MIKROKANONICKÝ SOUBOR
(CVIČENÍ)

1, entropie id. plynu - bylo na přednášce (konfigurační entropie, p -> povrch 3N-dim. koule)

2, dvouhladinový systém - viz Tong / Kardar (Schottkyho anomálie, záporné teploty)

3, systém nezávislých 1D LHO
   a, klasický
   b, kvantové

4, id. plyn - pravděpodobnostní rozdělení rychlostí jedné částice (Maxwell-Boltzmann)

3a) soubor klasických neinteragujících harm. oscilátorů (1D)

- $$H(\{p_i, q_i\}) = \sum_{i=1}^{N} H_i(p_i, q_i) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2$$

$$\left(\mathcal{L} = \frac{1}{2} m\dot{q}^2 - \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \rightarrow H = \right)$$

- $S = k_B \log \Omega(E)$

1, $$\Omega(E) = \frac{1}{h^N} \int d^N p \, d^N q \, \delta\left(E - H(p,q)\right)$$

- q nelze tentokrát vyintegrovat triviálně na "objem", v H je v podobné roli jako p
- jedná se o elipsoid => vhodnou transf. převedeme na kouli => stejný problém jako id. gas

- každá částice je "zachycena" ve své potenc. jámě ⇒ nemá smysl uvažovat jejich prohazování ⇒ žádný $\frac{1}{N!}$ z konfigurační entropie! (ještě se k tomu vrátíme)

$$\Omega(E) = \frac{1}{h^N} \int_{H=E} d^N p\, d^N q \Leftrightarrow \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 = E$$

$$\Rightarrow \frac{p_i}{\sqrt{2m}} = x_i \quad \& \quad q_i \omega \sqrt{\frac{m}{2}} = x_{N+i}$$

$$\Rightarrow dp_i = dx_i \sqrt{2m} \qquad dq_i = dx_{N+i} \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}}$$

$$\Rightarrow \Omega(E) = \frac{1}{h^N} \frac{2^N}{\omega^N} \int_{\sum_{i=1}^{2N} x_i^2 = E} d^{2N} x_i = \left(\frac{2}{h\omega}\right)^N \int d^{2N} x_i\, \delta\left(E - \sum_i x_i^2\right)$$

$$= \left(\frac{2}{h\omega}\right)^N S_{2N}(1) \int_0^\infty x^{2N-1} \delta(E - x^2)\, dx = \Big/ \begin{matrix} x^2 = t \\ 2x\,dx = dt \end{matrix} \Rightarrow dx = \frac{dt}{2\sqrt{t}} \Big/ =$$

$$= \left(\frac{2}{h\omega}\right)^N \frac{S_{2N}(1)}{2} \int_0^\infty t^{N-1} \delta(E - t)\, dt = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{h\omega}\right)^N S_{2N}(1)\, E^{N-1}$$

$$S_n \simeq \frac{n\, \pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)} \Rightarrow S_{2N} = \frac{2N\, \pi^N}{N!}$$

$$\Rightarrow \Omega(E) = \frac{N\, \pi^N}{N!} \left(\frac{2}{h\omega}\right)^N E^{N-1} = \frac{E^N}{N!} \left(\frac{N}{E}\right) \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^N$$

$$\Rightarrow S(E) \simeq k_B \log \Omega(E) \simeq N k_B \log\left(\frac{E}{N\hbar\omega}\right) + N + \log\left(\frac{N}{E}\right) - \frac{1}{2}\log(2\pi N)$$

$$\Rightarrow S(E) = Nk_B \log\left(\frac{E}{N\hbar\omega}\right) + N + O(\log N)$$

- tepelná kapacita:

$$\frac{1}{T} \equiv \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{Nk_B}{E} \Rightarrow E = Nk_B T \quad \ldots \text{ cf. ekvipart. teorém}$$

$$\Rightarrow S(T) = Nk_B \log\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right) + N s_0$$

$$C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_N = T\,\frac{Nk_B}{T} = Nk_B = \text{konst.}$$

$\Rightarrow$ další klasický model, který nesplňuje Nernstův postulát

NB: $T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_N = T\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N = C$

---

36) soubor kvantových harm. oscilátorů

- $N \gg$ oscilátorů, každý se může nacházet ve stavech $|\psi_n\rangle$ s energiemi $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$
- celková energie je $E = \frac{N}{2}\hbar\omega + \hbar\omega \sum_{i=1}^{N} n_i$

$\Rightarrow \Omega(E) \equiv$ (počet způsobů, jak rozdělit $n = \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right)$ kvant mezi N oscilátorů)

$\Leftrightarrow$ # permutací $n + (N-1)$ objektů, kdy n a $(N-1)$ je nerozlišitelných

$$\Rightarrow \Omega(E) = \frac{(N+n-1)!}{n!\,(N-1)!} \sim \frac{(N+n)}{N!\,n!}$$

$$\Rightarrow \frac{S(E)}{k_B} = \log \Omega(E) \simeq (N+n)\log(N+n) - N\log N - n\log n$$

$$= \left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2}\right)\log\left(\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2}\right) - \left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right)\log\left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2}\right) - N\log N \qquad \epsilon = \frac{E}{N}$$

$$= N\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)\log\left[N\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)\right] - N\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\log\left[N\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\right] - N\log N$$

$$\frac{\epsilon^2}{\hbar^2\omega^2} - \frac{1}{4}$$

$$\frac{S(E)}{k_B} = \frac{N\epsilon}{\hbar\omega}\log\left[\frac{\epsilon/\hbar\omega + 1/2}{\epsilon/\hbar\omega - 1/2}\right] + \frac{N}{2}\log\left[\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\right]$$

$$= \frac{N\epsilon}{\hbar\omega}\log\left[\left(1 + \frac{\hbar\omega}{2\epsilon}\right)\left(1 - \frac{\hbar\omega}{2\epsilon}\right)^{-1}\right] + N\log\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega}\right) + \frac{N}{2}\log\left[1 - \frac{\hbar^2\omega^2}{4\epsilon^2}\right]$$

$\underline{C_V:}$ $\epsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)$

$$\Rightarrow c = \frac{d\epsilon}{dT} = \left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)^2\left(\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)\right)^{-2}$$

$$T \to 0 \Rightarrow \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \sim e^{\frac{\hbar\omega}{2T}} \Rightarrow c \sim T^{-2} e^{-\frac{\hbar\omega}{T}} \to 0$$

$\Rightarrow$ Nernst OK

<u>Klasická limita</u>: "$\hbar \to 0$" $\Leftrightarrow \frac{\epsilon}{\hbar\omega} \gg 1 \Leftrightarrow \frac{\hbar\omega}{2\epsilon} \equiv x \to 0$

- $\log(1-x^2) \sim -x^2$

$\log\left[\frac{(1+x)}{(1-x)}\right] \sim 2x$

$$\Rightarrow \frac{S(E)}{k_B} = N\log\left(\frac{E}{N\hbar\omega}\right) + N + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\hbar}{\epsilon}\right)^2\right)$$

$\Rightarrow$ přesně klasický výsledek