

## תרגיל בית מספר 4: פקטור בולצמן, פונקציות חלוקה, התפלגויות ומשפט החלוקה השווה

### שאלה 1: פקטור בולצמן

במערכת יש שלושה אתרים, ובכל אתר יש חלקיק שיכול להימצא ברמות אנרגיה שונות. רמות האנרגיה האפשריות באתר הראשון הן  $m_1 \epsilon_1$  בשני  $m_2 \epsilon_2$  ובשלישי  $m_3 \epsilon_3$  כאשר כל ה  $m_i$  הם מספרים שלמים בין 0 לאינסוף.

האנרגיה הכוללת במערכת היא סכום האנרגיות בכל האתרים.

- מה האנרגיה של מצב מיקרו כלשהו של המערכת?
- רשמו את פונקציית החלוקה של המערכת.
- מה האנרגיה הממוצעת של המערכת?
- מצאו את קיבול החום של המערכת, שרטטו אותו כפונקציה של הטמפרטורה עבור  $\epsilon_1 = 5[meV]$ ,  $\epsilon_2 = 7[meV]$ ,  $\epsilon_3 = 10[meV]$
- בהנחה ש  $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$  הם מאותו סדר גודל, מהו התנאי על הטמפרטורה בקירוב טמפרטורות גבוהות? מהו התנאי בקירוב הטמפרטורות הנמוכות?
- האם החוק השלישי של התרמו דינמיקה מתקיים בגבול הטמפרטורות הנמוכות? איך מתנהג קיבול החום בגבול הטמפרטורות הגבוהות? האם אתם יכולים להסביר את ההתנהגות הזו? (חשבו לאיזו מערכת שאתם מכירים יש התנהגות כזו. רמז, הסתכלו על רמות האנרגיה).

א. אנרגיה של מצב מיקרו כלשהו היא

$$m_1 \epsilon_1 + m_2 \epsilon_2 + m_3 \epsilon_3$$

ב.

$$Z = \sum_{m_1=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\infty} \sum_{m_3=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{k_B T} (m_1 \epsilon_1 + m_2 \epsilon_2 + m_3 \epsilon_3)} =$$

$$= \sum_{m_1=0}^{\infty} (e^{-\frac{1}{k_B T} \epsilon_1})^{m_1} \sum_{m_2=0}^{\infty} (e^{-\frac{1}{k_B T} \epsilon_2})^{m_2} \sum_{m_3=0}^{\infty} (e^{-\frac{1}{k_B T} \epsilon_3})^{m_3} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_1}} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_2}} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_3}}$$

כאשר

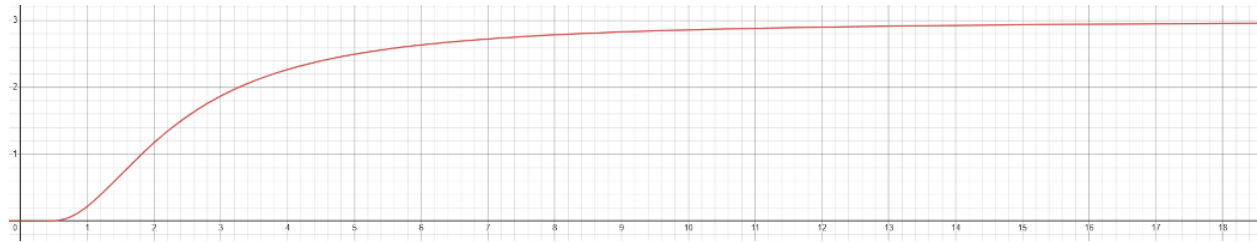
$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$$

ג. האנרגיה הממוצעת תתקבל מ

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\epsilon_1}{e^{\beta \epsilon_1} - 1} + \frac{\epsilon_2}{e^{\beta \epsilon_2} - 1} + \frac{\epsilon_3}{e^{\beta \epsilon_3} - 1}$$

ד. קיבול החום מקיים

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\epsilon_1^2 e^{\frac{\epsilon_1}{k_B T}}}{k_B T^2 \left( e^{\frac{\epsilon_1}{k_B T}} - 1 \right)^2} + \frac{\epsilon_2^2 e^{\frac{\epsilon_2}{k_B T}}}{k_B T^2 \left( e^{\frac{\epsilon_2}{k_B T}} - 1 \right)^2} + \frac{\epsilon_3^2 e^{\frac{\epsilon_3}{k_B T}}}{k_B T^2 \left( e^{\frac{\epsilon_3}{k_B T}} - 1 \right)^2}$$



ה. קירוב טמפרטורות גבוהות הוא

$$\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3 \ll K_B T$$

בקירוב טמפרטורות נמוכות

$$\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3 \gg K_B T$$

ו. כאשר הטמפרטורה שואפת לאפס, קיבול החום שואף לאפס. לפי החוק השלישי של התרמודינמיקה, האנטרופיה שואפת לאפס כאשר הטמפרטורה שואפת לאפס ובהכרח גם קיבול החום. במצב של טמפרטורות מאד נמוכות האנרגיה הממוצעת של החלקיקים קטנה מהאנרגיה הדרושה כדי לעבור למצבים עם אנרגיות גבוהות יותר. החלקיקים לא יכולים לעבור בין המצבים ולכן המערכת לא יכולה לאגור חום.

בגבול הטמפרטורות הגבוהות קיבול החום שואף לקבוע,  $\lim_{T \rightarrow \infty} C = 3$ , זוהי התנהגות של אוסילטור הרמוני.

## שאלה 2: התפלגות מקסוול-בולצמן והגז האידיאלי

בתרגול ראיתם את התפלגות מקסוול בולצמן עבור חלקיקים חופשיים:

$$f(v_x, v_y, v_z) = \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_b T}}$$

א. כעת נסתכל לעל התפלגות המהירויות במימד אחד, נחש שפונקציה פילוג הינה מהצורה הבאה

$$g(v_x) \sim e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}}$$

חשבו את קבוע הנרמול של הפילוג

אינטגרל על התפלגות המהירות מ  $-\infty$  ל  $\infty$  צריך לתת אחד.  
נרשום

$$g(v_x) = A e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}}$$

כאשר  $A$  הוא קבוע הנרמול אותו נרצה למצוא.  
אז מהדרישה

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(v_x) dv_x = \int_{-\infty}^{\infty} A e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}} dv_x = 1$$

נקבל את קבוע הנרמול

$$\sqrt{\frac{2\pi k_b T}{m}} A = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_b T}}$$

ב. חשבו את הגדלים הבאים  $\langle v_x \rangle$ ,  $\langle |v_x| \rangle$ ,  $\langle v_x^2 \rangle$  כאשר הסוגרים המשולשים מציינים מיצוע על המהירויות

נחשב על פי ההגדרה של ממוצע

$$\langle v_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v_x g(v_x) dv_x = \int_{-\infty}^{\infty} v_x \sqrt{\frac{m}{2\pi k_b T}} e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}} dv_x = 0$$

כיוון ש  $v(x)$  פונקציה אי זוגית ו  $g(v_x)$  זוגית.

$$\langle v_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 g(v_x) dv_x = \int_{-\infty}^{\infty} v_x \sqrt{\frac{m}{2\pi k_b T}} e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}} dv_x = \frac{k_b T}{m}$$

כצפוי מחוק חלוקה שווה.

$$\begin{aligned} \langle |v_x| \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} |v_x| g(v_x) dv_x = \int_{-\infty}^0 -v_x \sqrt{\frac{m}{2\pi k_b T}} e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}} dv_x \\ &+ \int_0^{\infty} v_x \sqrt{\frac{m}{2\pi k_b T}} e^{-\frac{mv_x^2}{2k_b T}} dv_x = 2 \sqrt{\frac{k_b T}{2\pi m}} \end{aligned}$$

ג. בצעו מעבר מקוארדינטות קרטזיות לקוארדינטות כדוריות. קבלו ביטוי עבור פילוג גודל המהירות  $f(v)$  כמו שראינו בתרגול, נבצע מעבר קוארדינטות מ  $v_x, v_y, v_z$  לקוארדינטות כדוריות, כאשר

$$v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = v^2$$

כאשר  $v$  גודל המהירות.  
מתקיים

$$dv_x dv_y dv_z = v^2 dv \sin \theta d\theta d\phi$$

לכן נקבל

$$\begin{aligned} &\iiint \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_b T}} dv_x dv_y dv_z \\ &= \iiint \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} v^2 dv \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned}$$

אנחנו מעוניינים בהתפלגות של גודל המהירות לכן נבצע אינטגרל על הזוויות  $\theta, \phi$  ונקבל

$$\int_0^\infty \left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} v^2 dv \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \int_0^\infty 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} v^2 dv$$

ומכאן שהתפלגות גודל המהירות היא

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} v^2$$

ד. חשבו את הגדלים הבאים  $\langle v \rangle, \langle v^2 \rangle$  החישוב הוא שוב פשוט לפי הגדרת הממוצע

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} v^2 dv = 2^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{k_b T}{\pi m}}$$

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty v^2 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} v^2 dv = \frac{3k_b T}{m}$$

ה. השתמשו במשפט החלוקה השווה בכדי לחשב את הגודל  $\langle v^2 \rangle$  הפעם מבלי לחשב אינטגרלים.

לפי משפט חלוקה שווה כל דרגת חופש מוסיפה  $\frac{1}{2} k_b T$  לאנרגיה הממוצעת. לחלקיק גז יש שלוש דרגות חופש, לכן האנרגיה הממוצעת שלו היא

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} k_b T$$

מצד שני, האנרגיה שלו היא אנרגיה קינטית לכן

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_b T$$

ומכאן נקבל את התוצאה שקיבלנו קודם

$$\langle v^2 \rangle = \frac{3k_b T}{m}$$

ו. חשבו עבור איזה גודל המהירות פילוג הסתברות מקבל את ערכו המקסימאלי. ציירו את הפילוג וסמנו על גבי הגרף מהירות שמצאתם, מהירות הממוצע ומהירות RMS (ראו למטה את ההגדרה)

כדי למצוא את הערך של גודל המהירות  $v$  בו פילוג ההסתברות של גודל המהירות  $f(v)$  מקבל את ערכו המקסימלי, נגזור את  $f(v)$  ונשווה לאפס.

$$\frac{df(v)}{dv} = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} e^{-\frac{m(v^2)}{2k_b T}} \left( 2v - \frac{2v^3 m}{2k_b T} \right) = 0$$

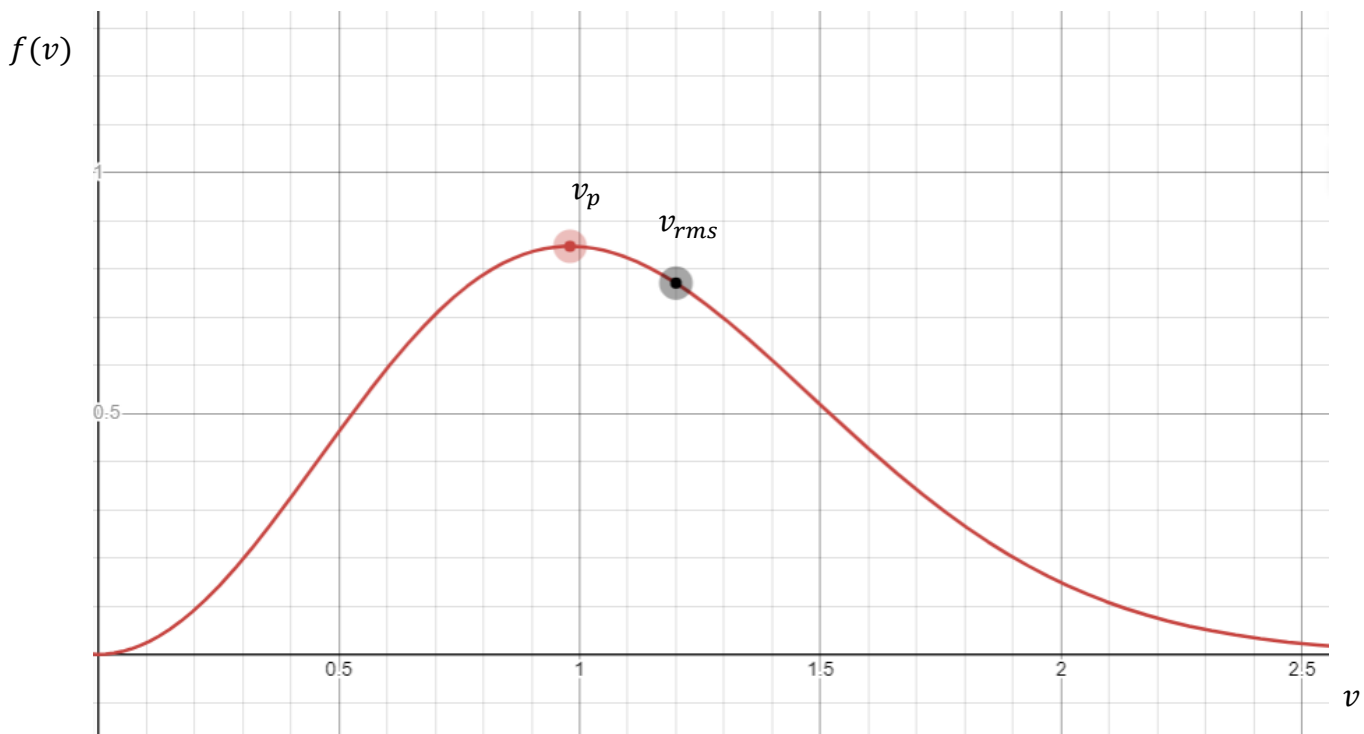
נקבל

$$v_p = \sqrt{\frac{2k_b T}{m}}$$

כאשר  $v_p$  היא המהירות בה ההתפלגות מקבלת מקסימום (המהירות בעלת צפיפות ההסתברות הגבוהה ביותר).

נחשב בנוסף  $v_{rms}$  באמצעות ההגדרה בסעיף הבא

$$v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3k_b T}{m}}$$



ז. נגדיר מהירות RMS כ-

$$v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$$

חשבו מהירויות RMS עבור גזים הבאים  $H_2, O_2, He$  בטמפרטורת חדר  
 $(T = 293K)$

המסות של  $H_2$  ו  $He$  הן

$$1.00784 u \approx 1.67 \times 10^{-27} kg$$

$$31.99 u \approx 5.31 \times 10^{-26} kg$$

$$4.002 u \approx 6.65 \times 10^{-27} kg$$

בהתאמה.

$$v_{rms} \text{ ונקבל ב } = \sqrt{\frac{3k_b T}{m}}$$

$$v_{rms} = 2695.74 \frac{m}{s}$$

$$v_{rms} = 478.07 \frac{m}{s}$$

$$v_{rms} = 1350.91 \frac{m}{s}$$

בהתאמה.

### שאלה 3: קפיץ ודיפול

נתונים שני גופים בעלי מסה  $m$  כל אחד. הגוף הראשון מחובר לקצה של קפיץ שקצהו האחר מקובע לנקודה  $x_a$  והשני לקצה של קפיץ שקצהו האחר מקובע לנקודה  $x_b$ . קבוע הקפיץ של שני הקפיצים הוא  $k$  (הגופים לא מחוברים ביניהם). המערכת נמצאת בטמפרטורה  $T$ , והבעיה חד ממדית וקלאסית.

- א. מהן דרגות החופש בבעיה?
- ב. חשבו את פונקציית החלוקה של המערכת.
- ג. מצאו את האנרגיה הממוצעת של המערכת מתוך פונקציית החלוקה. האם ניתן היה לקבל תשובה זו גם משיקולים פשוטים יותר? הסבירו.
- ד. חשבו את צפיפות ההסתברות למצוא את החלקיקים עם תנעים  $p_1$  ו  $p_2$  ובמיקומים  $x_1, x_2$  בהתאמה? כלומר חשבו את  $\rho(p_1, p_2, x_1, x_2)$ . כעת חשבו את צפיפות ההסתברות למצוא את החלקיק הראשון במיקום  $x_1$  וגם את השני במיקום  $x_2$ , כלומר  $\rho(x_1, x_2)$ .
- ה. חשבו את צפיפות ההסתברות  $\rho(x_1)$  ואת  $\rho(x_2)$ .
- ו. חשבו את המרחק הממוצע בין החלקיקים.
- ז. כעת נתון כי הגוף הראשון טעון במטען חיובי  $+q$  והגוף השני במטען שלילי  $-q$ . במרחב כולו שורר שדה חשמלי אחיד  $\vec{E} = E\hat{x}$ , ונתון כי הפוטנציאל שווה אפס בראשית. החלקיקים נתונים להשפעה השדה החשמלי, אך לא מבצעים כל אינטראקציה ביניהם. מה פונקציית החלוקה כעת?
- ח. הדיפול החשמלי מוגדר על ידי  $q(x_1 - x_2)$ . מצאו את הממוצע של הדיפול החשמלי. האם הממוצע תלוי בטמפרטורה? הסבירו.

- א. דרגות החופש בבעיה הן מהירות הגוף הראשון, מהירות הגוף השני, מיקום הגוף הראשון ומיקום הגוף השני. סך הכל 4 דרגות חופש.
- ב. פונקציית החלוקה תהיה

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta k}{2}(x_1 - x_a)^2} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta k}{2}(x_2 - x_b)^2} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p_1^2}{2m}} dp_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p_2^2}{2m}} dp_2 \\ &= \frac{(2\pi)^2}{\beta^2 k} m \end{aligned}$$



ג. את האנרגיה הממוצעת נקבל מתוך

$$E = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = 2k_b T$$

יכלנו לקבל זאת מחוק חלוקה שווה. נשים לב כי יש 4 דרגות חופש בבעיה וכל דרגת חופש תורמת  $\frac{1}{2} k_b T$  לאנרגיה.

ד.

$$\rho(p_1, p_2, x_1, x_2) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \left( \frac{k}{2}(x_1 - x_a)^2 + \frac{k}{2}(x_2 - x_b)^2 + \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} \right)}$$

כדי לקבל את  $\rho(x_1, x_2)$  נבצע אינטגרציה על כל התנעים האפשריים

$$\rho(x_1, x_2) = \frac{\beta k}{2\pi} e^{-\beta \left( \frac{k}{2}(x_1 - x_a)^2 + \frac{k}{2}(x_2 - x_b)^2 \right)}$$

ה. אינטגרציה על כל המיקומים האפשריים של אחד החלקיקים ייתן את צפיפות ההסתברות של מיקום החלקיק השני, כלומר

$$\rho(x_1) = \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} e^{-\frac{\beta k}{2}(x_1 - x_a)^2}, \rho(x_2) = \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} e^{-\frac{\beta k}{2}(x_2 - x_b)^2}$$

ו. המרחק הממוצע בין החלקיקים הוא

$$\langle x_2 - x_1 \rangle = \langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle$$

כאשר

$$\begin{aligned} \langle x_1 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x_1 \rho(x_1) dx_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x_1 \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}} e^{-\frac{\beta k}{2}(x_1 - x_a)^2} dx_1 \\ &= x_a \end{aligned}$$

ובאותו האופן

$$\langle x_2 \rangle = x_b$$

ז. הפוטנציאל החשמלי במרחב הוא  $\phi(x) = -Ex$  לחלקיקים כעת ישנה גם אנרגיה פוטנציאלית

$$U(x) = -Exq$$

פונקציית החלוקה אז תהיה

$$\begin{aligned}
Z &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\left(\frac{k}{2}(x_1-x_a)^2-qEx_1\right)} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\left(\frac{k}{2}(x_2-x_b)^2+qEx_2\right)} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p_1^2}{2m}} dp_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p_2^2}{2m}} dp_2 \\
&= \frac{(2\pi)^2}{\beta^2 k} m e^{\frac{(2\beta Ekqx_a+\beta E^2q^2)}{2k}} e^{\frac{(-2\beta Ekqx_b+\beta E^2q^2)}{2k}}
\end{aligned}$$

ח. כמו קודם עלינו לחשב את  $\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle$  על ידי חישוב דומה לזה שנעשה בסעיף ו' נקבל

$$\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle = x_a + \frac{E}{k}q - x_b + \frac{E}{k}q$$

הממוצע אינו תלוי בטמפרטורה, אמנם בטמפרטורות גבוהות יותר הפלקטואציות של המיקום סביב נקודת שיווי המשקל יהיו גדולות יותר, אבל המיקום הממוצע של החלקיקים אינו תלוי בטמפרטורה.