77307 מכניקה סטטיסטית

פתרון תרגיל בית מס' 6

(1) סה"כ קונפיגורציות עם N_+ ספינים $\uparrow$ ו- N_- ספינים $\downarrow$ נתון ע"י:

$$\frac{N!}{N_+!N_-!}$$

אם נקבע שני ספינים במצב $(+,+)$, אז מס' הקונפיגורציות השונות המתאימות למצב זה נתון ע"י:

$$\frac{(N-2)!}{(N_+-2)!N_-!}$$

כלומר

$$P(+,+) = \frac{\frac{(N-2)!}{(N_+-2)!\cancel{N_-!}}}{\frac{N!}{N_+!\cancel{N_-!}}} = \frac{N_+(N_+-1)}{N(N-1)} = P(-,-)$$

מסימטריה להחלפה $+ \leftrightarrow -$, $N_+ \leftrightarrow N_-$

באופן דומה

$$P(+,-) = \frac{\frac{(N-2)!}{(N_+-1)!(N_--1)!}}{\frac{N!}{N_+!N_-!}} = \frac{N_+N_-}{N(N-1)}$$

(3) כמובן שמספר הסידורים השונים נתון ע"י:

$$g(M_s) = \left.\frac{N!}{N_+!N_-!N_0!}\right|_{\substack{N_+(M_s)\\ N_-(M_s)}}$$

, כאשר $N_+ + N_- + N_0 = N$ וגם $M_s = N_+ - N_-$

כך ש: $N_+ = \frac{M_s + N - N_0}{2}$; $N_- = \frac{N - M_s - N_0}{2}$

(ב) + (א) (2)

$\Omega(E)$ - הוא מספר המצבים האפשריים של המערכת עבורם אנרגיה כוללת שווה ל- E. הקשר בין האנרגיה הכוללת לבין מספר "n" של חלקיקים במצב בו האנרגיה הגבוהה יותר ($E=2\mu H$) נתון ע"י:

$$E_{\text{כולל}} = (2\mu H)n$$

לכן מספיק להציג את Ω כפונקציה של "n" (יש קשר חד-חד ערכי בין n לבין אנרגיה כוללת)

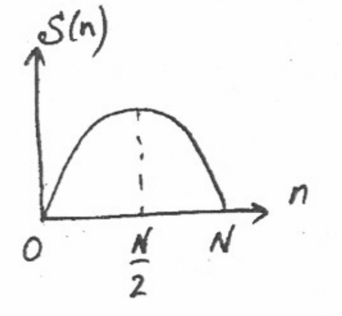
הצגה זאת נתונה ע"י:

$$\Omega(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

$$S = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

שימו לב, כי $S(n=0)=S(n=N)=0$

ואנו מצפים לקבל מכסימום ב- $n=\frac{N}{2}$ (ראו המשך)



ג נוסחאת סטירלינג $\ln n! = n\ln n - n$

ולכן:

$$\frac{S}{k_B} \simeq N\ln N - \cancel{N} - n\ln n + \cancel{n} - (N-n)\ln(N-n) + \cancel{N} - \cancel{n}$$

$$\frac{dS}{dn} = 0 \Leftrightarrow -\ln n - \cancel{1} + \cancel{\frac{N}{N-n}} + \ln(N-n) - \cancel{\frac{n}{N-n}} = 0$$

$$\ln(N-n) = \ln n$$

$$\underline{\underline{n = \frac{N}{2}}}$$

① עבור מולקולה דו-אטומית קוונטי (בתרגיל זה $k_B=1$)

$$\varepsilon_{vl}=\varepsilon_0+\hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

ε_0 - אנרגיה אלקטרונית

$\hbar\omega$ - קוונט של תנודות המולקולה

I - מומנט ההתמד (אינרציה) של המולקולה.

l - מספר קוונטי של תנע זוויתי המתאים לסיבוב המולקולה.

פונקציית החלוקה הפנימית

$$Z_{int}=e^{-\frac{\varepsilon_0}{T}}Z_{osc}Z_{rot}$$

$$Z_{osc}=\sum_{v=0}^{\infty}\exp\left[-\frac{\hbar\omega}{T}\left(v+\frac{1}{2}\right)\right]\ ;\ Z_{rot}=\sum_{l=0}^{\infty}\underbrace{(2l+1)}_{\text{ניוון בגלל ערכים אפשריים של } L_z \text{ עבור } l \text{ נתון}}\exp\left[-\frac{\hbar^2}{2TI}l(l+1)\right]$$

$$F=-NT\ln\left[\frac{eV}{N}\left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\right]+F_{rot}+F_{osc}+N\varepsilon_0\ ;\ F_{rot}=-NT\ln Z_{rot}\ ;\ F_{osc}=-NT\ln Z_{osc}$$

למעשה את F_{osc} ניתן לחשב בצורה סגורה לקבל:

$$\underbrace{F_{osc}=\left[\frac{\hbar\omega}{2}+T\ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)\right]N}_{\text{אנרגיה חופשית של אוסצילטור חד-מימדי}}$$

האנטרופיה מתקבלת מתוך שוויון

$$S=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$$

$$S=S_{trans}+S_{osc}+S_{rot}$$

$$S_{trans}=N\ln\left[\frac{eV}{N}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\right]+\frac{3}{2}N\ln T+\frac{3}{2}N\ ;\ S_{osc}=N\ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)^{-1}+\frac{N\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}}{T\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{T}}\right)}$$

$$S_{rot}=N\ln Z_{rot}+NT\frac{\frac{\partial Z_{rot}}{\partial T}}{Z_{rot}}\ ;\ \frac{\partial Z_{rot}}{\partial T}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)\hbar^2}{2IT^2}l(l+1)\exp\left[-\frac{\hbar^2}{2IT}l(l+1)\right]$$

② בגבול $\hbar\omega \ll k_B T$ המערכת הופכת להיות קלאסית וניתן קירוב לרשום:

$$F_{osc}\simeq NT\ln\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right)\ ;\ \underset{\text{קירוב קוונטי-קלאסי}}{Z_{rot}\simeq}\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^2}\iint_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{2TI}\left(L_x^2+L_y^2\right)\right]dL_x\,dL_y=\frac{2IT}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow F_{rot}\simeq-NT\ln T-NT\ln\frac{2I}{\hbar^2}$$

כך ש:

$$S_{osc} = -\left(\frac{\partial F_{osc}}{\partial T}\right)_V = -\left[\ln\frac{\hbar\omega}{T} - 1\right]N; \quad S_{rot} = +N + N\ln\frac{2I}{\hbar^2} + N\ln T$$

שימו לב ש: S_{trans} נשאר ללא שינוי כי הוא כבר מחושב בקירוב הקוואזי קלאסי:
כנ"ל עבור F_{trans}. בקירוב זה:

$$C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{3}{2}+1+1\right)N = \frac{7}{2}N$$

בגבול $\hbar\omega >> k_BT >> \frac{\hbar^2}{2I}$ יש להשתמש בתוצאות
שקיבלנו עבור הגבול הראשון כאשר נניח בהן את הדרגות חופש
המתאימות לתנודות, כך שלדוגמא
$C_V = \frac{5}{2}N$ בגבול זה.