

[A07]

(2008 2.2)

$$u(r) \sim r^{-\gamma}$$

$$V = -3PV - \gamma U$$

ר3"

מכאן (דמיטריה קרמסקין) טמפרטורה של אטומים קרובים קי

$$-\sum \left\langle r \frac{\partial u}{\partial r} \right\rangle = -\frac{1}{2} N(N-1) \int \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) g(r) \frac{d^3 r}{V}$$

טמפרטורה

$$\langle a(r) \rangle \equiv \int a(r) g(r) \frac{d^3 r}{V}$$

טמפרטורה

$$r \frac{\partial u}{\partial r} = \gamma u$$

טמפרטורה

$$\left\langle r \frac{\partial u}{\partial r} \right\rangle = \gamma \langle u \rangle$$

טמפרטורה

$$-\sum \left\langle r \frac{\partial u}{\partial r} \right\rangle = -\gamma U$$

טמפרטורה

$$U = \sum_{i,j} \langle u \rangle$$

טמפרטורה של אטומים קרובים קי

$$H = H_0 + V$$

טמפרטורה

$$V = V_0 - \gamma U$$

טמפרטורה

$$V = -3PV - \gamma U$$

קראמר ✓
(דמיטריה קרמסקין)
טמפרטורה של אטומים קרובים קי

*

(2008 2.2)

A07

$$\sum_l \left\langle \vec{r}_e \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_e} V \right\rangle = \langle V \rangle$$

כאשר נכנס

$$V = \sum_{i>j} |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^\gamma$$

כאשר

$$\frac{\partial V}{\partial \vec{r}_e} = \gamma \sum_{i>j} |\vec{r}_{ij}|^{\gamma-1} \left[\frac{\partial(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{\partial \vec{r}_e} \delta_{ie} + \frac{\partial(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{\partial \vec{r}_e} \delta_{je} \right]$$

(?)

$$\sum_e \vec{r}_e \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_e} V = \gamma \sum_e \vec{r}_e \cdot \sum_{i>j} |\vec{r}_{ij}|^{\gamma-1} \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_{ij}|} \cdot (\delta_{ie} - \delta_{je})$$

$$= \gamma \sum_{i>j} |\vec{r}_{ij}|^{\gamma-1} \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_{ij}|} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

$$= \gamma \sum_{i>j} |\vec{r}_{ij}|^\gamma$$

לכן (?)

$$\left\langle \sum_e \vec{r}_e \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_e} V \right\rangle = \gamma \left\langle \sum_{i>j} |\vec{r}_{ij}|^\gamma \right\rangle = \gamma U$$

לכן

האנרגיה הפנימית הממוצעת

$$U = \left\langle \sum_{i>j} |\vec{r}_{ij}|^\gamma \right\rangle$$

כאשר

$$U = U_0 + V$$

אנרגיה פנימית

$$-3PV = U_0$$

לכן יתכן תמונת התנהגות של הצפיפות

$$\left\langle \sum_e \vec{r}_e \cdot \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_e} \right\rangle = U_0 + \gamma U = -3PV + \gamma U$$

לכן

$$K = \frac{-U}{2} = \frac{3PV + \gamma U}{2} \quad \text{נכון}$$

$$U = E - K \quad \text{נכון}$$

$$K = \frac{1}{2}(3PV + \gamma(E - K))$$

$$K\left(1 + \frac{\gamma}{2}\right) = \frac{1}{2}(3PV + \gamma E)$$

$$K = \frac{1}{\gamma + 2}(3PV + \gamma E)$$

$$E = K + U \quad \text{נכון} \quad \underline{\gamma = -2 \quad \text{נכון}}$$

$$K = \frac{1}{\gamma + 2}(3PV + \gamma(K + U))$$

$$K\left(1 - \frac{\gamma}{\gamma + 2}\right) = \frac{1}{\gamma + 2}(3PV + \gamma U)$$

$$2K = \frac{2}{\gamma + 2 - \gamma}(3PV + \gamma U) = 3PV - 2U$$

$$K + U = \frac{3}{2}PV = E \quad \text{נכון}$$

לפי הסיקור של ד"ר זאב נק' $\gamma = -2$ כי הסתגלות נמשכת