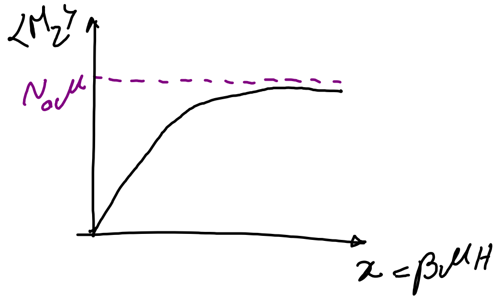
جلسه نهم

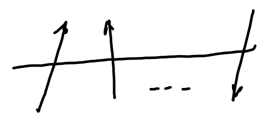
مطالعه کوانتومی پارامغناطیس ⟵ دمای منفی   فصل چهارم: آنسامبل کانونیک بزرگ   تعادل بین یک سیستم و منبع انرژی و ذره

اتلاف در آنسامبل   محاسبه کمیات ترمودینامیکی

مطالعه کوانتومی پارامغناطیس

$$\langle M_z \rangle = \frac{N_0}{\beta}\frac{\partial}{\partial H}\ln Q$$





$$\vec{\mu} = \frac{eg}{2mc}\vec{J} \quad , \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$l=0 \longrightarrow \vec{J}=\vec{S} \longrightarrow g=2 \qquad\qquad g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

$$S=0 \longrightarrow \vec{J}=\vec{L} \longrightarrow g=1$$

میدان مغناطیسی $\vec{H}$ در جهت $\hat{z}$ اعمال می‌شود.

$$E = -\vec{\mu}\cdot\vec{H} = \frac{-eg}{2mc}\vec{J}\cdot\underbrace{\vec{H}}_{H\hat{z}} = \frac{-eg\hbar}{2mc}H\, J_z/\hbar \quad m_j$$

$$J_z|j,m\rangle = m_j\hbar\,|j,m\rangle$$

$$\langle j,m|\,J_z/\hbar\,|j,m\rangle = m_j$$

مگنتون بوهر: $\mu_B \equiv \dfrac{e\hbar}{2mc} \Longrightarrow E = -g\mu_B m_j H$

$\longrightarrow -j \le m_j \le +j$

$$Q_1 = \sum_r e^{-\beta E_r} = \sum_{m_j=-j}^{+j} e^{+\beta g \mu_B m_j H} = \underbrace{e^{\beta\mu_B j H g} + e^{\beta\mu_B g (j-1) H} + \dots + e^{-\beta\mu_B g H}}_{2j+1 \text{ جمله}}$$

$$x = \beta g \mu_B H j \Longrightarrow Q_1 = e^{x} + \underbrace{e^{x - x/j}}_{e^{x}e^{-x/j}} + \dots + e^{-x}$$

یک تصاعد حسابی با قدر نسبت $q = e^{x/j}$

$a = e^{-x}$

$$a + aq + aq^2 + \dots = \frac{a(1-q^n)}{1-q}$$

$$\Longrightarrow Q_1 = \frac{e^{-x}\left(1 - e^{x/j\,(2j+1)}\right)}{1 - e^{x/j}}$$

$$Q_1 = \frac{e^{-x} - e^{-x+2x+x/j} \quad \times e^{-x/2j}}{1 - e^{x/j} \quad \times e^{-x/2j}} = \frac{e^{-x-x/2j} - e^{x+x/2j}}{e^{-x/2j} - e^{x/2j}} = \frac{\sinh(x + x/2j)}{\sinh(x/2j)}$$

$$Q_N = (Q_1)^N$$

$\ln Q_1$ یک عبارتش: $\ln \sinh(x + x/2j)$

$$\overline{M}_z = \langle M_z \rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial H}\ln Q_N = \frac{N}{\beta}\frac{\partial}{\partial H}\ln Q_1 = N g \mu_B j B_j(x)$$

$$\overset{\beta g \mu_B j}{\frac{\partial x}{\partial H}} \; \frac{\cosh(x + x/2j)}{\sinh(x + x/2j)}$$

$$x = \beta g \mu_B j H$$

تابع بریلوین $B_j(x) = \left(1 + \frac{1}{2j}\right)\coth\left\{x\left(1 + \frac{1}{2j}\right)\right\} - \frac{1}{2j}\coth\frac{x}{2j}$

الف) $x \gg 1$: میدانهای بزرگ و دماهای کم $\Rightarrow B_j(x) \simeq \left(1 + \frac{1}{2j}\right) - \frac{1}{2j} \simeq 1$

$$\coth x = \frac{e^{+x} + e^{-x}}{e^{x} - e^{-x}} \underset{x \to \infty}{\simeq} 1$$

$\Rightarrow \overline{M}_z = N g \mu_B j$: اشباع مغناطیسی

یعنی همه ذرات با میدان هم جهت شده‌اند.

ب) $x \ll 1$: میدانهای کوچک و دماهای بزرگ : $\coth x \simeq \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$

$$\Rightarrow B_j(x) = \left(1 + \frac{1}{2j}\right)\left\{\frac{1}{x\left(1 + \frac{1}{2j}\right)} + \frac{x\left(1 + \frac{1}{2j}\right)}{3}\right\} - \frac{1}{2j}\left\{\frac{2j}{x} + \frac{x}{2j \times 3}\right\}$$

$$= -\frac{x}{3}\left(1 + \frac{1}{2j}\right)^2 + \frac{x}{3(2j)^2}$$

$$\Rightarrow \overline{M}_z = N g \mu_B \cancel{j}\left\{\frac{+x(2j+1)^2 - x}{3 \times 4 j^{\cancel{2}}}\right\} = \overbrace{N g \mu_B \beta g \mu_B H \cancel{j}}^{N g^2 \mu_B^2 \beta H} \frac{(2j+1)^2 - 1}{\cancel{12}_{\,3}\, j^{\cancel{2}}}$$

$$= +4j^2 + 4j = +\cancel{4} j(j+1)$$

$\Rightarrow \overline{M}_z = N_0 \mu_B^2 g^2 j(j+1) H / 3kT$: مغناطش در واحد حجم

تعداد ذرات در واحد حجم

$$\chi = \frac{\partial \overline{M}_z}{\partial H} = \overset{C_j}{N_0 \mu_B^2 g^2 j(j+1)/3k} T = C_j / T$$

حالت خاص : $j\to\infty$ (حالت کلاسیکی) $g\to 0$

تابع بریلوین $B_j(x) = \left(1+\frac{1}{2j}\right)\coth\left\{x\left(1+\frac{1}{2j}\right)\right\} - \frac{1}{2j}\coth\frac{x}{2j}$

$$\overline{M_z} = N_0 g \mu_B j B_j(x) \longrightarrow \text{finite}$$

در حد $g\to 0$ داریم : $x\to 0 \Longrightarrow \coth x\to\infty$

$$x = \beta g \mu_B H$$

$$B_j(x) = \frac{\coth x \to \infty}{2j \to \infty}$$

باید رفع ابهام شود

$$\lim_{j\to\infty} B_j(x) = \coth x - \frac{1}{x} = L(x)$$

حالت خاص : $j=\frac{1}{2}$

$$B_{1/2} = 2\coth(2x) - \coth x$$

$$\coth 2x = \frac{1+\tanh^2 x}{2\tanh x} \Rightarrow B_{1/2}(x) = \cancel{2}\,\frac{1+\tanh^2 x}{\cancel{2}\tanh x} - \frac{1}{\tanh x} = \tanh x$$

$$\Rightarrow \overline{M_z} = N_0 g\mu_B \overset{=1/2}{j} \tanh x$$

دمای بالا : $x \ll 1 \longrightarrow \tanh x \simeq x = \beta\mu_B g H$

$$\Rightarrow \overline{M_z} = N_0 \mu_B^2 H\beta \frac{g^2}{2}$$

$$\Rightarrow \chi = \frac{\partial \overline{M_z}}{\partial H} = N_0 \mu_B^2 \frac{g^2}{2}\frac{1}{kT} = \frac{C_{1/2}}{T} \quad ; \quad C_{1/2} = N_0 \mu_B^2 \frac{g^2}{2k}$$

$g=2$: برای الکترون

برای حالت $x\ll 1$: $C = \frac{N_0 g^2 j(j+1)}{3k}\mu_B^2$

سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$

$$E = -\vec{\mu}\cdot\vec{H} \Rightarrow E = \mu H, -\mu H$$

$$Q_1 = \sum_r e^{-\beta E_r} = e^{-\beta\mu H} + e^{\beta\mu H} = 2\cosh(\beta\mu H) \longrightarrow Q_N = (Q_1)^N = \left[2\cosh\left(\frac{\mu H}{kT}\right)\right]^N$$

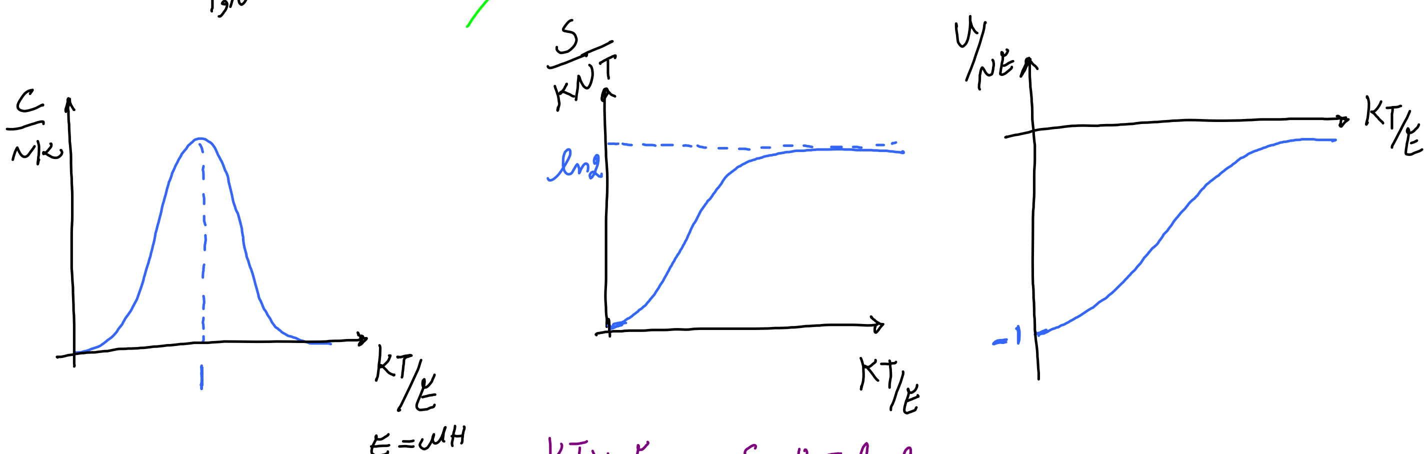
$$A=-kT\ln Q_N=-kTN\ln\left\{2\cosh\left(\mu H/kT\right)\right\}$$

$$S=-\frac{\partial A}{\partial T}=+kN\ln\left\{2\cosh\left(\mu H/kT\right)\right\}+\cancel{k}\cancel{T}N\,\frac{-\frac{\mu H}{\cancel{kT}^2}\,\cancel{2}\sinh\left(\mu H/kT\right)}{\cancel{2}\cosh\left(\mu H/kT\right)}$$

$$=Nk\left\{\ln\left(2\cosh\left(\underbrace{\frac{\mu H}{kT}}_{E\beta}\right)\right)-\frac{\mu H}{\underbrace{Tk}_{E\beta}}\tanh\left(\underbrace{\mu H/kT}_{E\beta}\right)\right\}$$

$$U=A+TS=-NE\tanh(\beta E)\quad,\ C=\frac{\partial U}{\partial T}=Nk(E\beta)^2\operatorname{sech}^2(\beta E)$$

$$M=-\frac{\partial A}{\partial H}\bigg|_{T,N}=+k\cancel{T}N\times\frac{\mu}{k\cancel{T}}\tanh\left(\mu H/kT\right)=N\mu\tanh\left(\frac{\mu H}{kT}\right)$$



$KT \gg E$: $S=NKT\ln 2$

$S=KT\ln\Omega\ ,\ \Omega=2^N$: برای N ذره

$Q=\sum e^{-\beta E}\ ,\ E>0\ ,\ T>0$

(دمای منفی)

$U=-NE\tanh(\beta E)$: داشتیم $\Longrightarrow -\tanh^{-1}U/NE=\beta E=\frac{E}{kT}$

$$\Longrightarrow \frac{1}{T}=-k/E\,\tanh^{-1}\left(U/NE\right)$$

$x=U/NE$

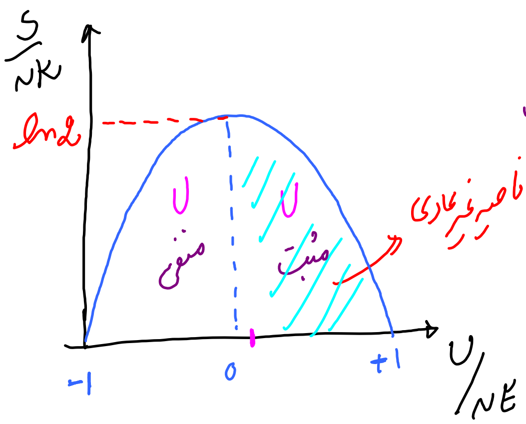
داریم : $\tanh\left(\ln\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}\right)=-x \longrightarrow -\tanh^{-1}x=\ln\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}$

$$\Rightarrow \frac{1}{T} = \frac{k}{\varepsilon} \ln \sqrt{\frac{1-U/N\varepsilon}{1+U/N\varepsilon}} = \frac{1}{2}\frac{k}{\varepsilon} \ln \frac{N\varepsilon - U}{N\varepsilon + U}$$

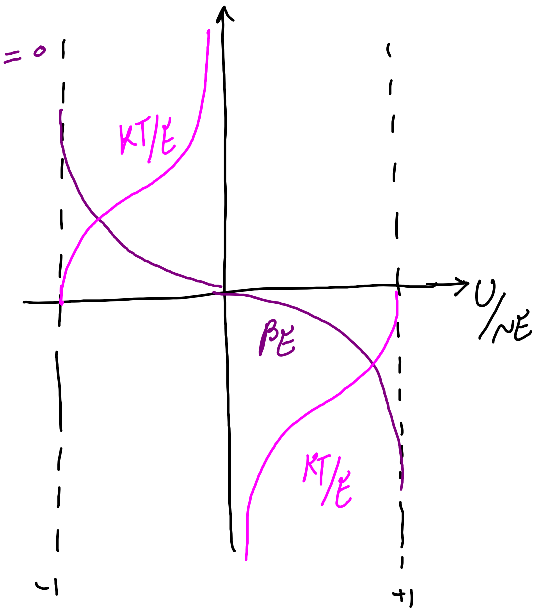
اگر $U<0 \Rightarrow N\varepsilon - U > N\varepsilon + U \Rightarrow T>0$

اگر $U>0 \Rightarrow N\varepsilon - U < N\varepsilon + U \Rightarrow T<0$

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U} \Rightarrow \cdots \Rightarrow \frac{S}{Nk} = -\frac{N\varepsilon + U}{2N\varepsilon} \ln\left(\frac{N\varepsilon+U}{2N\varepsilon}\right) - \frac{N\varepsilon - U}{2N\varepsilon} \ln\left(\frac{N\varepsilon - U}{2N\varepsilon}\right)$$



اگر $U = -N\varepsilon \Rightarrow S = 0$



با افزایش U، دما و آنتروپی افزایش می‌یابد تا هنگامی که آنتروپی به مقدار بیشینه خود برابر $Nk\ln 2$ برسد. در این نقطه، دما به بی‌نهایت می‌رود.

در این بازه آنتروپی صعودی است و مشتق آن یعنی دما مثبت است.

به محض این که $U=0^+$، دما منفی می‌شود اگرچه $|T|$ مرتباً کم می‌شود تا زمانی که $U=N\varepsilon$ که در این حالت آنتروپی صفر و دما صفر منفی است.

نگاه میکروکانونیکی

N_+: تعداد اسپین‌هایی که در جهت میدان H هستند.

$N=N_+ + N_-$ $\qquad$ N_-: " " " خلاف جهت میدان هستند.

$$U = -(N_+ - N_-)\overbrace{H\mu}^{\varepsilon} \rightarrow \begin{cases} N_+ > N_- \rightarrow U<0 \rightarrow T>0 \\ N_+ < N_- \rightarrow U>0 \rightarrow T<0 \end{cases}$$

$$N_\pm = \frac{1}{2}\left(N \pm U/\varepsilon\right) \Rightarrow \Omega = \frac{N!}{N_+!\,N_-!}$$

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

نکته: دماهای منفی به معنی دمای ترمودینامیکی نیستند. بلکه به این معنی هستند که اسپینهای خلاف جهت میدان بیشتر از اسپینهای هم جهت با میدان هستند.

- در سیستم‌هایی این دمای منفی ظاهر می‌شود که انرژی سیستم از بالا کراندار باشد. سیستم‌هایی که انرژی جنبشی دارند، کراندار نیستند ولی سیستم‌هایی که انرژی جنبشی ندارند (مثل پارامغناطیس) می‌توانند دمای منفی داشته باشند.