Statistik / Thermodynamik

VL Mi $12^{\underline{15}}$ – $14^{\underline{00}}$ (15 Minuten länger,
Fr. $08^{\underline{15}}$ – $10^{\underline{00}}$ wenn nötig)

Sprechstunde 13 – 14 Di, EW 742

(nicht am 21. 4.)

1. Einführung

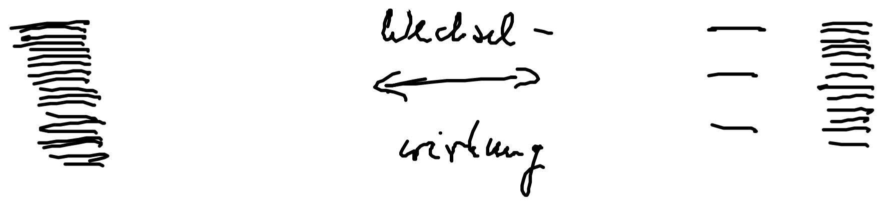
1. 1. Grundlegende Konzepte

Aufgabe: Übergang v. Mechanik / QM isolierter Systeme
zu Systeme in Umgebung (makroskopisch!)
dh. typischerweise 10^{23} Teilchen behandeln

bedeutet i.a. • Übermaß an Information!
• nicht exakt lösbar!

Antwort auf dieses Problem: man misst nur einige Observablen G_ν

makroskopische Umgebung — interessante System



sehr dichte E-Spektrum mit viele Freiheitsgrade

von wenige Zustände bis zu sehr viele Zustände engl.

Bsp:

Bsp. Druckmessung

(i) Umgebung wird durch Parameter λ_ν beschrieben

Beispiele: Temperatur, chemische Potential

(ii) System wird durch die beobachtbare Größen Observable G_ν

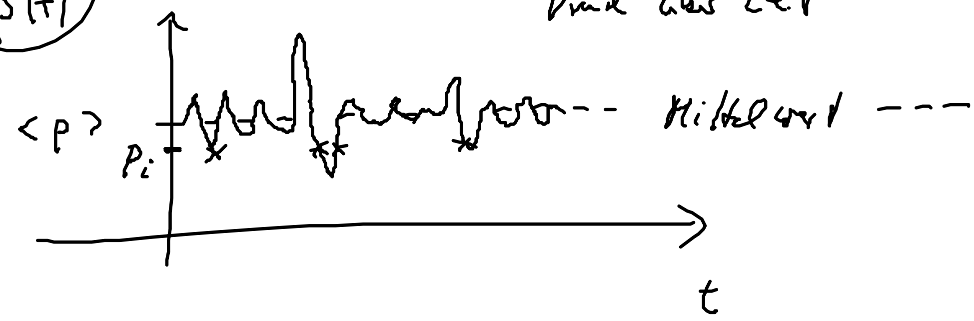
Beispiel: Druck, Energie

(iii) externe Felder die am System angreifen h_κ

Beispiel: elektrische Felder, Volumen

- Mangel an Info über Vielteilchensystem wird mit Mangel (bewußt gewählt) an Fragen beantwortet
- Strafe: wenige Observable schwanken

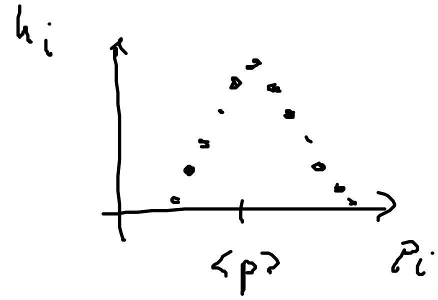
p(t)



<u>Hoffnung</u>: Mittelwert beschreibt das System gut

a) zeitlicher Mittelwert $\langle p \rangle_t$

aus zeitl. Beschreibung ein <u>Histogramm</u> definieren



h_i relative Häufigkeit $= \frac{N_i}{N}$

N_i : Zahl d. Auftretens von p_i

N : Gesamtzahl d. Versuche

$$h_i \underset{N \to \infty}{\longrightarrow} w_i$$: Wahrscheinlichkeiten

alternative Berechnung d. Mittelwerts $\langle p \rangle_E = \sum_i w_i p_i$

man kann 2 Arten v. Mittelwert definieren:

zeitlichen $\langle p \rangle_t$, Ensemblemittelwert $\langle p \rangle_E$

1 System wird für N-Zeitpunkte gemessen

N Systeme werden 1mal gemessen

$$\boxed{\text{grundlegende Arbeitshypothese: Ensemblemittel} = \text{Zeitmittel}}$$

„Ergodenhypothese"

gilt nicht i.a., aber: für wechselwirkende Systeme gültig

$$\langle g_\nu \rangle_t = \langle g_\nu \rangle_E$$

statistische Physik beschäftigt sich mit der Ableitung von Gesetzen f. makroskopische Systemgröße unter dem Einfluß der Umgebungsparameter.

Grundfrage: Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten im Ensemble

$w_i = w_i$ (Umgebung)

Gleichgewichts-statistische Physik:

nach einer gewissen Zeit ohne das Einschalten externer Felder

wird $\langle f_v \rangle$ = konstant

Nichtgleichgewichts-statistische Physik

ein offenes System wird d. externe Felder

aus dem Gleichgewicht gebracht

1.2. kurzer historischer Abriß

- A. Avogadro (1776-1856)

  Zustandsgleichung ideales Gas

$$\underbrace{p = \frac{N}{V} k T}$$

N - Teilchenzahl

V - Volumen

T - Temperatur

k - Boltzmann Konstante

(dient Festlegg. T-Skala)

$$p = p(T)$$

System $\nearrow$ $\uparrow$ Umgebungsgröße

„thermische Zustandsgleichung"

- J. Loschmidt (1821-1895)

  Avogadro/Loschmidt Zahl:

  wieviele Teilchen/Atome findet man in makroskop. Volume:

$12\,g\ {}^{12}C \rightarrow 6 \cdot 10^{23}$ Teilchen

- J. C. Maxwell (1831 - 1879)

Wahrscheinlichkeitsverteilg. des idealen Gases

Energie d. Teilchen

Bsp: $W_i \rightarrow w(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 \, e^{-\frac{mv^2}{kT}}$

thermische Energie

$w(v)\,dv$ Wahrscheinlichkeit im Intervall dv ein Teilchen mit v zu finden

- J. W. Gibbs (1839 - 1903)

Wahrscheinlichkeit zur Einnahme eines Systemzustands $|i\rangle$

$w_i \sim e^{-\varepsilon_i/kT}$, wobei ε_i die Energie von $|i\rangle$ ist

Normierung: $w_i = \dfrac{e^{-\varepsilon_i/kT}}{Z}$

Zustandssumme: zentral, weil Potentialeigenschaften $p = \frac{\partial}{\partial V} f(Z)$

- L. Boltzmann (1844 - 1906)

Einführg. Entropie $S = -k \sum_i w_i \ln w_i$

Brücke zwischen makroskop. Größen und Wahrscheinlichkeiten W_i

$$\boxed{T^{-1} = \frac{\partial S}{\partial E}}$$ Temperaturdefinition!

- C. Shannon (1946)

  Gibbs Ansatz für $w_i \sim e^{-\varepsilon_i / kT}$

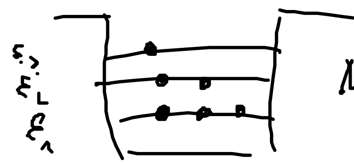
  kann mit S = maximal gerechtfertigt werden

- E. Fermi (1901–1954)

  N. Bose (1894–1955)

n_ε mittlere Besetzungszahl von Teilchen in einem Zustand $|\varepsilon\rangle$ bestimmt

Vielteilchensystem



$N=6$

Bose / Fermiverteilungen:

$$n_\varepsilon = \frac{1}{e^{\frac{(\varepsilon-\mu)}{kT}} \pm 1}$$

μ: chemisches Potential

+ Fermionen (spin $\frac{1}{2}$-zahlig)

− Bosonen (spin ganzzahlig)

• M. Planck (1858–1947)

Strahlungsformel: $$u(\omega) = \frac{(4\pi)^2}{c^3}\,\frac{\hbar\omega\,\omega^2}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}$$

E-Dichte über Frequenz

• P. Debye (1884–1966)

spezifische Wärme d. Festkörpers
(Ionenschwingungen)

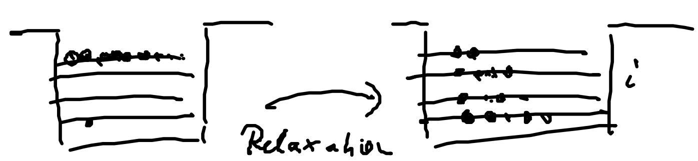
$c_v(T) = 3kN$ — klassisch (T hoch)

$c_v(T) \sim T^3$ — quantenmechanisch (T tief)

• bisher ohne Wechselwirkung

einfachster Ansatz: „Boltzmann" ähnliche bzw. „Mastergleichung"

Ratengleichungen:



Weg von Nichtgleichgewicht ins Gleichgewicht u_E

$$\dot{n}_i(t) = -\sum_e \underbrace{\Pi_{i\to e}}_{\frac{1}{\text{Zeit}} \,\hat{=}\, \text{Rate}} n_i(t) + \sum_e \Pi_{e\to i}\, n_e(t)$$

Besetzungszahl

- Verallgemeinerung der Schrödingergl. in eine Umgebung

J. v. Neumann (1903 - 57)

$$i\hbar |\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle \xRightarrow{\text{Umgebg.}} i\hbar \dot{\rho} = [H, \rho]$$

statistischer Operator

$$\langle O\rangle = \langle\psi|O|\psi\rangle \Longrightarrow \langle G_\nu\rangle = \mathrm{sp}(G_\nu \rho)$$