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.

א. מה האנרגיה של מצב מיקרו כלשהו של המערכת?
ב. רשמו את פונקציית החלוקה של המערכת.
ג. מה האנרגיה הממוצעת של המערכת?
ד. מצאו את קיבול החום של המערכת, שרטטו אותו כפונקציה של הטמפרטורה עבור $\epsilon_1 = 5[meV]\,,\epsilon_2 = 7[meV]\ ,\ \epsilon_3 = 10[meV]$.
ה. בהנחה ש$\epsilon_1,\epsilon_2,\epsilon_3$ הם מאותו סדר גודל, מהו התנאי על הטמפרטורה בקירוב טמפרטורות גבוהות? מהו התנאי בקירוב הטמפרטורות הנמוכות?
ו. 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.

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

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

כאשר

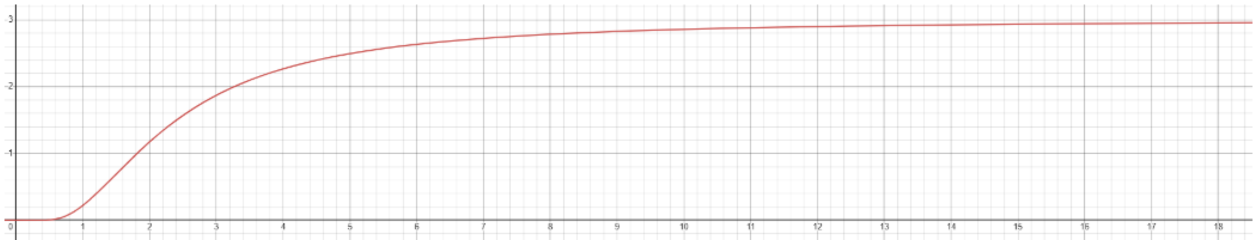
$$\beta \equiv \frac{1}{K_BT}$$

ג. האנרגיה הממוצעת תתקבל מ

$$<\mathrm{E}> = -\frac{1}{\mathrm{z}}\frac{\partial Z}{\partial\beta} = \frac{\epsilon_1}{e^{\beta\epsilon_1}-1} + \frac{\epsilon_2}{e^{\beta\epsilon_2}-1} + \frac{\epsilon_3}{e^{\beta\epsilon_3}-1}$$

ד. קיבול החום מקיים

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



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, $\lim_{T\to\infty} C = 3$

זוהי התנהגות של אוסילטור הרמוני.

שאלה 2: התפלגות מקסוול-בולצמן והגז האידיאלי

בתרגול ראיתם את התפלגות מקסוול בולצמן עבור חלקיקים חופשיים:

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

א. בצעו מעבר מקואורדינטות קרטזיות לקואורדינטות כדוריות עבור $f(v,\theta,\phi)dvd\theta d\phi$.

ידוע לנו ש- $v^2=\sqrt{v_x^2+v_y^2+v_z^2}$ משחק את תפקיד הרדיוס (בריבוע). התחשבות ביעקוביאן ובזוויות השונות תיתן:

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

$$=\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{-mv^2/2k_BT}v^2\sin\theta dvd\theta d\phi$$

כאשר שימו לב לכך שהתחשבנו גם ביעקוביאן.

ב. ביצוע אינטגרל על פני כל הזוויות המרחביות מוריד את התלות הזוויתית ומוסיף פקטור של 4π (שכן ההתפלגות אינה תלויה בזוויות כלל). הביטוי המתקבל הוא ההתפלגות $f(v)$ אשר ראיתם בגליון הקודם כאשר התבקשתם למצוא את משוואת המצב של הגז האידיאלי. חשבו את $\langle v^2\rangle$ והראו שמתקבל הביטוי אותו לקחנו כנתון בגליון שיעורי הבית הקודם.

הערה: ניתן להיעזר באינטגרלים גאוסים מוכרים.

נבצע אינטגרל מ-0 עד אינסוף על הביטוי $v^2\cdot 4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} v^2e^{-mv^2/2k_BT}dv$:

$$\langle v^2\rangle=\int_0^\infty 4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} v'^4e^{-mv'^2/2k_BT}dv'=4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2}\int_0^\infty v'^4e^{-mv'^2/2k_BT}dv'=$$

$$=4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2}\cdot\frac{\Gamma(5/2)}{2\cdot\left(\frac{m}{2k_BT}\right)^{5/2}}=4\pi\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2}\cdot\frac{\frac{3\sqrt{\pi}}{4}}{2\cdot\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{5/2}\cdot\pi^{5/2}}=$$

$$=\frac{3}{\frac{m}{k_BT}}=\frac{3k_BT}{m}$$

וזוהי אכן התוצאה לה ציפינו!

ג. השתמשו במשפט החלוקה השווה כדי לקבל את אותו ביטוי מבלי להשתמש באינטגרלים מסובכים.

לפי משפט החלוקה השווה, כל דרגת חופש מקבלת $\frac{k_B T}{2}$ אנרגיה בממוצע לכל חלקיק. לחלקיק חופשי 3 דרגות חופש בכל ציר ולכן הוא יקבל בממוצע $\frac{3k_B T}{2}$ אנרגיה. יתקיים לכן:

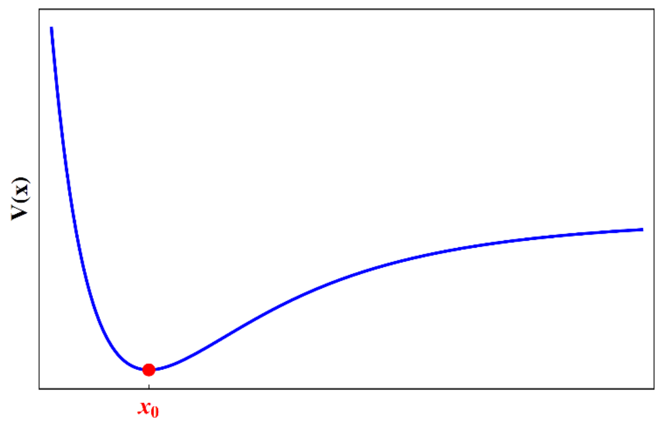
$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \frac{m\left\langle v^2 \right\rangle}{2} = \frac{3k_B T}{2} \Rightarrow \left\langle v^2 \right\rangle = \frac{3k_B T}{m}$$

הערה: למהדרין, ניתן גם לקחת את האנרגיה הממוצעת לכל דרגת חופש (x, y, z) ולסכום את התרומה של כל האנרגיות שכן $\left\langle v^2 \right\rangle = \left\langle v_x^2 \right\rangle + \left\langle v_y^2 \right\rangle + \left\langle v_z^2 \right\rangle$ (הדבר נכון שכן הנחנו שכל דרגת חופש אינה תלויה ב-2 האחרות).

שאלה מספר 3

נתונה שרשרת אטומים **חד-ממדית** כך שכל אטום נמצא בפוטנציאל $V(x)$ כפי שמצויר באיור. נקודת המינימום של הפוטנציאל מסומנת ב-x_0 בנוסף נניח ש-$V(x_0)=0$. ידועים מספר פרמטרים של הפוטנציאל:

$$V(x_0)=0,\qquad \frac{d^2V(x_0)}{dx^2}\equiv\kappa,\qquad \frac{d^3V(x_0)}{dx^3}=-\kappa_3,\quad \kappa,\kappa_3>0$$



מרחק בין האטומים

בשאלה נקבל ביטוי עבור מקדם התפשטות התרמי של שרשרת האטומים (מוצק בחד ממד) המוגדר כ- $\alpha\equiv\frac{1}{x_0}\frac{d\langle x_{atom}\rangle}{dT}$.

הדרכה כללית: עבור כל הסעיפים בהם תתבקשו לחשב מיקום הממוצע הניחו גבולות האינטגרציה $-\infty$ עד ∞

א. הסבירו את המשמעות של מקדם התפשטות התרמי בהתבסס על ההגדרה שלו. מהן היחידות של המקדם הנ״ל?

ההגדרה מרמזת לנו שמקדם ההתפשטות התרמית מבטא את השינוי של מיקום הממוצע של אטום כתלות בטמפרטורה. (ביחס למיקום הממוצע שהתקבל בטמפרטורה נתונה כלשהי)

$$[\alpha]=K^{-1}$$

ב. כעת נניח שהאטומים יכולים להחליף חום בינהם ועם הסביבה (אמבט חום חיצוני). כתבו את הביטוי **הכללי** לפונקציית החלוקה עבור אטום בודד בשרשרת וכן כתבו ביטוי עבור המיקום הממוצע של האטום הנ״ל.

מדובר בצבר קנוני של חלקיקים לכן ביטוי עבור פונקציה חלוקה (בדומה לתרגול 4) הינו

$$Z==\underbrace{\int e^{-\beta p^2/2m}dp}_{\sqrt{2m\pi/k_bT}}\int e^{-\beta V(x)}dx$$

כמובן שלא ניתן להעריך עדיין מהו גודל של החלק המרחבי (לא חובה לחשב את החלק של תנע, הוא גם ככה יצטמצם בביטוי עבור מיקום הממוצע)
ביטוי עבור המיקום הממוצע של החלקיק הינו

$$\langle x\rangle = \frac{\int e^{-\beta p^2/2m}dp \int xe^{-\beta V(x)}dx}{Z} = \frac{\int xe^{-\beta V(x)}dx}{\int e^{-\beta V(x)}dx}$$

ג. כתבו את קירוב טיילור לפוטנציאל $V(x)$ עד **<u>לסדר שלישי</u>** מסביב לנקודת המינימום x_0. הסבירו את המשמעות של כל אחד ממקדמי הפולינום וכתבו את היחידות שלהם. מהו הגודל של האיבר מהסדר ראשון? נמקו!

נעזר בסימונים שנתנו בהגדרת השאלה

$$V(x) \approx \underbrace{V(x_0)}_{0} + \underbrace{\left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x=x_0}}_{0}(x-x_0) + \frac{1}{2!}\underbrace{\left.\frac{d^2V(x)}{dx^2}\right|_{x=x_0}}_{\kappa}(x-x_0)^2 + \frac{1}{3!}\underbrace{\left.\frac{d^3V(x)}{dx^3}\right|_{x=x_0}}_{-\kappa_3}(x-x_0)^3$$

$$V(x) = \frac{\kappa}{2}(x-x_0)^2 - \frac{\kappa_3}{6}(x-x_0)^3$$

סדר אפס- ערך של אנרגיה פוטנציאלית בנקודת מינימום (יחידות: אנרגיה)

סדר ראשון – מתאפס בנקודת המינימום בהגדרה, משמעות היא כוח שפועל על החלקיק בשיווי משקל (יחידות: אנרגיה למרחק, ניוטון)

סדר שני – קירוב של פוטנציאל למתנד הרמוני, מקדמם מסמן גודל של קבוע קפיץ (יחידות: כוח למרחק, ניוטון למטר)

סדר שלישי – סטייה של פוטנציאל מצורה הרמונית (יחידות: כוח למרחק בריבוע, ניוטון למטר בריבוע)

ד. בסעיף זה בלבד, קחו את הקירוב עד לסדר שני וחשבו מהו **המיקום הממוצע** של האטום **ומקדם התפשטות התרמי**. הסבירו למה קירוב לסדר שני אינו מספיק בשביל לקבל את התפשטות התרמית של האטומים.

למעשה לא צריכים לחשב את האינטגרל, כי עבור קירוב מסדר שני ההתפלגות נתונה על ידי התפלגות גאוסית עם מיקום הממוצע של x_0. הסבר פיסיקאלי יותר הוא שעבור סדר שני אנו תארנו את תנועת האטום כמתנד הרמוני שמתנדנד בסיס נקודת שיווי משקל x_0

מקדם התפשטות התרמי הינו

$$\alpha = \frac{1}{x_0}\frac{dx_0}{dT} = 0$$

בעזרת קירוב לסדר שני לא הצלחנו לקבל ביטוי לא טריוויאלי עבור מקדם התפשטות תרמי, הסיבה לך היא שמתנד הרמוני עם עליית הטמפרטורה רק משנה את אמפליטודת התנודה אך המיקום ממוצע נשאר ללא שינוי (מכיוון שפוטנציאל סימטרי ביחס לנקודת המינימום).

בקירוב לסדר שני נקבל $V(x) = \frac{\kappa}{2}(x-x_0)^2$ לפיכך נקבל מיקום הממוצע

$$\langle x_0\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\beta V(x)}dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta V(x)}dx} \approx \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx} = x_0$$

$$(1)\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx = \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa\beta}}$$

$$(2)\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx = \sqrt{\frac{2}{\kappa\beta}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(y\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}+x_0\right)e^{-y^2}dy = \sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}x_0$$

$$y \equiv \sqrt{\beta\kappa/2}(x-x_0) \rightarrow x = y\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}+x_0 \rightarrow dx = \sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}dy$$

ה. כעת ניקח את הקירוב של הפוטנציאל עד לסדר שלישי בטור טיילור. בשביל להקל על החישובים נשתמש בקירוב הבא :

$$e^{f(x)} \approx e^{f(x_0)+\frac{df(x_0)}{dx}(x-x_0)+\frac{d^2f(x_0)}{2!dx^2}(x-x_0)^2} \times \left(1+\frac{d^3f(x_0)}{3!\,dx^3}(x-x_0)^3\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-x^2}dx = 3\sqrt{\pi}/4$$

היעזרו בקירוב ובאינטגרל הנתון וחשבו את **המיקום הממוצע** של האטום ואת **מקדם ההתפשטות התרמי**.

נשתמש בקירוב שהציעו לנו ונקבל

$$e^{-\beta V(x)} \approx e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}\left(1+\frac{\beta\kappa_3}{6}(x-x_0)^3\right)$$

חישוב מחנה (באדום מסומנים דברים שחושבו בסעיף הקודם)

$$(1)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx + \underbrace{\frac{\beta\kappa_3}{6}\int_{-\infty}^{\infty}(x-x_0)^3 e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx}_{odd\ function=0} = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta\kappa}}$$

חישוב חלק של מונה

$$(2)\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta\kappa}}x_0$$

$$(3)\int_{-\infty}^{\infty} x(x-x_0)^3 e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx$$

$$= \left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^5 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-y^2}dx}_{3\sqrt{\pi}/4} + x_0\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} y^3 e^{-y^2}dx}_{0}$$

$$= \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^5$$

$$y \equiv \sqrt{\beta\kappa/2}(x-x_0) \rightarrow x = y\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}+x_0 \rightarrow dx = \sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}dy$$

$$\langle x\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}\left(1+\frac{\beta\kappa_3}{6}(x-x_0)^3\right)dx}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}\left(1+\frac{\beta\kappa_3}{6}(x-x_0)^3\right)dx}=x_0+\frac{\beta\kappa_3}{6}\frac{\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^5}{\sqrt{\frac{2\pi}{\beta\kappa}}}$$

$$\langle x\rangle=x_0+\frac{\kappa_3}{2\kappa^2}\times k_bT$$

חישוב של מקדם התפשטות טרמי

$$\alpha=\frac{\kappa_3}{2\kappa^2}\times k_b$$

ו. **סעיף בונוס:** הסבירו את הקירוב בו השתמשנו בסעיף ה׳. כתבו מהו תנאי עבור טמפרטורה כך שהקירוב יהיה תקף, הביטו את התשובה בעזרת k_b,κ,κ_3 **בלבד**. **<u>רמז</u>**: השתמשו במשפט החלוקה השווה בשביל להעריך את גודל של $(x-x_0)$.

נשים לב שבקירוב שביצענו הסתמכנו על זה שאיבר הריבועי הרבה יותר גדול מהאיבר בחזקת שלוש (כי את האיבר הריבוע נשאר באקספוננט ואת שלישי פיתחנו לטור טיילור). לכן מתקיים

$$\frac{\kappa}{2}(x-x_0)^2\gg\frac{\kappa_3}{6}(x-x_0)^3$$

$$\frac{3\kappa}{\kappa_3}\gg|x-x_0|$$

כעת נרצה להיפתר מ-$x-x_0$ מכיוון שבקירוב שני האנרגיה הינה

$$E=\frac{p^2}{2m}+\frac{\kappa|x-x_0|^2}{2}$$

ניתן להשתמש במשפט החלוקה השווה ולהקצות לחלק של פוטנציאל $\frac{1}{2}k_bT$

לפיכך נקבל ש- $|x-x_0|^2\approx\frac{k_bT}{\kappa}$

לבסוף נקבל ש-

$$\frac{3\kappa}{\kappa_3}\gg|x-x_0|=\sqrt{\frac{k_bT}{\kappa}}$$

$$\frac{9\kappa^3}{\kappa_3^2}\gg k_bT$$