

Alte und neue Fragen der Thermodynamik

Jochen Gemmer
Osnabrück, 12.04.2006

Inhalt

Thermodynamik (Wärmelehre)

Quantenmechanik

Quantenthermodynamik

Newton'sche Mechanik (1686)

Es müssen bekannt sein:

- 1) Massen der Objekte und deren Wechselwirkungen untereinander
- 2) Orte und Geschwindigkeiten aller Körper ("Newton'scher Zustand") zu einem Zeitpunkt

Dann lassen sich berechnen:

Orte und Geschwindigkeiten aller Körper zu jedem späteren Zeitpunkt.

Beispiele: Planetenbewegungen, Wagen auch schiefer Ebene, schräger Wurf

Berechnung des Billardmodells im Prinzip möglich aber praktisch zu kompliziert

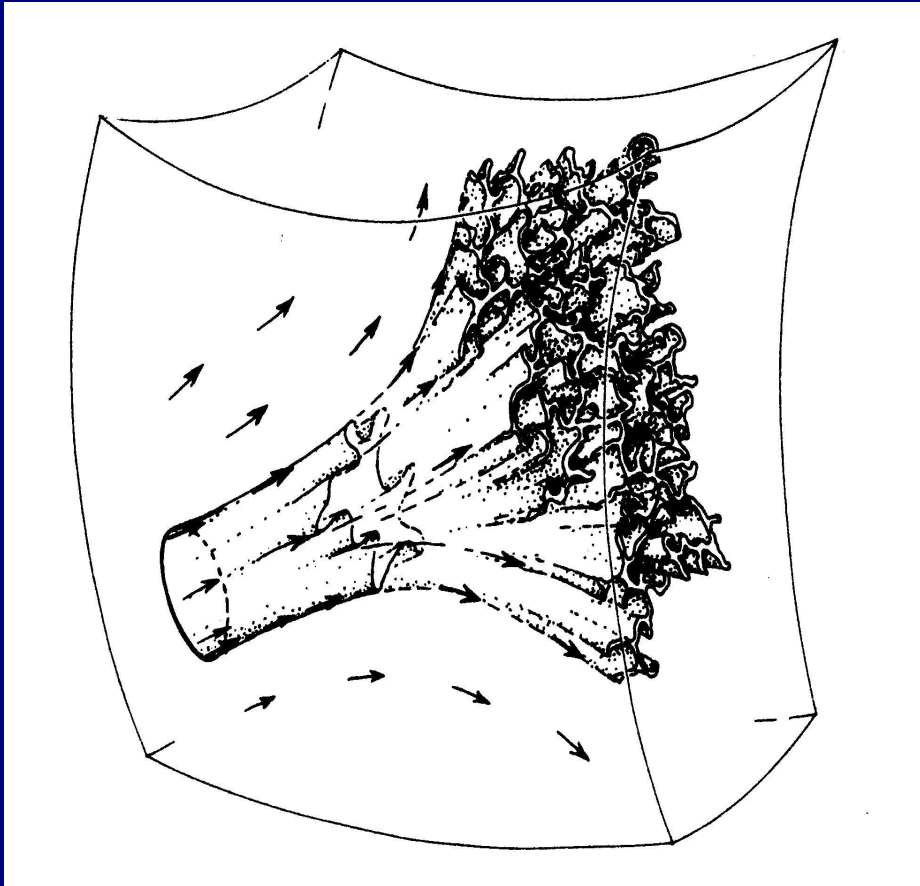
Boltzmannsche Thermodynamik

Ergodenhypothese: Das System verhält sich (nach langer Zeit) als ob es sich mit gleicher Wahrscheinlichkeit in jedem erreichbaren Newtonschen Zustand befände

Boltzmannformel: Erlaubt einfache Berechnung von Druck, Temperatur, und vielen anderen Größen ohne Lösung der Newtonschen Gleichungen.



Problem



Die Ergodenhypothese ist eine Hypothese und bedeutet die Unumkehrbarkeit von physikalischen Vorgängen und das Erreichen eines Endzustandes.

Nach der Newtonschen Mechanik sind alle Vorgänge vorwärts und rückwärts möglich und die Bewegung endet nie.

Film 1

Film 2

Film 3

Film 4

Die unerbittliche Richtung der Zeit



Zusammenfassung klassische Thermodynamik

Mithilfe der klassischen Thermodynamik ist die praktische Berechnung (vieler) thermodynamischer Vorgänge möglich.

Die Unumkehrbarkeit ist schwer verständlich

Die klassische Thermodynamik basiert auf der Ergodenhypothese

Die klassische Thermodynamik basiert auf der Newtonschen Mechanik

Quantenmechanik

Objekte verhalten sich im allgemeinen nicht der Newtonschen Mechanik entsprechend!

Vorausberechnet werden können nur die Wahrscheinlichkeiten mit denen Objekte in Zukunft an bestimmten Orten sein werden, bzw. bestimmte Geschwindigkeiten haben werden.

Die Entwicklung dieser Wahrscheinlichkeiten ist mit der Ausbreitung von Wellen vergleichbar.

Schrödingergleichung in Ortsdarstellung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t)$$

Verhältnis von Quantenmechanik zu Newtonscher Mechanik

Objekte verhalten sich näherungsweise der Newtonschen Mechanik entsprechend wenn:

\hbar/mv klein ist gegenüber der Struktur der “Hindernisse” (Spalte, Öffnungen, andere Objekte etc.)

oder

die quantenmechanische Ortsunschärfe klein ist gegenüber der Struktur der “Hindernisse”

Beides ist z.B. für Gase nicht erfüllt!

Die Newtonsche Mechanik ist ein fragwürdiges Fundament für die Thermodynamik!

Von der Schrödinger- zur Wärmeleitungsgleichung

(Wärme-)Diffusionsgleichung
kontinuierlich

$$\frac{\partial}{\partial t}U(x, t) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2}U(x, t)$$

diskret:

$$\frac{d}{dt}U_x = \kappa(U_{x-1} - U_x + U_{x+1} - U_x)$$

hat "Fixpunkt", hängt nur von der
Energiedichte ab

Schrödingergleichung allgemein:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

hat keinen Fixpunkt
lokale Energie:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\Psi(t)|\hat{U}_x|\Psi(t)\rangle &= \langle\Psi(t)|[\hat{U}_x, \hat{H}]|\Psi(t)\rangle \\ &\neq F(\langle\Psi(t)|\hat{U}_x|\Psi(t)\rangle) \end{aligned}$$

hängt vom vollständigen Zustand
 $\Psi(t)$ ab



Warum?

Wie und für welche Systeme folgt aus der Schrödingergleichung die Wärmeleitungsgleichung?

Wie berechnet man die Wärmeleitfähigkeit für große Systeme (jenseits von "Superrechnern")

Unter welchen Bedingungen könnte es tatsächlich "Wärmesupraleitung" geben?