

תרגיל בית מספר 2: אנטרופיה, מודל איינשטיין וגומיות

שאלה 1:

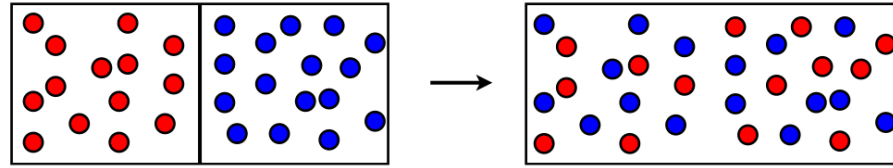
- התייחסו למערכת הבאה המורכבת מ-2 חלקיקים בעלי ספין 1 (3 מצבי ספין: $-1, 0, 1$) ו-2 חלקיקים בעלי ספין $\frac{1}{2}$ (שני מצבי ספין: $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$). ניתן להניח שהחלקיקים אינם מובחנים.
- תזכורת: חלקיקים מהסוג הראשון נקראים בוזונים (מקבלים ערכי ספין שלם) וחלקיקים מהסוג השני נקראים פרמיונים (מקבלים ערכי ספין חצי שלם). נלמד בהמשך הקורס בפירוט על הסטטיסטיקה שלהם.
- נגדיר מצב מאקרוסקופי של המערכת עפ"י ערך הספין הכולל (סכום הספינים של כל החלקיקים) רשמו את כל המצבים המאקרוסקופיים, כמה מצבים כאלה ישנם?
 - חשבו את הריבוי (Ω) של כל מצב מאקרוסקופי.
 - מה המצב המאקרוסקופי הסביר ביותר? מה הסתברות שלו בהנחה שכל מצב מיקרוסקופי יכול להתקבל בהסתברות שווה?
 - רשמו ביטוי לאנטרופיה של המצב הסביר ביותר.

שאלה 2:

- נניח גביש המורכב מ- N אתרים מסוג A ו- N אתרים מסוג B .
- N אטומים זהים מסתדרים על פני האתרים בגביש כאשר n_A מהאטומים מאכלסים אתרים מסוג A ו- $n_B = N - n_A$ מאכלסים אתרים מסוג B . אם אטום מאכלס אתר מסוג A יש לו אנרגיה $E = \epsilon$ ואם אטום מאכלס אתר מסוג B יש לו אנרגיה $E = -\epsilon$. אנו מניחים כי $N, n_A, n_B \gg 1$.
- מה האנרגיה הכוללת U של מצב מאקרו כלשהו של המערכת?
 - מה הריבוי של כל מצב מאקרו?
 - רשמו ביטוי לאנטרופיה באמצעות N, n_A וקורבו אותו באמצעות קירוב סטירלינג.
 - בטאו את האנטרופיה באמצעות אנרגיית המערכת U, N ו- ϵ . קרבו את האנטרופיה לפונקציה ריבועית של האנרגיה, מה הקירוב בו השתמשתם? מצאו את האנרגיה של המערכת במצב שיווי משקל.

שאלה 3:

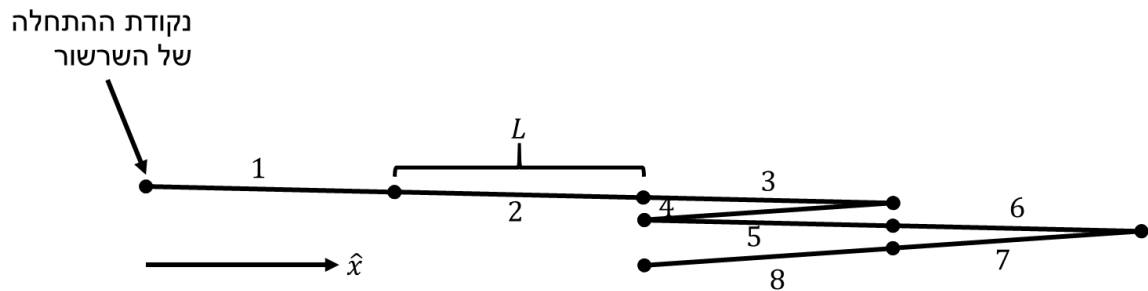
- נתונים 3 מוצקי איינשטיין זהים ומצומדים כך שאנרגיה יכולה לעבור ביניהם, כל מוצק הינו בעל N מתנדים, ובכל המערכת המוצמדת (שלושת המוצקים המוצמדים) ישנן $3n_e$ מנות אנרגיה. בזמן מסוים מפרידים את שלושת המוצקים (מבודדים אותם כל אחד מהשני) כלומר לא מאפשרים מעבר אנרגיה ביניהם, איך פעולה זו משפיעה על האנטרופיה של המערכת כולה (שלושת המוצקים)? הסבירו את תשובתכם. (אין צורך בחישובים)
- *הניחו שברגע ההפרדה מנות האנרגיה מתחלקות באופן אקראי בין שלושת המוצקים.
- ממיסים גביש של מלח ($NaCl$) בתוך כוס מים, איך פעולה זו משפיעה על האנטרופיה של כוס המים? הסבירו את תשובתכם. (אין צורך בחישובים).
- מקררים כוס מים במקפוא עד שהמים הופכים לקרח, איך פעולה זו משפיעה על האנטרופיה של כוס המים? הסבירו את תשובתכם. (אין צורך בחישובים).
- במיכל יש מחיצה שמחלקת את המיכל לשני חלקים, כאשר בכל חלק יש אותה כמות של גז מסוים, המחיצה אינה מאפשרת מעבר של מולקולות הגז מצד אחד לצד שני, ברגע מסוים מסירים את המחיצה, ומאפשרים לשני הגזים להתערבב, איך פעולה זו משפיעה על האנטרופיה של כוס המים? הסבירו את תשובתכם. (אין צורך בחישובים).



שאלה 4:

בתרגול ראינו מספר דוגמאות למערכות שניתן לפגוש בטבע וניסינו להבין כיצד הן מתנהגות באופן אינטואיטיבי. אחת מהדוגמאות הייתה פולימר, אשר הינו אוסף של מולקולות זהות המשורשרות ביניהן ואשר יכולות להימצא בכל כיוון. כעת נבדוק באופן נומרי כיצד מתנהג פולימר שכזה.

נתונה שרשרת חד-מימדית, אשר מכילה N מולקולות (קווים ישרים) המשורשרות זו לזו. אורך כל אחת מהמולקולות הוא L . כל מולקולה משורשרת יכולה להיות בכיוון \hat{x} או לכיוון $-\hat{x}$. דוגמה לשרשרת כזו ניתנת באיור הבא:



שימו לב: הקווים באיור נוטים מעט למעלה/למטה כדי שהם לא יעלו אחד על השני (כלומר שנראה באופן ברור את אופי השרשר של כל קו).

נגדיר את כיוון כל אחת מהמולקולות החל מנקודת ההתחלה הנתונה. למשל, במקרה של האיור המצורף, מולקולות 1,2,3,5,6 מצביעות לכיוון \hat{x} בעוד שמולקולות 4,7,8 מצביעות לכיוון $-\hat{x}$.

אחד הפרמטרים המאפיינים את הפולימר זה מרחק בין נקודת ההתחלה לנקודת הסוף של השרשרת, נקרא לו אורך השרשרת. נגדיר את הפרמטר הזה **כסכום הכיוונים** כפול אורך כל מולקולה, בדוגמה לעיל האורך של השרשרת הינו 2 (ולא 4).

א. עבור שרשרת כלשהיא (ניתן להניח ש- N גדול מאוד), מהו האורך בו הכי סביר למצוא את השרשרת? נמקו במילים.

כעת נסמן את אורך השרשרת הכולל ב X . בטאו את X באמצעות מספר המולקולות שבכיוון ימינה n_R ומספר המולקולות שבכיוון שמאל n_L . בהמשך השאלה נוכיח את קיום הטענה שהסברתם בסעיף א' מתוך הדרישה למקסימום אנטרופיה.

ב. כעת בטאו את n_L ו n_R באמצעות X ו N .

ג. רשמו ביטוי ל Ω שהוא מספר האפשרויות שבו אפשר להרכיב את השרשרת מ N מולקולות.

הביטוי צריך להיות תלוי ב n_L, n_R ו N .

ד. קבלו ביטוי לאנטרופיה של המערכת, השתמשו בקירוב סטירלינג ולאחר מכן בטאו את האנטרופיה כפונקציה של X (והקבועים N ו L) בלבד.

ה. מצאו את אורך השרשרת X המקיים את הדרישה למקסימום אנטרופיה, ואת n_R, n_L המתאימים לו.

ו. בתרגול ראינו שכאשר מותחים את השרשרת, האנטרופיה של המערכת קטנה. הסבירו במילים כיצד הדבר מתיישב עם החוק השני של התרמודינמיקה.

ז. כתבו קוד מטלב מסמלץ את התנהגות השרשרת חד-מימדית תחת התנאים/הנחות הבאים:

- הניחו 100 חוליות בשרשרת
- הניחו שכל יחידה בשרשרת יכולה לפנות ימינה או שמאלה בהסתברות $p = 1/2$
- הגרילו עבור כל יחידה בשרשרת את כיוונה (הניחו ש-1 מסמן כיוון חיובי ו-0 מסמן כיוון שלילי של ציר \hat{x})
- חשבו את אורך השרשרת שהוגדר לעיל
- חזרו על סעיף הקודם 100,000 פעמים
- בנו היסטוגרמה של האורכים שקיבלתם

ח. מה הצורה של היסטוגרמת האורכים? מהם המיקום הממוצע והשונות שקיבלתם? למה יש מקומות ריקים בהיסטוגרמה?

ט. שנו את מספר החוליות בשרשרת ל-101. איך השתנתה ההיסטוגרמה? הסבירו.

MATLAB Remarks:

We strongly suggest to avoid for loops and use the following functions

<code>randi([Imin,Imax],N,M)</code>	This function builds a NxM matrix with uniformly selected random integers in the range spanned by [Imin,Imax]
<code>histogram(data,BinEdges,... "Normalization","probability")</code>	This function build a histogram based on the data array, where BinEdges specifies the histogram bins value.

Bonus Section

Generalize the previous section to a two-dimensional polymer. This time assume that the angle of each chain can be distributed between $[-\pi, \pi]$.

Plot the 2D histogram of the effective length.