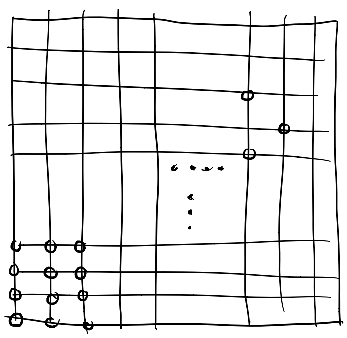
c) Solidoak: bi dimentsioko solidoa (1)

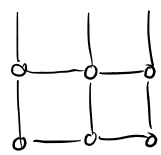
Bi dimentsioko solido xurgatzailea.

Har ezazu solido baten azala N_s sare-puntuz osatutako bi dimentsioko saretzat. Onar ezazu N_a atomo xurgatzen direla azalean ($N_a \ll N_s$). Beraz, xurgatutako atomo bat dute edo ez dute atomorik sare-puntuek. Xurgatutako atomoaren energia $E = -\epsilon$ da ($\epsilon > 0$). Onar ezazu azalean dauden atomoek ez dietela elkarri eragiten, ez dagoela haien arteko elkarrekintzarik.

1. Azala T tenperaturan badago, lor ezazu xurgatutako atomoen potentzial kimikoa, T, ϵ eta $\frac{N_a}{N_s}$ ratioaren funtzioan. Erabili multzo kanonikoa.
2. Berdin antzekoak diren atomoz osatutako gas ideal batekin kontaktuan badago azala, T tenperaturan, lortu $\frac{N_a}{N_s}$ ratioa, gasaren p presioaren funtzioan. Onar ezazu gasari n zenbaki-dentsitatea dagokiola.

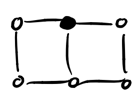


→

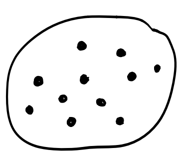


→ egon daiteke edo ez | partikula bat xurgatuta

N_s tokiak, sareko sare-puntuak bereizgarriak dira
etiketak



atomo bat xurgatuta



N_a partikulak bereiztezinak dira

baina partikulak sare-puntuetan bereizgarri

N_s
- Kontatzeari dagokionez zuzen batean jar daiteke solidoa "dimentsiobakarra", zenbatzean eta gero desegin!!
- Kontzeptualki errazten du errazagoa dela

Gainera, N_a atomo xurgatu dira gainerakoak, beraz, hori da sisteman dagoen partikula kop. xurgatuta daudenean, bakoitzeko energiaren ekarpena da $E = \epsilon$

aurreko problemaren baldintzetan gaude: kasu honetan, zuzenean kanonikoan kalkulatu

Kanonikoan eraiki beharreko magnitudea da partizio-funtzioa:

$$Z_N(T,V) = \sum_{E=0}^{\infty} g(E)\, e^{-E/k_BT}$$

N_a finko $\Rightarrow$ $E = N_a \cdot \epsilon$ sistemaren energia maila bakarra
$g(E)$ da egoeren dentsitatea $\equiv$ endakapena
E-rekin bateragarriak diren mikroegoeren kop.

$$\boxed{Z_{N_a}(T) = \Omega(N_a)\cdot e^{\frac{N_a \epsilon}{k_BT}}}$$

$$\Omega(N_a) = \frac{N_s!}{N_a!\,(N_s-N_a)!}$$

$$\boxed{Z_{N_a}(T) = \frac{N_s!}{N_a!\,(N_s-N_a)!}\, e^{-\frac{N_a \cdot \epsilon}{k_B T}}}$$

$$F = -(k_B T) \ln Z_N(T,N)$$

definizione

$$F_{N_a}(T) = -(k_B T)\cdot \ln\left[\left(\frac{N_s!}{N_a!\,(N_s-N_a)!}\right)\cdot e^{+\frac{N_a \epsilon}{k_B T}}\right] \quad -(-\epsilon)$$

$$-(k_B T)\cdot\left\{\ln\left(\frac{N!}{N_a!\,(N_s-N_a)!}\right) + \ln\left(e^{+\frac{N_a\epsilon}{k_B T}}\right)\right\}$$

$$-(k_B T)\left\{ \qquad\qquad + \frac{N_a \cdot \epsilon}{k_B T}\right\} \quad + \text{S.H.}$$

$$-(k_B T)\left\{N_s \ln N_s - N_a \ln N_a - (N_s-N_a)\ln(N_s-N_a) + \frac{N_a \epsilon}{k_B T}\right\} \qquad N_s \to N,\ N_a \to N_a$$

$$N \ln N - N \ln(N-N_a) - N_a \ln N_a + N_a \ln(N-N_a)$$

$$\boxed{F_{N_a}(T) = -(k_B T)\left\{N \ln\left(\frac{N}{N-N_a}\right) + N_a \ln\left(\frac{N-N_a}{N_a}\right)\right\} - \epsilon N_a}$$

$$\mu \equiv \frac{\partial F(T,V,N)}{\partial N}$$

definizione

$$\mu_{N_a} = \frac{\partial F_{N_a}(T)}{\partial N_a} \Rightarrow \mu_{N_a} = -(k_B T)\cdot\left\{-\left(\ln N_a + \cancel{\frac{N_a}{N_a}}\right) - (-1)\cdot \ln(N-N_a) + \cancel{\left(\frac{N-N_a}{N-N_a}\right)(-1)}\right\} - \epsilon$$

$$-(k_B T)\left\{\ln\left(\frac{N-N_a}{N_a}\right)\right\} - \epsilon$$

$$\boxed{\mu_{N_a} = (k_B T) \ln\left(\frac{N_a}{N-N_a}\right) - \epsilon}$$

$$N \ggg N_a$$

$$\mu_{N_a} = (k_B T) \ln\left[\frac{N_a}{N\left(1-\frac{N_a}{N}\right)}\right] - \epsilon$$

$$\ln\left[\frac{\frac{N_a}{N}}{\left(1-\cancel{\frac{N_a}{N}}^{\,0}\right)}\right]$$

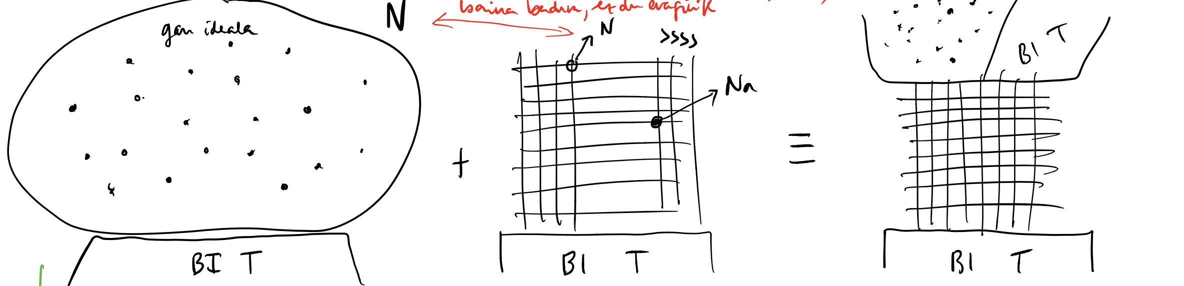
$$\boxed{\mu_{N_a} \simeq (k_B T) \ln\left(\frac{N_a}{N}\right) - \epsilon}$$

– Aurreko atalean "akademikoki" ebatzi da problema: atomoak xurgatu dituzte gainazalak, baina ez dakigu nondik. Bigarren atal honek xurgatutako duen atomoen jatorria argitzen du.

Gainazala eraman da ukipen kimikoan aurreko xurgatutako atomoz osatutako gas idealarekin; beraz, horixe da jatorria: gainazala dago gas ideal batekin ukipenean, ukipen kimikoan eta gas hori da materia-iturria.

↓ Tenperatura ere bai finkatuta dago, bero-iturri batekin ukipen termikoan jartzen baita gainazala. Horren antzekoa da, jakina, kanonikoan ebazten ari garela!

ez dute zertan berdinak izan (independente) baina badira, ez du eraginik



masa-trukeari dagokionez bere egoera kimikoa da gainazalarena egoera kimikoa da $\mu_{GI}(N,T,V)$

oreka kimikoan egonik $\mu_{GI}(N,T,V) = \mu_{Na}(T)$

– Ebatzi behar da gas ideala! demagun ebatzita dagoela, lortuta dagoela partizio-funtzioa

$$Z_N^{GI}(T,V) = \frac{1}{N!}\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)^N$$

$\lambda_T \equiv$ uhin-luzera termikoa $\lambda_T = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h}\right)^{1/2}$

partikula (puntual) bakar bati dagokion partizio-funtzioa

bereiztezin: Gibbs-ek eskuz sartutako faktorea, Gibbs-en paradoxa saihesteko

ebatziko

$$F_N^{GI}(T,V) = -(k_BT)\ln\left[\frac{1}{N!}\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)^N\right] + \text{S.H.}$$

$$-(k_BT)\left\{-\ln N! + N\ln\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)\right\}$$

$$-(k_BT)\left\{-\left(N\ln N - N\right) + N\ln\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)\right\}$$

$$-N\ln N + N + N\ln\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)$$

$$\boxed{F_N^{GI}(T,V) = -(k_BT)\left\{N\ln\left(\frac{V}{N\lambda_T^3}\right) + N\right\}}$$

$$\mu_N^{GI}(T,V) \equiv \frac{\partial F_N^{GI}(T,V)}{\partial N}$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = -(k_BT)\left\{-\left(\ln N + \cancel{\frac{N}{N}}\right) + \cancel{1} + \ln\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)\right\}$$

$$\mu_N = -(k_BT)\,\ln\left(\frac{V}{N\lambda_T^3}\right)$$

$$\mu_N(T,V) = (k_BT)\,\ln\left(\frac{\lambda_T^3}{V/N}\right) \qquad \frac{N}{V}\equiv n \qquad \boxed{\mu_N(T,V) = (k_BT)\ln(\lambda_T^3\cdot n)}$$

gas idealaren egoera-ekuazio mekanikoa

$$p\cdot V = nRT \qquad nR = N\cdot k_B \quad \Big| \quad p\cdot V = N k_B\cdot T \Rightarrow \frac{N}{V} = \frac{p}{k_BT}$$

$$\boxed{\mu_N(T,V) = (k_BT)\cdot\ln\left(\lambda_T^3\cdot\frac{p}{k_BT}\right)}$$

$$\overset{GI}{\mu_N}(T,V) = \mu_{Na}(T)$$

$$(k_BT)\ln\left(\lambda_T^3\cdot\frac{p}{k_BT}\right) = (k_BT)\ln\left(\frac{N_a}{N}\right) - \epsilon$$

$$\frac{\epsilon\,\cancel{(k_BT)}}{(k_BT)}$$

$$\ln\left(\lambda_T^3\cdot\frac{p}{k_BT}\right) = \ln\left(\frac{N_a}{N}\right) - \frac{\epsilon}{k_BT}$$

$$\lambda_T^3\cdot\frac{p}{k_BT} = \frac{N_a}{N}\,e^{-\frac{\epsilon}{k_BT}}$$

$$\boxed{\frac{N_a}{N} = \frac{1}{k_BT}\cdot p\cdot\lambda_T^3\cdot e^{\frac{\epsilon}{k_BT}}}$$