathcal{R}+\delta} = g_{\mathcal{R}} \times 1 = g_{\mathcal{R}}$$

Hlutfall líkinda fyrir Σ_1 og Σ_2 er þá

$$\frac{P(\Sigma_1)}{P(\Sigma_2)} = \frac{g_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_1)}{g_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_2)} = \frac{\exp\{\overbrace{\ln[g_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_1)]}^{\text{óreiðan}}\}}{\exp\{\ln[g_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_2)]\}}$$

$$= \frac{\exp\{\sigma_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_1)\}}{\exp\{\sigma_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_2)\}} = \exp\{\sigma_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_1) - \sigma_{\mathcal{R}}(U_0-\Sigma_2)\}$$

Nú er varmageymirinn $\mathcal{R}$ stór

$\rightarrow \varepsilon_1, \varepsilon_2 \ll U_0$ Taylor nálgun

$$\rightarrow \sigma(U_0 - \varepsilon_i) \simeq \sigma(U_0) - \varepsilon_i \left(\frac{\partial \sigma}{\partial U}\right)_{V,N} + \cdots\cdots$$

$$= \sigma(U_0) - \frac{\varepsilon_i}{\tau} + \cdots\cdots$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{P(\varepsilon_1)}{P(\varepsilon_2)} \simeq \exp\left\{-\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\tau}\right\}}$$

stuðull eða hlutfall Boltzmanns

$\rightarrow$ Notum til að byggja upp einfaldari aðferðafræði

Skilgreinum Körsummuna

$$Z(\tau) = \sum_s \exp\left\{-\frac{\varepsilon_s}{\tau}\right\}$$

(Partition function) yfir öll skammta ástönd kerfisins s.

þá eru líkindin fyrir einu gefnu skammta ástandi s

$$\boxed{P(\varepsilon_s) = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_s}{\tau}\right)}{Z}}$$

og eins og á að vera

$$\sum_s P(\varepsilon_s) = 1$$

→ mun nýtast okkur mjög vel til þess að finna eigin-leika kerfa

Meðal orka kerfisins

$$U = \langle \varepsilon \rangle = \sum_s \varepsilon_s P(\varepsilon_s)$$

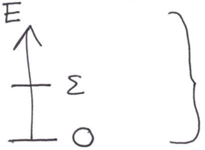
$$= \frac{\sum_s \varepsilon_s \exp\left(-\frac{\varepsilon_s}{\tau}\right)}{Z}$$

$$= \tau^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \tau}\right)$$

varmafræðilegt meðal tal
satt meðal tal
U á við $\mathcal{W}$ hér, ekki $Q+\mathcal{W}$

Dæmi: Tveggja stiga kerfi

Ein eind með tvö orku stig, (eða spuni) í tengslum við varmageymi



$$Z = \exp\left(-\frac{0}{\tau}\right) + \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\tau}\right)$$

$$= 1 + e^{-\varepsilon/\tau}$$

$$\boxed{U = \langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon/\tau}}{Z} = \frac{\varepsilon \cdot e^{-\varepsilon/\tau}}{1 + e^{-\varepsilon/\tau}}}$$

Fyrir spunakerfið hefði t.d. $\varepsilon_1 = -\frac{1}{2}\varepsilon$, $\varepsilon_2 = +\frac{1}{2}\varepsilon$

þá fæst

$$Z = \exp\left(\frac{\Sigma}{2\tau}\right) + \exp\left(-\frac{\Sigma}{2\tau}\right) = 2\cosh\left(\frac{\Sigma}{2\tau}\right)$$

og

$$\langle \Sigma \rangle = \frac{\left(-\frac{\Sigma}{2}\right)e^{\frac{\Sigma}{2\tau}} + \left(\frac{\Sigma}{2}\right)e^{-\frac{\Sigma}{2\tau}}}{Z} = -\,\varepsilon\,\frac{\sinh\left(\frac{\Sigma}{2\tau}\right)}{2\cosh\left(\frac{\Sigma}{2\tau}\right)}$$

$$= -\frac{\Sigma}{2}\tanh\left(\frac{\Sigma}{2\tau}\right)$$

Sem er sama niðurstaða og áður nema hún liggur eðlilega $\frac{\Sigma}{2}$ neðar (Sjá mynd af fyrri niðurst. á bls. 9)

Athugum varmarýmd

$$C_V \equiv \tau \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \tau} \right)_V$$

skamma stigin í kerfinu eru háð V....

Rétt bráðum lærum við að einnig má fá

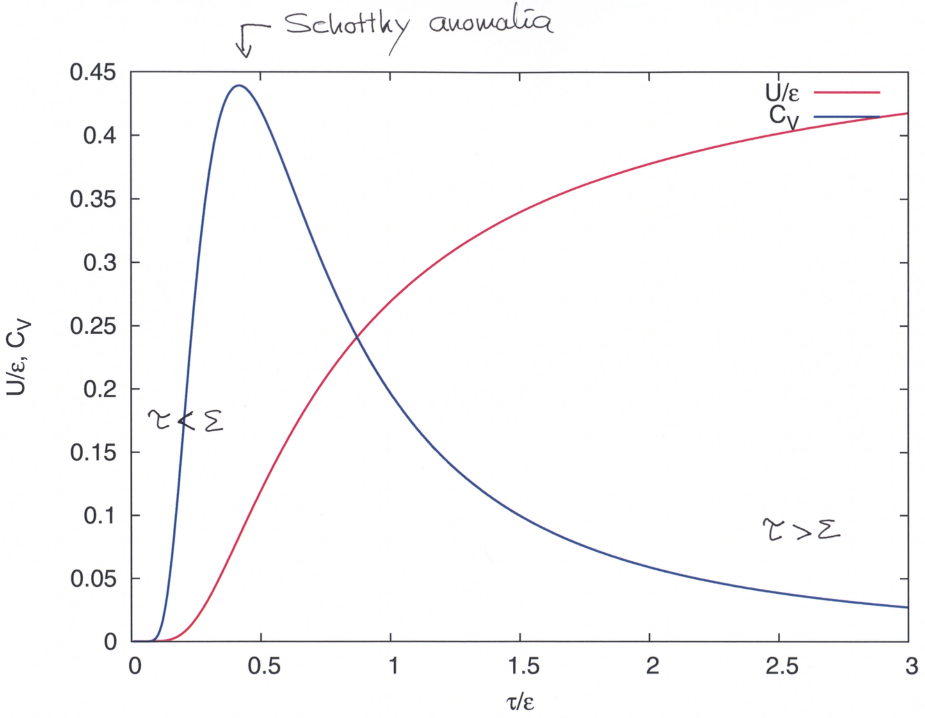
$$C_V \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial \tau} \right)_V \Longrightarrow C_V = \left(\frac{\Sigma}{\tau} \right)^2 \frac{e^{\Sigma/\tau}}{\left\{ e^{\frac{\Sigma}{\tau}} + 1 \right\}^2}$$

þ. $\tau >> \Sigma$

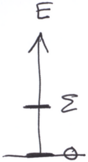
$$C_V \simeq \left(\frac{\Sigma}{2\tau} \right)^2$$

þ. $\tau << \Sigma$

$$C_V \simeq \left(\frac{\Sigma}{\tau} \right)^2 e^{-\frac{\Sigma}{\tau}}$$



Schottky anomalia
0.45
0.4
0.35
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
U/ε, C_V
U/ε
C_V
τ < ε
τ > ε
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
τ/ε



$$\lim_{\tau/\Sigma \to \infty} \left(\frac{U}{\Sigma}\right) = 0.5$$

Engin inversion

Kerfið tekur illa við varma þ. $\tau >> \Sigma$

Varmrýmdin hefur hámark sett andi $\tau \sim 0.5\Sigma$

Varmarýmdin er hverfandi þ. $\tau << \Sigma$