מכניקה סטטיסטית
77802

פתרון תרגיל בית מס' 6

שאלה 1

א

$$\frac{d}{dt}\sum_{N=0}^{\infty}P(N)=\sum_{N=0}^{\infty}\dot P(N)=\sum_{N=0}^{\infty}\Big\{F[P(N-1)-P(N)]+W[(N+1)P(N+1)-NP(N)]+K[(N+2)(N+1)P(N+2)-N(N-1)P(N)]\Big\}$$

נשתמש בעובדה כי $P(-1)=0$ ונבצע הזזת אינדקסים

$$\frac{d}{dt}\sum_{N=0}^{\infty}P(N)=\sum_{N=1}^{\infty}FP(N-1)-\sum_{N=0}^{\infty}FP(N)+W\sum_{N=1}^{\infty}NP(N)-W\sum_{N=0}^{\infty}NP(N)+\sum_{N=2}^{\infty}K(N-1)NP(N)-K\sum_{N=0}^{\infty}N(N-1)P(N)=0$$

לאחר הזזת אינדקס באיבר הראשון

ב

מכיוון שאין זרימה ממצב של מולקולה בודדת למצב של שני אטומים לא יכול להתקיים איזון מפורט, כי באיזון מפורט זרמים בין שני מצבים שכנים שווים.

ג

$$\langle\dot N\rangle=\frac{d}{dt}\sum NP(N)=\sum_{N=0}^{\infty}\Big\{FN[P(N-1)-P(N)]+WN[(N+1)P(N+1)-NP(N)]+K[(N+2)(N+1)NP(N+2)-N^2(N-1)P(N)]\Big\}$$

$$=\sum_{N=0}^{\infty}F(\cancel{N}+1)P(N)-\cancel{F\langle N\rangle}+W\sum_{N=0}^{\infty}N(N-1)P(N)-W\sum_{N=0}^{\infty}N^2P(N)+K\sum_{N=0}^{\infty}N(N-1)(N-2)P(N)$$

$$-K\sum_{N=0}^{\infty}N^2(N-1)P(N)=F-W\langle N\rangle-2\langle N^2\rangle K+2K\langle N\rangle$$

סופי

$$\langle\dot N\rangle=F-W\langle N\rangle-2K\langle N^2\rangle+2K\langle N\rangle$$

ד

אם נניח $\langle N^2\rangle-\langle N\rangle\simeq\langle N\rangle^2$ נקבל:

$$\langle\dot N\rangle=F-W\langle N\rangle-2K\langle N\rangle^2$$

במצב סטציונרי $\langle\dot{N}\rangle=0$, לכן:

$$2K\langle N\rangle^2+W\langle N\rangle-F=0$$

$$\langle N\rangle=\frac{-W+\sqrt{W^2+8KF}}{4K}$$

כאשר שפתרון שני לא פיסקלי, כי $\langle N\rangle\geq 0$.

שאלה 2

א) נגזור את g חלקית לפי t ונשתמש בעובדה, כי $\dot{P}(N)=0$ ונקבל:

$$0=\frac{\partial g}{\partial t}=\sum_{N=0}^{\infty}\dot{P}(N)s^N=\sum_{N=0}^{\infty}FP(N-1)s^N-F\sum_{N=0}^{\infty}s^NP(N)+W\sum_{N=0}^{\infty}(N+1)P(N+1)s^N$$

הצבה ל משוואת מסטר

$$-W\sum_{N=0}^{\infty}NP(N)s^N+K\sum_{N=0}^{\infty}(N+2)(N+1)P(N+2)s^N-K\sum_{N=0}^{\infty}N(N-1)P(N)s^N$$

$$=Fsg(s)-Fg(s)+W\frac{d}{ds}\sum_{N=1}^{\infty}P(N)s^N-Ws\frac{d}{ds}\sum_{N=0}^{\infty}P(N)s^N+K\frac{d^2}{ds^2}\sum_{N=\cancel{0}\,2}^{\infty}P(N+2)s^{N+2}$$

$$-Ks^2\frac{d^2}{ds^2}\sum_{N=0}^{\infty}P(N)s^N$$

סופית נקבל משוואה דיפרנציאלית הבאה:

$$0=-F(1-s)g(s)+W(1-s)\frac{dg}{ds}+K(1-s^2)\frac{d^2g}{ds^2}$$

ב)

$$g=r^{-\delta}f(r)$$
$$g'=-\delta r^{-\delta-1}f+r^{-\delta}f'$$
$$g''=+\delta(\delta+1)r^{-\delta-2}f-2\delta r^{-\delta-1}f'+r^{-\delta}f''$$
$$ds=dr$$

ונקבל:

$$0=-F\cancel{r^{-\delta}}f+W(\cancel{r^{-\delta}}f'-\delta r^{-\delta-1}f)+Kr\left(\delta(\delta+1)r^{-\delta-2}f-2\delta r^{-\delta-1}f'+\cancel{r^{-\delta}}f''\right)$$

$$0=\left(-\frac{F}{Kr}-\frac{W\delta}{Kr^2}+\frac{\delta(\delta+1)}{r^2}\right)f+\left(\frac{W}{Kr}-\frac{2\delta}{r}\right)f'+f''$$

אם נגדיר $\delta = \frac{W}{2K}$ ו- $\alpha = \frac{F}{2K}$ נקבל:

$$0 = \left(-\frac{2\alpha}{r} + \frac{\delta(1-\delta)}{r^2}\right) f + f''$$

זאת צורה סטנדרטית של משוואת Bessel מוכללת והפתרונות שלה הן פונקציות בסל מוכללות.

שאלה 3

נתונה מערכת חד-מימדית של N כדורים קשיחים בעלי אורך צלע a, על רצועה באורך L, .

.Na<L

$$. u(x_i - x_j) = \begin{cases} \infty & |x_i - x_j| < a \\ 0 & 0 \end{cases}$$

א. חשבו במדויק את פונקצית החלוקה ואת משוואת המצב.

פונקציית החלוקה ניתנת ע"י המכפלה $Z = Z_K Z_V$. Z_K היא התרומה הקינטית:

$$. Z_K = \frac{1}{N!}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}\right)^N = \frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)^{N/2}$$

Z_V היא תרומת הפוטנציאל הדו-חלקיקי:

$$. Z_V = \int dx_1 \dots dx_N \exp\left[-\frac{1}{k_BT}\sum_{i<j} v(x_i - x_j)\right]$$ אבל:

$$. \exp\left[-\frac{1}{k_BT} v(x_i - x_j)\right] = \begin{cases} 0 & |x_i - x_j| < a \\ 1 & |x_i - x_j| \ge a \end{cases}$$ לכן, כדי לפתור את Z_V נסדר ראשית

את החלקיקים כך ש- $x_1 \le x_2 \le \dots \le x_N$ (זה ייתן פקטור $N!$ לאינטגרל) ואז:

$$. Z_V = N! \int_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} dx_1 \int_{x_1+a}^{L-(2N-3)\frac{a}{2}} dx_2 \dots \int_{x_{N-1}+a}^{L-\frac{a}{2}} dx_N$$

כדי לפתור זאת נשים לב כי

$$N = 1 \Rightarrow Z_V = 1!(L-a) = L-a$$

$$N = 2 \Rightarrow Z_V = 2!\frac{(L-2a)^2}{2} = (L-2a)^2$$

. ולכן נוכיח

באינדוקציה כי $Z_V = (L - Na)^N$. נניח עבור $N-1$ ונוכיח ל-N:

$$Z_V = N! \int_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} dx_1 \int_{x_1+a}^{L-(2N-3)\frac{a}{2}} dx_2 \dots \int_{x_{N-1}+a}^{L-\frac{a}{2}} dx_N =$$

$$= N \int_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} dx_1 (N-1)! \left[\int_{x_1+a}^{L-(2N-3)\frac{a}{2}} dx_2 \dots \int_{x_{N-1}+a}^{L-\frac{a}{2}} dx_N\right] \underset{\tilde{x}_i = x_i - x_1 - \frac{a}{2}}{=}$$

$$= N \int_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} dx_1 (N-1)! \left[\int_{x_1+a}^{L-(2N-3)\frac{a}{2}} dx_2 \dots \int_{x_{N-1}+a}^{L-\frac{a}{2}} dx_N\right] \underset{\tilde{x}_i = x_i - x_1 - \frac{a}{2}}{=}$$

$$Z_V = N \int_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} dx_1 (N-1)! \left[\int_{\frac{a}{2}}^{\left(L-x_1+\frac{a}{2}\right)-(2N-3)\frac{a}{2}} dx_2 \quad \dots \int_{x_{N-1}+a}^{\left(L-x_1+\frac{a}{2}\right)-\frac{a}{2}} dx_N \right] =$$

$$\underset{\text{הנחת האינדוקציה}}{=} N \int_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} dx_1 \left(L - x_1 + \frac{a}{2} - (N-1)a \right)^{N-1} =$$

$$= -\left(L - x_1 + \frac{a}{2} - (N-1)a \right)^N \Bigg|_{\frac{a}{2}}^{L-(2N-1)\frac{a}{2}} = (L - Na)^N$$

לכן:

$$P = kT\left(\frac{\partial}{\partial L}\ln Z\right)_{T,N} = kT\left(\frac{\partial}{\partial L}\ln Z_V\right)_{T,N} = \frac{NkT}{L}\left(1-\frac{Na}{L}\right)^{-1} \approx \frac{NkT}{L}\left(1+a\frac{N}{L}\right)$$

ב. חשבו את B_2.

$$B_2 = \frac{1}{2L}\int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \exp\left(-\frac{1}{k_B T}v(x_1-x_2)\right) \underset{\substack{x=x_1-x_2 \\ X=\frac{x_1+x_2}{2}}}{=} \frac{1}{2L}\int_0^L dX \int_{-L}^L dx \exp\left(-\frac{1}{k_B T}v(x)\right) = a$$

ג. הראו כי התוצאה שקיבלתם קונסיסטנטיות עם סעיף א'.

בסעיף ב קיבלנו $\frac{PL}{NkT} = 1 + a\frac{N}{L}$ *, כמו בסעיף א.*

שאלה 4

נתונה מערכת בת N חלקיקים בנפח V וטמפרטורה T. בין כל שני חלקיקים קיימת אינטראקציה התלויה רק במרחק בין החלקיקים ונתונה ע"י :

$$\varepsilon > 0 \qquad u(r) = \begin{cases} \infty & 0 < r < b \\ -\varepsilon & b \le r \le R \\ 0 & R < r \end{cases}.$$

א. חשבו את מקדם הפיתוח הויריאלי $B_2(T)$ של המערכת.

מתוך הנוסחא שקיבלנו בכיתה:

$$\begin{aligned} B_2(T) &= 2\pi \int_0^\infty r^2 \left(1 - \exp(-\beta u(r))\right) = \\ &= 2\pi\left[\int_0^R r^2 dr - \int_b^R r^2 e^{\beta\varepsilon} dr\right] = \\ &= 2\pi\left[\frac{R^3}{3} - e^{\beta\varepsilon}\left(\frac{R^3}{3} - \frac{b^3}{3}\right)\right] = \\ &= \frac{2\pi b^3}{3}\left[1 - \left(\frac{R^3}{b^3} - 1\right)\left(e^{\beta\varepsilon} - 1\right)\right] \end{aligned}$$

ב. הראו כי בקרוב מסוים נותן הפיתוח עד סדר שני את משוואת המצב של גז ואן-דר-ואלס.

מהו קרוב זה ?

גז ואן דר ואלס:

$$P=\frac{NkT}{V-Nb_0}-\left(\frac{N}{V}\right)^2 a_0 \approx \frac{NkT}{V}\left(1+\frac{N}{V}b_0\right)-\left(\frac{N}{V}\right)^2 a_0=\frac{NkT}{V}\left(1+\frac{N}{V}\left(b_0-\frac{a_0}{kT}\right)\right)$$

כלומר, מקדם הפיתוח הויריאלי השני בגז ואן דר ואלס הוא $B_2^{VdW}=b_0-\frac{a_0}{kT}$.

נחזור לבעיה שלנו, ונשים לב כי הקרוב בו הטמפרטורה גבוהה ביחס לאנרגיה האופיינית של הפוטנציאל הדו גופי מתקיים:

$B_2(T)=\frac{2\pi b^3}{3}\left[1-\left(\frac{R^3}{b^3}-1\right)\left(e^{\beta\varepsilon}-1\right)\right]\underset{\frac{\varepsilon}{kT}<<1}{\approx}\frac{2\pi b^3}{3}\left[1-\frac{\varepsilon}{kT}\left(\frac{R^3}{b^3}-1\right)\right]$, *ואם נסמן*

$b_0=\frac{2\pi b^3}{3}$; $a_0=\frac{2\pi\varepsilon}{3}\left(R^3-b^3\right)$, *זהו המקדם הויריאלי השני של גז ואן דר ואלס.*