Note Title 4/16/2009

خلاصه: وقتی که یک سیستم را با روش آنسامبل میکروکانونیک مطالعه می‌کنیم، نخستین کار آن است که تابع $\Omega(N,E,X)$ را به‌دست آوریم که در آن X نشان دهنده‌ی آن مختصات [illegible] هستند که ثابت نگاه داشته شده‌اند. پس از به‌دست آوردن این تابع، انتروپی به عنوان یک تابع از این مختصات مشخص می‌شود: $S = k \ln \Omega$

سپس با استفاده از رابطه‌ی ترمودینامیکی $dE = T\,dS + J\cdot dX + \mu\, dN$:

$$dS = \frac{1}{T}\,dE - \frac{J}{T}\cdot dX + \frac{\mu}{T}\,dN$$

مختصات ترمودینامیکی سیستم را به‌دست می‌آوریم. اینک به برخی مثال‌های مختلف می‌پردازیم.

- مثال - گاز ایده‌آل.

همان‌طور که می‌دانیم، برای توصیف میکروحالت‌های هر سیستم از برهم‌کنش‌های بسیار جزئی در میان ذرات صرف‌نظر می‌کنیم. این برهم‌کنش‌ها عامل‌هایی هستند که باعث می‌شوند سیستم در نظر بین میکروحالت‌های مربوط به یک سیستم که ما آن را با مجموعه می‌شناسیم جابجا شوند.

منظور از گاز ایده‌آل مجموعه‌ای از ذرات است که با دیواره‌های ظرف و هم چنین با خودشان برخوردهای الاستیک انجام می‌دهند. این برخوردهای بسیار نادر در زمان‌های خیلی کوتاه رخ می‌دهد و نقش‌شان این است که گاز را در فضای میکروحالت‌های مربوط به یک هامیلتونی بدون برهم‌کنش بین

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}$$

پراکنده کنند.

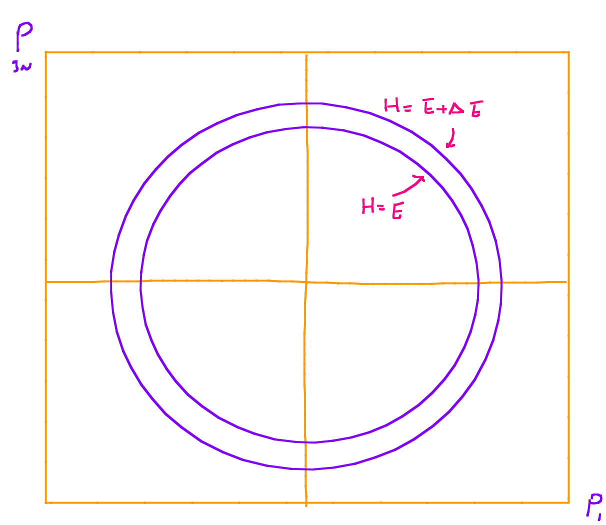
فضای فاز چنین سیستمی یک فضای $6N$ بعدی با مختصات $(\vec{r}_1,\dots \vec{r}_N, \vec{p}_1,\dots \vec{p}_N)$ است. فرض کنیم که انرژی سیستم با دقت ΔE تعیین شده است و مقدار آن بین E و $E+\Delta E$ است. در این صورت حجمی از فضای فاز که در دسترس سیستم است عبارت است از:

$$\mathcal{V} = \int_{E \le H \le E+\Delta E} d^N\vec{r}\, d^N\vec{p}$$

اگر این ناحیه را به سلول‌های کوچک تقسیم کنیم، تعداد میکروحالت‌ها متناسب با این حجم خواهد بود. بنابراین خواهیم داشت:

$$\Omega(E,\Delta E,N,V) = C_N \int_{E \le H \le E+\Delta E} d^N\vec{r}\; d^N\vec{p} \qquad 1$$

که در آن C_N یک ضریب تناسب است. خواهیم دید که این ضریب در استخراج مشخصات ترمودینامیکی مثل معادله حالت اهمیتی ندارد. انتگرال روی $\vec{r}$ها ضریب V^N را تولید می‌کند که در آن V حجم ظرفی است که سیستم در آن محصور شده است. انتگرال روی تکانه‌ها، حجم ناحیه‌ای را مشخص می‌کند که محصور بین دو پوسته کروی در فضای $3N$ بعدی است (شکل زیر).



معادله $H = E$ یا $p_1^2 + p_2^2 + \cdots + p_{3N}^2 = 2mE$، معادله سطح یک کره‌ای است در فضای $3N$ بعدی که شعاع آن $(2mE)^{1/2}$ است. اگر حجم یک کره N بعدی به شعاع R را $V_N(R)$ نشان دهیم و سطح یک پوسته کروی N بعدی به همان شعاع را $S_N(R)$ نشان دهیم داریم:

$$V_N(R) = A_N R^N$$

و

$$S_N(R) = \frac{dV_N(R)}{dR} = N A_N R^{N-1}$$

که در آن A_N ضریبی عددی مستقل از R است که مقدار آن را با محاسبه انتگرال در مراجع بدست آورده ولی باز هم مشخص است

ترمودینامیکی احتیاجی ندارد. برای مقاصد خواهیم داشت:

$$\Omega(E, \Delta E, N, V) = \mathcal{A}\, \Delta E\, V^N S_{3N}\left((2mE)^{1/2}\right)$$

که در نوشتن این رابطه تمام ضرایب عددی که ربطی به E و V ندارند در ضریب $\mathcal{A}'$ جمع کرده‌ایم. بنابراین

$$\Omega(E, \Delta E, N, V) = \mathcal{A}'\, \Delta E\, V^N (2mE)^{3N/2 - 1}$$

در نتیجه

$$S = k \ln \Omega = k\left\{ N \ln V + \frac{3N}{2} \ln E + \cdots \right\}$$

که منظور از .... جملاتی هستند که ربطی به E و V ندارند. بنابراین $\leftarrow$

$$\rightarrow \quad \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V} = \frac{1}{T} \quad \Rightarrow \quad \frac{3N}{2} k \frac{1}{E} = \frac{1}{T} \quad \longrightarrow \quad E = \frac{3N}{2} kT.$$

$$\rightarrow \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{N,E} = \frac{P}{T} \quad \Rightarrow \quad kN\frac{1}{V} = \frac{P}{T} \rightarrow PV = NkT.$$

مقایسه با معادله حالت برای گاز کامل یعنی رابطه $PV = nRT$ ، ثابت بولتزمان k را تعیین می‌کند.

$$k = \frac{R}{N_0} = 1.38\times10^{-23}\ \text{Joule/kelvin}.$$

این ثابت، ثابت بولتزمان نام دارد.

در مثال قبلی که دیدیم برای ویژگی‌های کلی سیستم از آنزامبل میکروکانونیک هستند جهت تعیین روش را دنبال می‌کنیم. یعنی حجم ناحیه در فضای فاز را تعیین می‌کنیم. ضرایب عددی که ناشی از سلول‌بندی این ناحیه هستند و چنین ضرایب عددی‌ای که ناشی از محاسبه دقیق حجم هستند، در یک ضریب کلی جمع می‌کنیم. دانستن مقدار دقیق این ضریب برای استخراج معادله حالت دیگر لازم نیست. البته برای دانستن این ضرایب عددی دانستن مقدار آنتروپی و بستگی آن به تعداد ذرات نیز مهم است.

اکنون این محاسبه را انجام می‌دهیم.

- محاسبه آنتروپی: برای آنکه آنتروپی را محاسبه کنیم می‌بایست دو کار انجام دهیم. ① حجم کره N بعدی را دقیقاً حساب کنیم.
② روش معینی برای محاسبه حجم سلول در فضای فاز و در نتیجه تبدیل حجم به تعداد میکروحالت‌ها پیدا کنیم. نخست مسئله ① را بررسی می‌کنیم:

- محاسبه حجم کره N بعدی به شعاع R ، $V_N(R)$.

انتگرال زیر را در نظر بگیرید:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx = \sqrt{\pi}$$

از ضرب کردن N انتگرال از این نوع ←

$$\rightarrow \quad I^N = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x_1^2+\cdots x_N^2)}\, dx_1\cdots dx_N = (\pi)^{N/2}$$

حال انتگرال سمت چپ را در دستگاه مختصات قطبی می‌نویسیم : ←

$$\int_0^\infty e^{-r^2} S_N(r)\,dr = (\pi)^{N/2}$$

با در نظر گرفتن $S_N(r)=\alpha_N r^{N-1}$ ←

$$\alpha_N \int_0^\infty e^{-r^2} r^{N-1}\,dr = (\pi)^{N/2}$$

بنابراین کافی است که انتگرال سمت چپ را حساب کنیم تا α_N پیدا شود. با تغییر متغیر $r^2=x$ این انتگرال تبدیل می‌شود به:

$$J \equiv \int_0^\infty e^{-x} x^{\frac{N-1}{2}} \tfrac{1}{2} x^{-1/2}\,dx$$

$$\Rightarrow J = \frac{1}{2}\int_0^\infty e^{-x} x^{\frac{N}{2}-1}\,dx = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{N}{2}\right).$$

که در آن از تعریف تابع $\Gamma(t) := \int_0^\infty e^{-x} x^{t-1}\,dx$ استفاده کردیم. بنابراین به دست می‌آوریم:

$$\alpha_N \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{N}{2}\right) = \pi^{N/2} \longrightarrow \alpha_N = \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2)}$$

و نهایتاً

$$\boxed{S_N(r) = \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} r^{N-1}} \qquad (۲)$$

با توجه به رابطه $\frac{dV_N(r)}{dr} = S_N(r)$ حجم کره N بعدی به شعاع r را نیز می‌توانیم حساب کنیم.

$$V_N(r) = \frac{2\pi^{N/2}}{N\,\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} r^N$$

با توجه به خاصیت تابع Γ ، می‌بینیم که $t\,\Gamma(t) = \Gamma(t+1)$ ، داریم $\Gamma(t+1) = t!$

$$\boxed{V_N(r) = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma\left(\frac{N}{2}+1\right)}\, r^N} \qquad (۳)$$

• تمرین: مقادیر زیر را حساب کنید: $S_2(R),\ V_2(R),\ S_3(R),\ V_3(R),\ V_4(R),\ S_4(R).$

حال به شمارش می‌پردازیم:

• حجم طبیعی برای سلول در فضای فاز: با توجه به اصل عدم قطعیت هایزنبرگ حجم یک سلول را در فضای فاز برابر h^{3N} می‌گیریم که در آن N تعداد ذرات است. منبع این انتخاب این است که برای یک ذره داریم

$$\Delta x \Delta p \sim h .$$

با این تفاصیل تابع شمارنده $\tilde{\Omega}(N,E,V)$ یعنی تعداد کل حالت‌هایی که انرژی آنها کمتر از E است را برابر خواهیم داشت با:

$$\tilde{\Omega}(E,N,V) = \int_{0\le H\le E} \left(\frac{d^3r\,d^3p}{h^3}\right)^N = \frac{1}{h^{3N}} V^N \int_{0\le \vec{p}_1^{\,2}+\dots+\vec{p}_N^{\,2}\le 2mE} d^{3N}p$$

$$\rightarrow \tilde{\Omega}(E,N,V) = \frac{1}{h^{3N}} V^N\, V_{3N}\left(\sqrt{2mE}\right)$$

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{h^{3N}} V^N \frac{\pi^{3N/2}}{\left(\frac{3N}{2}\right)!} (2mE)^{3N/2}$$

و

$$\boxed{\Omega = V^N \frac{1}{\left(\frac{3N}{2}\right)!} \left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right)^{3N/2}} \qquad (4)$$

با استفاده از رابطه $S = k\ln\Omega$ و این که $\ln N! \simeq N\ln N - N$ نتیجه می‌گیریم:

$$\boxed{S = Nk\left\{\ln V + \frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right) + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\ln\frac{3}{2}N\right\}.} \qquad 5$$

و یا با صرف‌نظر از $\frac{3}{2}$ در مقابل $\frac{3}{2}\ln\frac{3}{2}N$ $\leftarrow$

$$\boxed{S = Nk\ln\left[V\left(\frac{4\pi m E}{3h^2 N}\right)^{3/2}\right]} \qquad 6$$

• مکانیک کوانتومی و روش طبیعی برای شمارش تعداد حالات

به نظر می‌رسد که روش بالا برای شمارش تعداد حالات، ناشیانه می‌نماید! آنتروپی چندان طبیعی و خالی از اشکال نباشد. برای محاسبه تعداد حالات، حجم فضای فاز را بر h^3 تقسیم کرده‌ایم و مبنای این عمل خود را اصل عدم قطعیت قرار داده‌ایم. ولی چرا h^3 و نه $\hbar^3$؟ یا چیز دیگر؟ طبیعی است که این روش نیز ملاک کاملی دست ما نداشته باشد و راه‌حلی جز آن نتوان به این سوال پاسخ گفت.

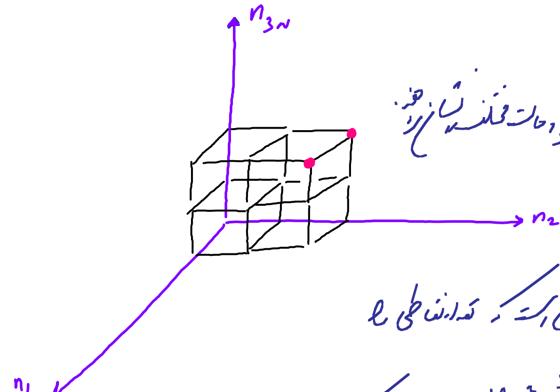
آیا روش دیگری برای شمارش تعداد حالات وجود دارد؟ پاسخ این سوال مثبت است و مبتنی است بر یک استفاده دقیق‌تر از مکانیک کوانتومی. برای این کار یک ذره را در یک اتاقک به حجم V در نظر می‌گیریم. اتاقک را به صورت یک مکعب به اضلاع L در نظر می‌گیریم لذا داریم $V = L^3$. از مکانیک کوانتومی می‌دانیم که سطوح انرژی این ذره، در این جا، عبارتند از:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right) \qquad ۷$$

که در آن n_1 ، n_2 ، n_3 اعداد صحیح نامنفی هستند. حال اگر N ذره در درون این اتاقک داشته باشیم که با یکدیگر برهم‌کنش نداشته باشند، آنگاه انرژی کل این ذرات برابر با مجموع انرژی تک تک ذرات خواهد بود. در نتیجه انرژی کل بجای 3 عدد کوانتومی با 3N عدد کوانتومی مشخص می‌شود: یعنی

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}\sum_{i=1}^{3N} n_i^2 . \qquad ۸$$

حال هر نقطه $\vec{n}$ در فضای $(n_1, n_2, \ldots\ldots n_{3N})$ فضای 3N بعدی یک ریزحالت را نشان می‌دهد. این 3N عدد مشخص می‌کنند که N ذره با چه ترتیبی در کدام سطوح انرژی توزیع شده‌اند.



نقاط قرمز رنگ ریزحالت‌های مختلف را نشان می‌دهند.

حال برای شمردن ریزحالت‌هایی که انرژی آنها از E کمتر است، کافی است که تعداد نقاطی را بشماریم که در رابطه $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}\sum_{i=1}^{3N} n_i^2 \le E$ صدق می‌کنند.

از آنجا که هر نقطه در شبکه بالا یک سلول به حجم 1 را اشغال می‌کند و از آنجا که تنها $n_i \geq 0$ مثبت را در نظر می‌گیریم، خواهیم داشت:

$$\tilde{\Omega}(N,E,V) = \frac{1}{2^{3N}} V_{3N}\left[\left(\frac{2mEL^2}{\hbar^2\pi^2}\right)^{1/2}\right]. \qquad ۹$$

ضریب $\frac{1}{2^{3N}}$ بدلیل در نظر گرفتن n_i های مثبت قرار داده شده است. با در نظر گرفتن رابطه (۳) و اینکه $V=L^3$ بدست می‌آوریم:

$$\tilde{\Omega}(N,E,V) = \frac{1}{2^{3N}} \frac{\pi^{3N/2}}{\left(\frac{3N}{2}\right)!}\left(\frac{2mE}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3N/2} V^N$$

$$\boxed{\tilde{\Omega}(N,E,V) = V^N \frac{1}{\left(\frac{3N}{2}\right)!}\left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right)^{3N/2}}$$ و

که با رابطه‌ی ۶ یکی است.

- پارادکس گیبس Gibbs Paradox.

عبارتی که برای آنتروپی گاز به دست آورده‌ایم، یک اشکال اساسی دارد. عبارت ۶ نشان دهنده‌ی یک کمیت غیر فزونور است.

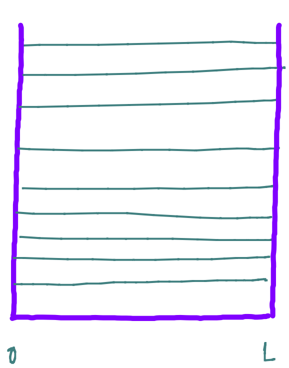
در واقع عبارت ۶ نشان می‌دهد که $S(\lambda E,\lambda N,\lambda V) \neq \lambda S(E,N,V)$.

اگر خوب به عبارت ۶ نگاه کنیم، متوجه اشکال و یک راه نه چندان بنیادی ولی صحیح برای آن پیدا می‌کنیم. در واقع اگر بجای V، در فرمول آنتروپی عبارت $\frac{V}{N}$ داشته باشیم، آنگاه S یک کمیت فزونور می‌شد. چنین فاکتوری را می‌توان با تقسیم تعداد میکروحالات یعنی $\tilde{\Omega}$ بر $N!$ ایجاد کرد. در واقع اگر این کار را بکنیم و از تقریب استرلینگ $\ln N! = N\ln N - N \simeq N\ln N$ استفاده کنیم، خواهیم داشت:

$$S \longrightarrow kN\ln\left[\frac{V}{N}\left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right)^{3/2}\right].$$

که یک کمیت فزونور است.

چه دلیلی برای تقسیم $\tilde{\Omega}$ بر $N!$ داریم؟ چرا این تقسیم باعث شمارش صحیح میکروحالات‌ها می‌شود؟ آیا همواره و در همه شرایط این تقسیم درست است؟ جواب به این سوال نیاز است به تصویر کوانتمی‌ای از میکروحالات نگاه کنیم. برای سادگی فرض کنید که با ذراتی در یک اتاق یک بعدی سروکار داریم که هر تراز انرژی آن با یک عدد کوانتومی مشخص می‌شود. (شکل روبرو)



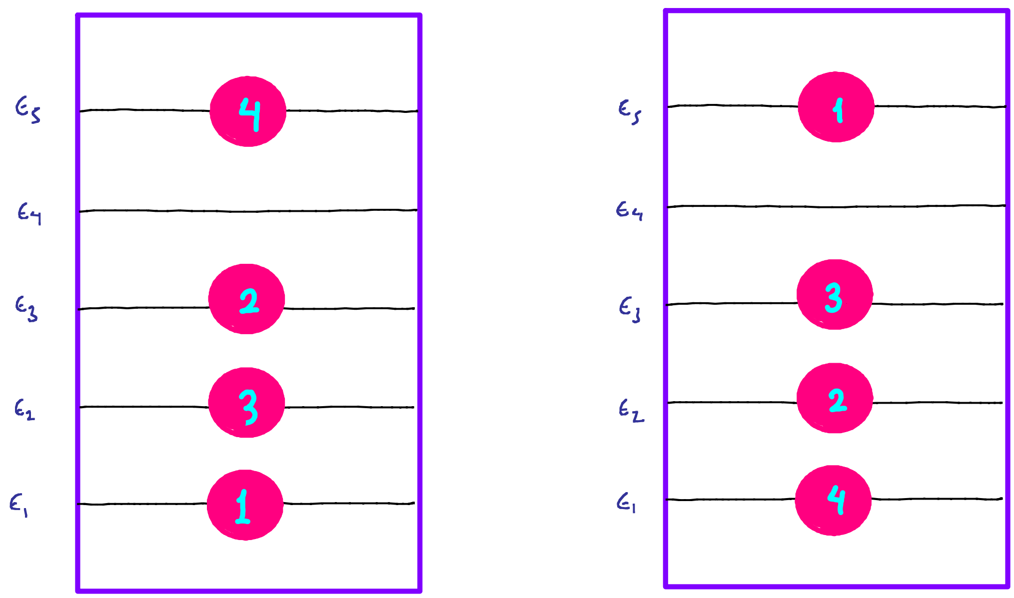
رابطه‌ی ۸ برای N ذره که در چنین اتاقی به صورت آزاد حرکت کنند به صورت زیر در می‌آید:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + \dots n_N^2\right)$$

که در آن n_i مشخص می‌کند ذره‌ی i ام در کدام تراز انرژی قرار دارد.

در گروه‌ها، شمارش قبلی هر N تایی $(n_1, n_2, \ldots\ldots n_\infty)$ را یک میکروحالت جداگانه در نظر گرفته بودیم.

به عنوان مثال برای $N=4$، فرض کرده‌ایم که $(1, 3, 2, 5)$ و $(5, 2, 3, 1)$ دو میکروحالت متفاوت هستند، شکل زیر:



و حال آنکه ذرات میکروسکوپی واقعاً برچسبی بر خود ندارند که ما بتوانیم این دو میکروحالت را از یکدیگر تمیز دهیم. بنابراین نحوه صحیح شمارش میکروحالت‌ها آن نیست که بگوییم که هر ذره در کدام تراز است، بلکه این است که بگوییم در هر تراز انرژی چند ذره داریم. شکل زیر:

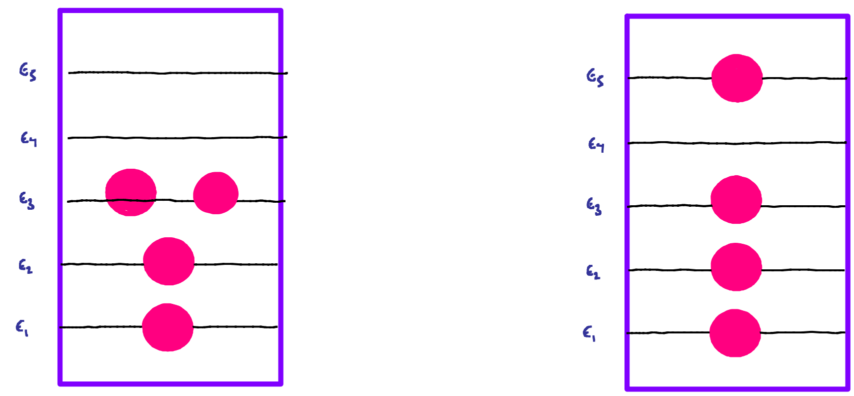
یعنی هر میکروحالت با اعداد

$$m = (m_1, m_2, m_3, m_4, \ldots\ldots m_\infty)$$

مشخص می‌شود که در آن m_n تعداد ذرات موجود در تراز انرژی ϵ_n است. واضح است که

$$m_1 + m_2 + m_3 + \cdots m_\infty = N.$$

شکل زیر دو میکروحالت مختلف را برای یک سیستم چهار ذره‌ای نشان می‌دهد.



$n = (1,1,2,0,0)$ $\qquad\qquad$ $n = (1,1,1,0,1)$.

دو میکروحالت مختلف از یک سیستم ۴ ذره‌ای.

بنابراین، برای شمارش صحیح میکروحالت‌ها، هر یک میکروحالت‌ها را برحسب پارامترهای n_i که آنها را اعداد اشغال occupation numbers می‌نامیم، شناسایی کنیم. این کار را که اساساً با روش گذشته‌مان متفاوت است، در یکی از آینده‌ها انجام خواهیم داد. اما موقعی که ذرات در ترازهای گوناگون پخش می‌شوند به طوری که n_i ها یا 0 هستند یا 1، می‌توان میکروحالت‌ها را به همان روش قبل شمرد و سپس برای جلوگیری از تکرار، تعداد آنها را بر $N!$ تقسیم کنیم، زیرا هر میکروحالت را $N!$ بار شمرده‌ایم. این اتفاق که n_i ها یا یک باشند و یا صفر، معمولاً در دماهای بالا اتفاق می‌افتد. در دما آنقدر بالایی که ترازها از n_i ها بیشتر شوند، دقیقاً جایی است که آثار کوانتومی در رفتار گاز ظاهر نمی‌شوند و گاز می‌تواند از روش‌های کلاسیک پیروی کند. با اصلاحات گفته شده در نظر فوق رفتار گاز را توضیح داد.

گاز ایده‌آل نسبیتی:

برای گازی که بسیار داغ باشد و سرعت ذرات آن قابل مقایسه با سرعت نور باشد، مثل گاز در یک پلاسما یا گازی که درون یک ستاره قرار دارد، رابطه انرژی-تکانه برای هر ذره به جای $E=\frac{p^2}{2m}$، به صورت $E=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}$ نوشته می‌شود.

اگر $p \gg mc$ باشد می‌توان نوشت.

$$E \simeq pc.$$

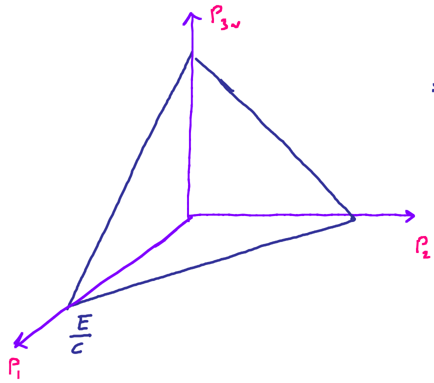
هامیلتونی را خواهیم داشت:

$$\mathcal{H} = p_1 c + p_2 c + \dots + p_N c$$

$$\Omega(E, \Delta E, N, V) = \Delta E \frac{\partial}{\partial E} \tilde{\Omega}(E, V, N)$$

که در آن

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{h^{3N}} V^N \int_{0 \le p_1 + \dots p_N \le \frac{E}{c}} d^N \vec{p}$$



انتگرال روی فضا را حجم محدود بین در هرم $3N$ بعدی نشان می‌دهد. شکل زیر:

داریم:

$$\tilde{\Omega}(E,V,N) = \frac{1}{h^{3N}} V^N \int_{0 \le p_1 + p_2 + \dots p_N \le \frac{E}{c}} p_1^2 dp_1 \dots p_N^2 dp_N \, d\Omega_1 \dots d\Omega_N$$

انتگرال روی $d\Omega_i$ ها $(4\pi)^N$ را می‌دهد و با تغییر متغیر $p_i = \frac{E}{c} x_i$ انتگرال بالا تبدیل می‌شود:

$$\tilde{\Omega}(E,V,N) = \frac{1}{h^{3N}} V^N (4\pi)^N \left(\frac{E}{c}\right)^{3N} \int_{0 \le x_1 + \dots x_N \le 1} x_1^2 x_2^2 \dots x_N^2 \, dx_1 dx_2 \dots dx_N$$

اگر این انتگرال را با A_N نشان دهیم خواهیم داشت:

$$\boxed{\tilde{\Omega}(E,V,N) = A_N (4\pi V)^N \left(\frac{E}{hc}\right)^{3N}}$$

و از اینجا

$$S = k\ln\Omega = k\left(N\ln V + 3N\ln E\right) + \cdots$$

در نتیجه:

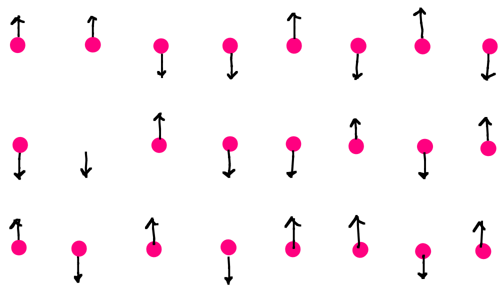
$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} = \frac{1}{T} \longrightarrow E = 3NkT$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{N,V} = \frac{P}{T} \longrightarrow PV = NkT.$$

بنابراین گاز فوق نسبیتی از همان ساده‌ترین حالت گاز ایده‌آل تبعیت می‌کند ولی رابطه‌ی انرژی آن تغییر یافته است.

- مدل ساده‌ای برای مواد مغناطیسی.

یک ماده‌ی پارامغناطیس متشکل از دوقطبی‌های مغناطیسی دائمی است. اندازه‌ی این دوقطبی‌ها مقدار μ است ولی جهت آن‌ها در غیاب میدان مغناطیسی کاملاً درهم و برهم است به طوری که مقدار مغناطش کل برابر با صفر است. میدان مغناطیسی باعث می‌شود که دوقطبی‌ها در امتداد میدان قرار بگیرند ولی این هم‌راستا شدن به دلیل افت و خیز حرارتی کامل نیست. بنابراین میزان مغناطش ناشی از موازنه‌ی دو عامل است: یکی میدان مغناطیسی که سعی می‌کند دوقطبی‌ها را نظم بدهد و دیگری دما که آن‌ها را بی‌نظم می‌کند. پارامتری که این موازنه را تعیین می‌کند بایستی یک پارامتر بدون بعد باشد که از μB و T ساخته شده باشد و این پارامتر چیزی نیست جز $\frac{\mu B}{kT}$. قبل از آن که این مسئله را به صورت تحلیلی دقیق مطالعه کنیم، و برای سادگی فرض می‌کنیم که ممان‌های مغناطیسی در امتداد z قرار گرفته‌اند و تنها جهت آن‌ها تصادفی است. بعداً می‌توانیم مدل دوقطبی‌هایی را که در آن‌ها امتداد ممان‌ها نیز تصادفی است نیز مطالعه کنیم.



یک مدل سیستمی متشکل از N ممان مغناطیسی در میدان مغناطیسی به اندازه‌ی B به صورت:

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \mu_i \cdot B$$

که در آن $\mu_i = \pm \mu$. در آنسامبل میکروکانونیک، می‌بایست Ω را برای انرژی ثابت E، تعداد ذرات N پیدا کنیم. اگر N_+ تعداد ممان‌های + و N_- تعداد ممان‌های - باشد داریم:

$$\begin{cases} E = -\mu B (N_+ - N_-) \\ N = N_+ + N_- \end{cases}$$

که از آن به دست می‌آوریم:

$$\begin{cases} N_- = \frac{1}{2}\left(N + \frac{E}{\mu B}\right) \\ N_+ = \frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{\mu B}\right) . \end{cases} \qquad (۳)$$

در نتیجه خواهیم داشت:

$$\Omega = \binom{N}{N_+} \rightarrow S = k \ln \Omega = k \{ \ln N! - \ln N_+! - \ln N_-! \}$$

$$S = k \{ N \ln N - N - N_+ \ln N_+ + N_+ - N_- \ln N_- + N_- \}$$

از آنجا که $N = N_+ + N_-$ ، این معادله به شکل زیر ساده می‌شود:

$$S = k \{ N \ln N - N_+ \ln N_+ - N_- \ln N_- \}$$

که در آن N_+ و N_- از رابطه‌ی (۳) تعیین می‌شوند.

با استفاده از رابطهٔ

$$dE = T\,dS + M\,dB \qquad (٤)$$

و این که $\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,B} = \frac{1}{T}$ بدست می‌آوریم:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial N_+}\left(\frac{\partial N_+}{\partial E}\right)_{N,B} + \frac{\partial S}{\partial N_-}\left(\frac{\partial N_-}{\partial E}\right)_{N,B}$$

و از آنجا

$$\frac{1}{T} = -k \ln N_+ \left(\frac{-1}{2\mu B}\right) - k \ln N_- \left(\frac{1}{2\mu B}\right) = \frac{1}{2\mu B} \ln \frac{N_+}{N_-}$$

و یا

$$\frac{1}{T} = \frac{k}{2\mu B} \ln\left(\frac{N\mu B - E}{N\mu B + E}\right)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\boxed{E = N\mu B \tanh \frac{\mu B}{kT}}$$

این رابطه انرژی توسط همان ۲ حالت را در میدان مغناطیسی بدست می‌دهد.

از آنجا که $E = MB$ ، می‌توانیم مغناطش توسط را نیز بدست آوریم. یعنی

$$\boxed{M = N\mu \tanh \frac{\mu B}{kT}}$$

ما برای آزمایش بیشتر اثبات که M را با استفاده از مشتق‌گیری برای آنتروپی به دست آمده تعیین کنیم:

از رابطه ٤ بدست می‌آوریم:

$$\frac{M}{T} = -\frac{\partial S}{\partial N_+}\left(\frac{\partial N_+}{\partial B}\right)_{E,N} - \frac{\partial S}{\partial N_-}\left(\frac{\partial N_-}{\partial B}\right)_{E,N}$$

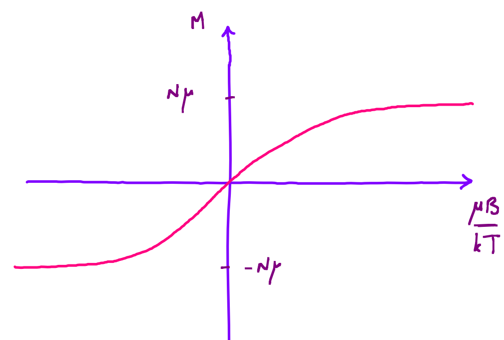
$$\frac{M}{T} = k \ln N_+ \left(\frac{+E}{2\mu B^2}\right) + k \ln N_- \left(\frac{-E}{2\mu B^2}\right) = \frac{kE}{2\mu B^2} \ln \frac{N_+}{N_-}$$

و یا

$$\rightarrow \frac{M}{T} = \frac{kE}{2\mu B^2} \ln \frac{N\mu B - E}{N\mu B + E} \implies \frac{M}{T} = \frac{E}{2\mu B^2} \frac{2\mu B}{T} \Rightarrow M = \frac{E}{B}.$$

$$M = N\mu \tanh \frac{\mu B}{kT}.$$

شکل زیر مغناطش ترسیم‌شده را برحسب پارامتر $\frac{\mu B}{kT}$ بدست می‌دهد.



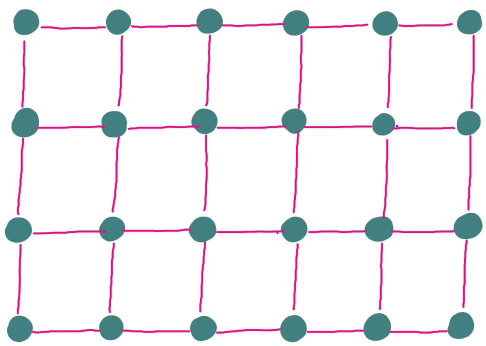
علیرغم سادگی بیش از اندازه‌ای که مدل نظری ما داشت، شکل فوق تطابق کیفی خوبی با آنچه در آزمایشگاه از رفتار مواد مغناطیسی شاهدیم دارد.

• تمرین: مسئله قبلی را با درنظرگرفتن اینکه هر ممان مغناطیسی می‌تواند جهت‌های دلخواه انتخاب کند، حل کنید. از انتگرال [illegible] استفاده کنید.

• مثال: نوسانگرهای هارمونیک کلاسیک

مثالی که می‌خواهیم حل کنیم، ساده‌ترین مدل برای نوسانات اتم‌ها در یک جامد بلوری است. در یک جامد اتم‌ها در سر جای خود تقریباً ثابت‌اند و حول نقطه تعادلشان نوسان می‌کنند. نوسانات اتم‌ها با یکدیگر وابسته است. می‌توانیم به طریقی حالت این نوسانات را به شکل زیر بنویسیم:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j = 1}^{N} k_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \qquad (۵)$$



که در آن $\vec{r}_i$ بردار جابجایی اتم iام و $\vec{p}_i$ تکانه‌ی آن است.

در دمای کم، دامنه‌ی نوسانات اتم‌ها کم و در دمای زیاد دامنه‌ی نوسانات اتم‌ها زیاد است. افزایش دما باعث افزایش دامنه‌ی نوسانات می‌شود.

حال انتگرال متغیرهای فاز نیز مطابق مثال‌های گذشته می‌بایست تحت زیر را حساب کنیم:

$$\Omega(E, \Delta E; N, V) = A \int_{E \leq H \leq E+\Delta E} d^N \vec{r}\, d^N \vec{p}$$

برای محاسبه‌ی انتگرال از تغییر متغیر استفاده می‌کنیم. این تغییر متغیر می‌بایست چنان باشد که بر حسب متغیرهای جدید هامیلتونی به صورت ساده‌ای درآید. همواره می‌توان یک هامیلتونی مثل (۵) را با یک تغییر متغیر کانونیک

$$(\vec{r}_i, \vec{p}_i) \longrightarrow (Q_\alpha, P_\alpha) \qquad \alpha = 1 \dots 3N$$

به صورت قطری زیر درآورد:

$$H = \sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{P_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_\alpha^2 Q_\alpha^2$$

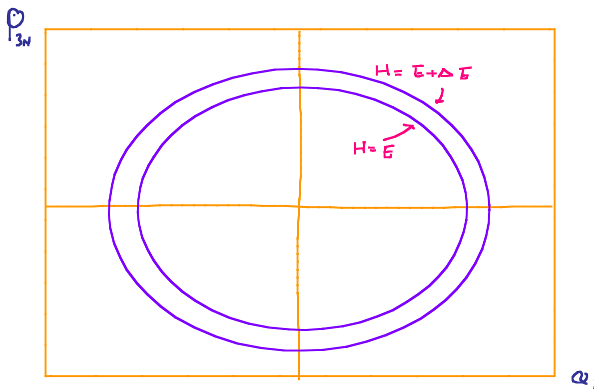
که در آن ω_α ها ویژه مقادیر ماتریس برهم‌کنش هستند. این ویژه مقادیر فرکانس‌های طبیعی این سیستم هستند. بنابراین سیستم اولیه به صورت مجموعی از نوسانگرهای هارمونیک بدون برهم‌کنش در می‌آید. این نوسانگرها، در واقع نشان دهنده‌ی نوسانات مدهای طبیعی سیستم هستند.

در حال حاضر نیازی به دانستن این ω_α ها برای محاسبه نداریم. ما به دنبال Ω هستیم که به صورت زیر در می‌آید:

$$\Omega = A \int_{E < H < E+\Delta E} d^{3N} Q\, d^{3N} P$$

با رجوع به شکل ۲ میبینیم حجم ناحیهٔ مورد نظر، حجم بین دو لایهٔ بیضی‌گون است که به صورت زیر حساب می‌شود:

$$\Omega = \mathcal{A}\int_{E\le H\le E+\Delta E} d^{3N}Q\, d^{3N}P = \Delta E\,\frac{\partial}{\partial E}\left(\mathcal{A}\int_{0\le H\le E} d^{3N}Q\, d^{3N}P\right).$$



انتگرال طرف راست حجم داخل یک بیضی‌گون است.

معادلهٔ رویهٔ بیضی‌گون عبارت است از:

$$\sum_{\alpha=1}^{3N} \frac{P_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_\alpha^2 Q_\alpha^2 = E$$

و یا

$$\sum_{\alpha=1}^{3N}\left(\frac{P_\alpha^2}{2mE} + \frac{Q_\alpha^2}{\left(\frac{2E}{m\omega_\alpha^2}\right)}\right) = 1.$$

این معادله، رویهٔ بیضی‌گونی را نشان می‌دهد با 3N نیم‌قطر به اندازهٔ $(2mE)^{1/2}$ و 3N نیم‌قطر به اندازهٔ $\sqrt{\frac{2E}{m\omega_\alpha^2}}$ ، $\alpha=1\ldots 3N$. بنابراین حجم داخل بیضی‌گون برابر است با:

$$vol = \alpha_{3N}\sqrt{(2mE)}^{3N}\prod_{\alpha=1}^{3N}\sqrt{\left(\frac{2E}{m\omega_\alpha^2}\right)}$$

$$\mathrm{Vol} = \sigma_{3N}\,(2E)^{3N} \prod_{\alpha=1}^{3N} \omega_\alpha^{-1}$$ دیا

و در نتیجه ←

$$\Omega(E,N,\Delta E) = \Delta E \;\; c_A \;\; 6N\,(2E)^{3N-1} \prod_{\alpha=1}^{3N} \omega_\alpha^{-1}$$

$$\rightarrow \quad S = k(3N-1)\ln E + \cdots \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{T} = \frac{3kN}{E}$$

دیا

$$E = 3NkT.$$

این رابطه چیزی را بیان می‌کند که می‌توان آن را به کمک آزمایش سنجید. اگر ظرفیت گرمایی یک جامد ناشی از نوسانات اتم‌ها باشد، این رابطه بیان می‌کند که ظرفیت گرمایی $C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = 3Nk$ در همه دماها ثابت و برابر با Joule/Kelvin $3Nk = 3nR$ است.

خوشبختانه این مقدار به نوع جامد (نوع پیوندها) بستگی ندارد. در سال‌های پایانی قرن نوزدهم این موضوع به یکی از معماهای بزرگ فیزیک کلاسیک بدل شد، زیرا آزمایش‌ها نشان می‌دادند که ظرفیت گرمایی هر جامدی با کاهش دما به سمت صفر میل می‌کند. پاسخ به راز این معما یکی از مسیرهایی بود که نهایتاً به کشف مکانیک کوانتومی انجامید.

ما می‌توانیم به همین ترتیب با در نظر گرفتن آنسامبل میکروکانونیک به مطالعه مثال‌های متعددی بپردازیم. چنانکه دیدیم در هر مورد بایست بستگی Ω یعنی تعداد کل حالت‌های میکرو با انرژی و دیگر پارامترها را تعیین کنیم. تعیین این بستگی معمولاً برای سیستم‌های بدون برهم‌کنش آسان است اگر چه تعیین بستگی Ω به N یعنی تعداد ذرات مستلزم یک کار هندسی نسبتاً دشوار است. این دشواری باعث شد که ما نتوانیم بستگی آنتروپی را به تعداد ذرات پیدا کنیم. هم چنین در مورد سیستم‌های با برهم‌کنش هم بایستی Ω و بستگی آن به انرژی

دیگر، پایداری کم ممکن است بسیار دردآور باشد.

آیا می‌توان به جای آنزامبل میکروکانونیک از یک آنزامبل دیگر استفاده کرد که به روش ساده‌تری ما را پیش می‌برد؟ پاسخ این سوال خوشبختانه مثبت است. آنزامبل جدید، آنزامبل کانونیک نام دارد که در فصل بعد به آن می‌پردازیم.