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.

א. נגדיר מצב מאקרוסקופי של המערכת עפ"י ערך הספין הכולל (סכום הספינים של כל החלקיקים) רשמו את כל המצבים המאקרוסקופים, כמה מצבים כאלה ישנם?

נשים לב שכל הערכים $0,\pm1,\pm2,\pm3$ מתקיימים ולכן נצפה ל-7 מאקרו-מצבים.

ב. חשבו את הריבוי (Ω) של כל מצב מאקרוסקופי.

ספירה של כל המצבים תיתן:

$$\Omega(s=-3)=\Omega(s=3)=1$$
$$\Omega(s=-2)=\Omega(s=2)=4$$
$$\Omega(s=-1)=\Omega(s=1)=8$$
$$\Omega(s=0)=10$$

ג. מה המצב המאקרוסקופי הסביר ביותר? מה הסתברות שלו בהנחה שכל מצב **מיקרוסקופי** יכול להתקבל בהסתברות שווה?

המאקרו-מצב הסביר ביותר הינו המצב שעבורו $s=0$ שכן לו יש את הריבוי הגדול ביותר. נקבל שההסתברות לקבלו תהיה:

$$P=\frac{10}{36}=0.28$$

ד. רשמו ביטוי לאנטרופיה של המצב הסביר ביותר

בתרגול ראינו שהביטוי לאנטרופיה הינו $S=k_B\ln\Omega$, כלומר שהאנטרופיה של המצב הסביר ביותר תהיה $S(s=0)=k_B\ln 10=2.3k_B$

שאלה 2:

נניח גביש המורכב מN 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 $N, n_A, n_B \gg 1$.

א. מה האנרגיה הכוללת U של מצב מאקרו כלשהו של המערכת?
ב. מה הריבוי של כל מצב מאקרו?
ג. רשמו ביטוי לאנטרופיה באמצעות N, n_A וקרבו אותו באמצעות קירוב סטירלינג.
ד. 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.

א. מצב מאקרו כלשהו נקבע על ידי מספר האטומים באתרים מסוג A ומספר האטומים באתרים מסוג B.

לכן אנרגיה של מצב מאקרו נקבעת לפי

$$U = n_A\epsilon - (N - n_A)\epsilon$$

ב. ריבוי של מצב מאקרו הוא מספר האפשרויות לסדר n_A אטומים על פני N אתרים מסוג A כפול מספר האפשרויות לסדר $N - n_A$ אטומים על פני N אתרים מסוג B. כלומר

$$\Omega = \frac{N!}{n_A!\,(N-n_A)!} \times \frac{N!}{n_A!\,(N-n_A)!} = \left(\frac{N!}{n_A!\,(N-n_A)!}\right)^2$$

ג. האנטרופיה ניתנת על ידי

$$S = ln\Omega = 2[\ln(N!) - \ln(n_A!) - \ln(N-n_A!)]$$
$$\approx 2[Nln(N) - n_A\ln(n_A) - (N-n_A)\ln(N-n_A)]$$

ד. נשים לב כי

$$n_A = \frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}$$

לכן

$$S \approx 2\left[Nln(N) - \left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right)\ln\left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)\ln\left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)\right]$$

מצב שיווי משקל הוא מצב בו האנטרופיה מקסימלית.

נגזור את האנטרופיה ונשווה לאפס כדי לקבל

$$0 = \frac{dS}{dU} = -\frac{1}{2\epsilon}\ln\left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right) + \frac{1}{2\epsilon}\ln\left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)$$

לכן במצב שיווי משקל $U = 0$, תוצאה זו ברורה, במצב שיווי משקל מחצית האטומים מאכלסים אתרים מסוג A ומחציתם השניה אתרים מסוג B.

כדי לקרב את האנטרופיה לפונקציה ריבועית נשתמש בקירוב $U \ll N\epsilon$ (או $\frac{U}{N\epsilon} \ll 1$)

נרשום

$$S \approx 2\left[Nln(N) - \left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right)\ln\left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)\ln\left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)\right]$$

$$= 2\left[Nln(N) - \left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right)\ln\left(\frac{N}{2}\left(\frac{U}{N\epsilon} + 1\right)\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)\ln\left(\frac{N}{2}\left(1 - \frac{U}{N\epsilon}\right)\right)\right]$$

$$= 2\left[Nln(N) - Nln\left(\frac{N}{2}\right) - \left(\frac{U}{2\epsilon} + \frac{N}{2}\right)\ln\left(1 + \frac{U}{N\epsilon}\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{U}{2\epsilon}\right)ln\left(1 - \frac{U}{N\epsilon}\right)\right]$$

כעת נשתמש ב

$$\ln(1 \pm x) \approx \pm x$$

כדי לקבל את הקירוב המבוקש

$$S \approx 2Nln(2) - 2\frac{1}{N}\left(\frac{U}{\epsilon}\right)^2$$

מכאן גם ניתן לראות בבירור כי מצב של אנטרופיה מקסימלית הוא כזה בו

$$U = 0$$

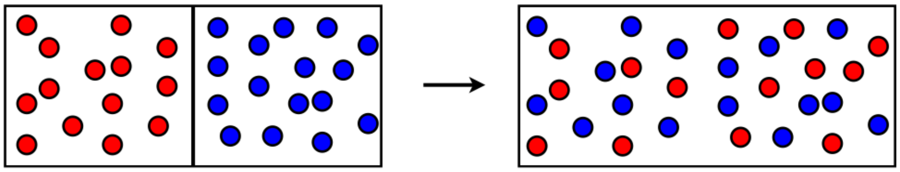
שאלה 3:

א. נתונים 3 מוצקי איינשטיין זהים ומצומדים כך שאנרגיה יכולה לעבור ביניהם , כל מוצק הינו בעל N מתנדים, ובכל המערכת המצומדת (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.
פעולה זו מקטינה את אפשריות הסידור של מנות האנרגיה במערכת כי היא מאלצת את המנות להתחלק באופן מסוים בין שלושת המערכות כך שבכל מערכת מספר המנות מוגדר וקבוע, ובכך מנות אנרגיה ממוצק מסוים לא יכולות לעבור למוצק אחר, אילוץ זה לא היה קודם כאשר המוצקים היו מצומדים ולכן פעולה זו **מקטינה** את האנטרופיה של המערכת

ב. ממיסים גביש של מלח $(NaCl)$ בתוך כוס מים, איך פעולה זו משפיעה על האנטרופיה של כוס המים? הסבירו את תשובתכם. (אין צורך בחישובים).
המסת מלח במים מוסיפה יונים למים ומגדילה את אפשריות הסידור של המים והיונים של המלח ולכן פעולה זו **מגדילה** את האנטרופיה.

ג. מקררים כוס מים במקפיא עד שהמים הופכים לקרח, איך פעולה זו משפיעה על האנטרופיה של כוס המים? הסבירו את תשובתכם. (אין צורך בחישובים).
פעולה זו מקטינה את אפשריות הסידור של מולקולות המים במערכת מכיוון שעכשיו המולקולות מסתדרות באופן ספציפי בגביש הקרח, כלומר עכשיו התווסף אילוץ שמכריח את מולקולות המים להיות ממוקמים באופן מסוים, דבר זה **מקטין** את האנטרופיה של המערכת.

ד. 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).

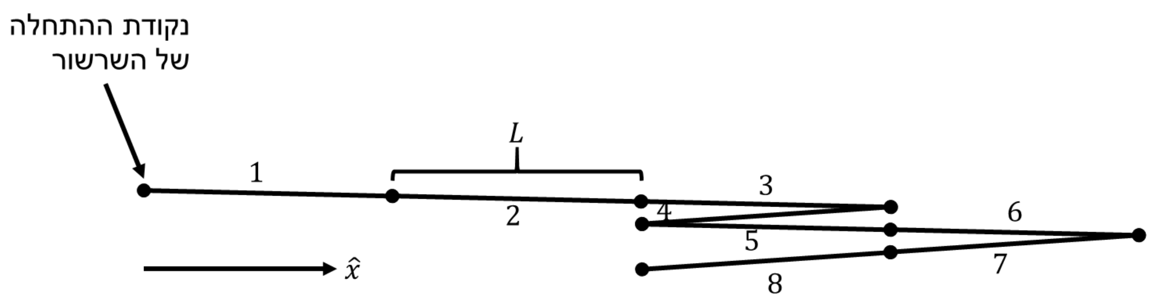


פעולה זו מגדילה את אפשריות הסידור של המערכת, כי עכשיו מולקולות מצד אחד יכולות להימצאות בצד השני של המחיצה, כלומר לכל מולקולת גז יש עכשיו יותר "מקומות" שהיא יכולה להיות בהם, דבר זה מקטין את האילוצים במערכת **ומגדיל** את האנטרופיה.

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 בינהן ואשר יכולות להימצא בכל כיוון. כעת נבדוק באופן נומרי כיצד מתנהג פולימר שכזה.

נתונה שרשרת חד-מימדית, אשר מכילה Nמולקולות (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 השרשור 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, בדוגמא לעיל האורך של השרשרת הינו 2 (**ולא 4**).

א. עבור שרשרת כלשהיא (ניתן להניח ש-Nגדול 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 שמאלn_L . בהמשך השאלה נוכיח את קיום הטענה שהסברתם בסעיף א' מתוך הדרישה למקסימום אנטרופייה.

ב. כעת בטאו אתn_L וn_R באמצעות X ו N.

ג. רשמו ביטוי ל Ω שהוא מספר האפשרויות שבו אפשר להרכיב את השרשרת מN מולקולות. הביטוי צריך להיות תלוי ב n_R, n_L 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. תשנו את מספר החוליות בשרשרת ל-101. איך השתנתה ההיסוגרמה? הסבירו.

MATLAB Remarks:

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

`randi([Imin,Imax],N,M)`	This function builds a `NxM` matrix with uniformly selected random integers in the rage spanned by `[Imin,Imax]`
`histogram(data,BinEdges,…` `"Normalization","probability")`	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.

א. האורך הסביר ביותר בו נמצא את השרשרת הוא האורך התואם למאקרו-מצב בעל הריבוי הגדול ביותר. המערכת שלפנינו היא למעשה מערכת שבה כל מולקולה יכולה להימצא באחד משני מצבים. ראינו שעבור מערכות כאלה, המצב הסביר ביותר הינו מצב בו חצי כלשהוא מהמערכת נמצא במצב אחד בעוד שהחצי השני נמצא במצב השני. עבור השרשרת שלנו הדבר מתורגם לאורך ממוצע שערכו אפס שכן במצב זה חצי מהשרשרת מכוון לכיוון אחד בעוד שהחצי השני מכוון לכיוון השני.

$$X = (n_R - n_L)L$$

ב. נשים לב כי $n_R + n_L = N$
אז ממשוואה זו והמהשוואה מסעיף א' נקבל

$$n_R = \frac{1}{2}\left(N + \frac{X}{L}\right)$$
$$n_L = \frac{1}{2}\left(N - \frac{X}{L}\right)$$

ג. זהו מספר האפשרויות לבחור n_R מולקולות המצביעות ימינה ו n_L המצביעות שמאלה מתוך N מולקולות.

$$\Omega = \frac{N!}{n_R!\, n_L!} = \frac{N!}{n_R!\,(N-n_R)!}$$

ד. האנטרופיה תינתן על ידי

$$S = ln\Omega = \ln(N!) - \ln(n_R!) - \ln((N-n_R)\,!)$$

נשתמש בקירוב סטרלינג כדי לקבל

$$S \approx NlnN - n_R\ln(n_R) - (N-n_R)\ln(N-n_R)$$
$$= NlnN - \frac{1}{2}\left(N + \frac{X}{L}\right)\ln\left(\frac{1}{2}\left(N+\frac{X}{L}\right)\right) - \left(\frac{N}{2} - \frac{X}{2L}\right)\ln\left(\frac{N}{2} - \frac{X}{2L}\right)$$

ה. אורך השרשרת המקיים את הדרישה למקסימום אנטרופיה יתקבל מ

$$0 = \frac{dS}{dX} = -\frac{1}{2L}\ln\left(\frac{N}{2} + \frac{X}{2L}\right) + \frac{1}{2L}ln\left(\frac{N}{2} - \frac{X}{2L}\right)$$

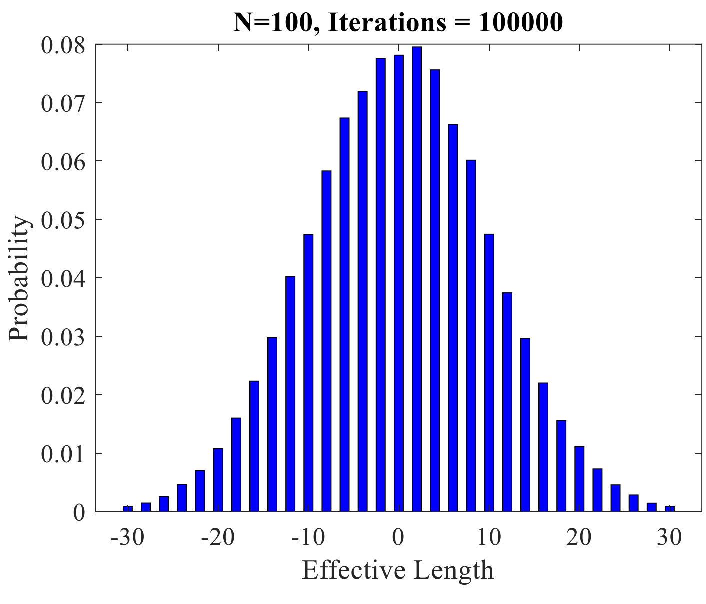
מכאן, אורך השרשרת עבורו האנטרופיה מקסימלית הוא

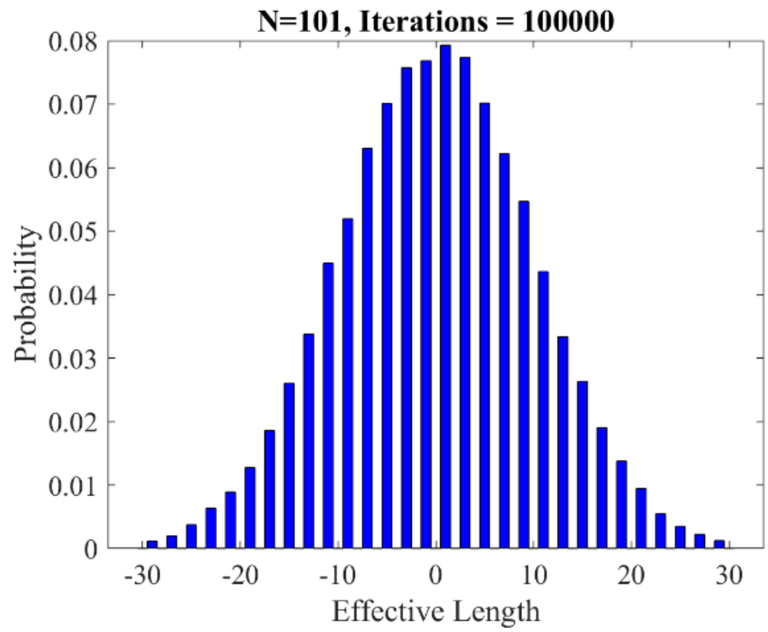
$$X = 0$$

כפי שציפינו.

ו. אמנם כאשר אנו מותחים את השרשרת אנחנו מקטינים את האנטרופיה שלה, אולם האנטרופיה הכוללת של השרשרת ושל הגורם שמתח אותה (למשל המתרגל) גדלה בסה"כ. מכאן שכאשר מנסים "למכור" לנו שהאנטרופיה קטנה, עלינו לזכור שהיא חייבת לגדול לפחות באותה הכמות (אם לא יותר) במקום אחר!

ז. + ח. +ט.




N=101, Iterations = 100000
Probability
0.08
0.07
0.06
0.05
0.04
0.03
0.02
0.01
0
-30
-20
-10
0
10
20
30
Effective Length