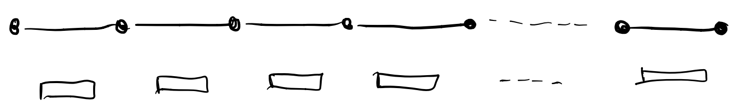
a) Solidoak: dimentsio bakarreko solidoa (1)

Dimentsio bakarreko akatsdun solidoa: akatsen azterketa.
Sare batek N ohiko sare-puntu ditu eta N sare-puntuen arteko puntuak. Sare-puntuak denak berezigarri dira. N atomo identiko jartzen dira sarean: M, sare-puntuen arteko puntuetan; eta $N-M$, ohiko sare-puntuetan ($N \gg M \gg 1$). Ohiko sare-puntuan dagoen atomoaren energia $E=0$ da eta sare-puntuen arteko puntuan dagoen atomoarena, $E=\epsilon$.

Lor itzazu sare horri dagozkion barne-energia eta bero-ahalmena, tenperaturaren funtzioan.



sare-puntuak N

sare-puntuen artekoak $N-1$

bana itxitura-baldintzak $\sim N$

N partikula Berezitezinak dira ⟷ berezigarriak dira: etiketak erabil daitezke

bana partikula berezitezinak toki berezigarrietan jarrita → berezigarriak dira

ez du energiarako ekarpenik egiten $E=\phi$

energiarako ekarpena egiten du $E=\epsilon$

Enuntziatuaren arabera, ezaguna da: sisteman dagoen partikula kopurua N dela
horietatik M daude ohiko sare-puntuen artekoetan
gainerakoak, N−M, ohiko sare-puntuetan

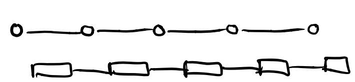
ez da ezaguna zer sare-puntutan dauden N−M partikula
hainbat egoera dago M partikula ez ohiko sare-puntuetan egoteko aukerak
bateragarriak direnak

Kontua da kalkulatzea [zenbat aukera dagoen M partikula berezitezin
N tokitan berezigarrietan jartzeko
jakinik M bakarrik ez daudela ez-ohiko sare-puntuetan

↓ horiek definitzen dute $(N, \underset{\substack{\parallel \\ M\cdot\epsilon}}{E}, \underset{\substack{\parallel \\ a\cdot N}}{V})$ egoera makroskopikoa

Zenbat mikroegoera dago horrekin lotuta bateragarri?

* Adibide praktikoa: $N=5$, $M=2$



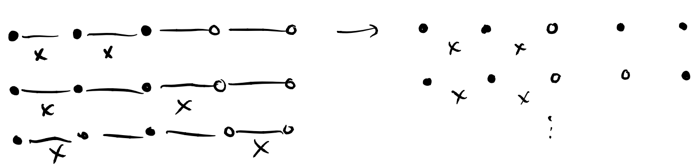
N ohiko sare-puntu
N ez-ohiko sare-puntu
N partikula

→ itxitura-baldintzak !!

(•,•,•,•,•)

↓

egoera posibleak



* 2 sare independiente dago < {oinarriko sare-puntuen sarea: $N-M$ partikula N tokitan jartzeko (1); ez-oinarriko sare-puntuen sarea: M partikula N tokitan jartzeko (2)}

$$\Omega_1(N-M) = \frac{N!}{(N-M)!\,(N-(N-M))!} \Rightarrow \Omega_1(N-M) = \frac{N!}{(N-M)!\,M!}$$

$$\Omega_2(M) = \frac{N!}{M!\,(N-M)!}$$

$$\Omega = \Omega_1 \cdot \Omega_2$$

$$\Omega = \left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!}\right]^2$$

* $S = k_B \ln \Omega \Rightarrow S = k_B \ln\left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!}\right]^2 \Rightarrow \boxed{S = 2k_B \ln\left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!}\right]}$ garatu daiteke SH erabiliz

$$\ln N! \simeq N\ln N - N$$

$$S = 2k_B\left\{\ln N! - \ln M! - \ln(N-M)!\right\}$$

$$\approx \left\{N\ln N - N - (M\ln M - M) - \left[(N-M)\ln(N-M) - (N-M)\right]\right\}$$

$$\left\{N\ln N - \cancel{N} - M\ln M + \cancel{M} - (N-M)\ln(N-M) + \cancel{(N-M)}\right\}$$

$$\boxed{S \approx 2k_B\left\{N\ln N - M\ln M - (N-M)\ln(N-M)\right\}}$$

- Mikrokanonikoan (Multzo estatistiko mikrokanonikoan) dena dago finkatuta eta ondo kalkulatu.
- Baina erlazio dute: barne-energia / bero-ahalmena } T-s tenperaturaren funtzioan
- FISIKA SAR DEZAKEGU, adierazpen hau gogoratuz: $\frac{1}{T} \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V}$

  adibide honetan: ez dago V

  $E = M\cdot\epsilon$ bada, $\frac{\partial}{\partial E} \to \frac{\partial}{\partial M}\cdot\frac{\partial M}{\partial E}$

$$\frac{1}{T} \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N \Rightarrow \frac{1}{T} \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_N \left(\frac{\partial M}{\partial E}\right)_N$$

$$E = M\cdot\epsilon \Rightarrow M = \frac{E}{\epsilon} \Rightarrow \left(\frac{\partial M}{\partial E}\right)_N = \frac{1}{\epsilon}$$

$$\boxed{\frac{1}{T} \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_N \cdot \frac{1}{\epsilon}}$$

Mikrokanonikotik KANONIKORA pasatu!!

$$* \quad S = 2k_B \left\{ N \ln N - M \ln M - (N-M)\ln(N-M) \right\}$$

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_N \cdot \frac{1}{\epsilon}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_N = 2k_B \left\{ \cancel{0} - \left(1 \cdot \ln M + M \cdot \frac{1}{M}\right) - \left((-1)\cdot \ln(N-M) + (N-M)\cdot\frac{1}{(N-M)}(-1)\right)\right\}$$

$$\left\{ \quad - (\ln M + 1) \quad - (-\ln(N-M) - 1) \right\}$$

$$\left\{ \quad - \ln M - \cancel{1} \quad + \ln(N-M) + \cancel{1} \right\}$$

$$\frac{1}{T} = 2k_B \cdot \frac{1}{\epsilon} \left\{ \ln\left(\frac{N-M}{N}\right)\right\} \Rightarrow \boxed{\frac{\epsilon}{2(k_B T)} = \ln\left(\frac{N-M}{M}\right)}$$

$$\ln\left(\frac{N-M}{M}\right) = \frac{\epsilon}{2(k_B T)} \Rightarrow \frac{N-M}{M} = e^{\frac{\epsilon}{2k_BT}} \Rightarrow N-M = e^{\frac{\epsilon}{2k_BT}} \cdot M \Rightarrow$$

$$N = M\left(1 + e^{\epsilon/2k_BT}\right) \Rightarrow$$

$$\boxed{M = \frac{N}{1 + e^{\frac{\epsilon}{2k_BT}}}} \Rightarrow E = M \cdot \epsilon$$

$$\boxed{E = \frac{N \cdot \epsilon}{1 + e^{\epsilon/2k_BT}}} \qquad C = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_D$$

$$C \equiv \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_D \Rightarrow C = N \cdot \epsilon \cdot \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{1+e^{\epsilon/2k_BT}}\right)$$

$$\frac{-N \cdot \epsilon \; e^{\epsilon/2k_BT} \cdot (\epsilon/2k_B) \cdot (-1/T^2)}{\left(1 + e^{\epsilon/2k_BT}\right)^2}$$

$$\boxed{C = \frac{N\epsilon^2}{2k_B T^2} \cdot \frac{e^{\epsilon/2k_BT}}{\left(1+e^{\epsilon/2k_BT}\right)^2}}$$

— Kanonikoan (Multzo estatistiko kanonikoan) kalkulatuko da:

— Kontuan hartu behar da oliko sare-puntuetan dauden atomoek ez dutela energiarekiko ekarpena
ez-oliko sare-puntuetan daudenek bai

↓ M atomo dagoenez ez-oliko sare-puntuetan: energia finkatuta dago
horixe da sistemak izan dezakeen energia-maila bakarra

↓ partizio-funtzioan atal bakarra dago

$$Z_N(T,V) = \sum_E g(E)\, e^{-\frac{E}{k_BT}}$$

definizioz

, dagoen energia-maila bakarra $E = M\cdot\epsilon$
Kasu honetan sistema definitzen duen partikula kopurua ez da N, baizik eta M

dagoen energia-mailari dagokion mikroegoeren kopurua da endekapena
↓ Multzo estatistiko mikrokanonikoa erabiliz kalkulatutako mikroegoera kopurua da

$$\boxed{Z_M(T) = \Omega_M \cdot e^{-\frac{M\epsilon}{k_BT}}}$$

↓

$$\boxed{Z_M(T) = \left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!}\right]^2 \cdot e^{-\frac{M\epsilon}{k_BT}}}$$

energia lortzeko, kanonikoko energiaren adierazpena erabili behar da

$$U = -\frac{\partial}{\partial(k_BT)}(\ln Z)$$

$$U = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V} = -T^2\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right)$$

$$C_V \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = -T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_{N,V}$$

Kanonikoan erabili beharreko adierazpenak

badago beste zerbait egitea definizio horiek guztiak erabili gabe; mikrokanonikoko energiaren definiziotik abiatu:

$$E = M\cdot\epsilon \quad\Downarrow\quad M = M(T) \qquad\Big|\qquad E(T) = \epsilon\cdot M(T)$$

$$\bar{E} = U = \bar{M}\cdot\epsilon$$

behar kalkulatzeko

$F = -(K_B T) \ln Z$

definizioa

$$F(M,T) = -(K_B T) \ln Z_M(T)$$

$$\boxed{F_M(T) = -(K_B T) \ln \left\{ \left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!} \right]^2 \cdot e^{-\frac{M \cdot \epsilon}{K_B T}} \right\}} + \text{S.H. !!}$$

$$F_M(T) \cong -(K_B T) \left\{ \underbrace{\ln \left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!} \right]^2}_{\text{Mikrokanonikoan kalkulatutakoa}} + \ln e^{-\frac{M\epsilon}{K_B T}} \right\}$$

$$-(K_B T) \left\{ 2\left[N \ln N - M \ln M - (N-M) \ln (N-M) \right] - \frac{M\epsilon}{K_B T} \right\}$$

$$\boxed{F_M(T) = -2(K_B T) \left[N \ln N - M \ln M - (N-M) \ln (N-M) \right] + M\epsilon}$$

$$\left(\frac{\partial F_M(T)}{\partial T} \right) \equiv -S \Rightarrow -\left[\frac{\partial F_M(T)}{\partial T} = -2K_B \left[N \ln N - M \ln M - (N-M) \ln (N-M) \right] \right]$$

mikrokanonikoko entropia !!

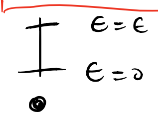
$$\boxed{S = 2K_B \left[N \ln N - M \ln M - (N-M) \ln (N-M) \right]}$$

⇓ Mikrokanonikoan egindako azterketa egin behar da; hots, energiaren funtzioan idatzi adierazpen hori eta denbora, T temperatura ordezkatuta

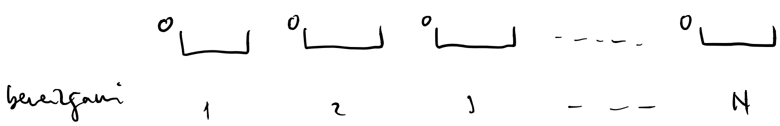
↳ eta hori da temperaturaren funtzioan ordezkatzea nahi bada

IRUZKIN OROKORRAK

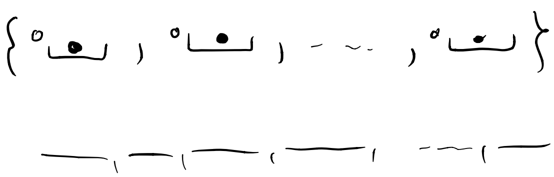
1 - $\boxed{\text{"Ez" da 2 mailako sistema}}$: ondo definitu gabe dago sistema txikia



hauxe da 2 mailako sistema : partikula bakarraren problema ebatzita
2 egoera propio eta 2 balio propio



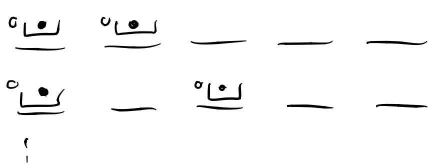
N toki
N partikula ●] partikulak tokietan bereizgarri
M partikula daude ε = ε energiarekin



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

baina horrelako konfigurazioei, beste asko falta zaie aurreko kasuan adierazi

$N = 5,\ M = 2 \implies$ guztira $\Omega = \frac{5!}{2!\,3!} = \frac{5\cdot4\cdot\cancel{3!}}{2!\,\cancel{3!}} = 10 \longrightarrow (10)^2 = 100!!$



baina — horren moduetan °⌴ ≡ •⌴ horrelakoak dira, dengibonean, zeren degeneratuko sistemak daudekan M-ak kokatuta daude

orduan hainbat moduko bakoitzeko izango dituzu aukera (N−M) horiek M tokitan jartzeko

↓ bakoitzeko 10 dago !!

beste zenbatze-moduak zenbatzen ditu!!

2 - Kontuz, enuntziatuaren arabera sistemak M atomo/partikula baino ez daramatza ez-ohiko sare-puntuetan
eta horiek baino ez dituzte energiarako ekarpena egiten
honexegatik energia-maila bakarra dago

Edozein kopuru izan badaiteke ez-ohiko sare-puntuetan dagoen partikula kopurua beste sistema mota bat deskribatzen ari gara; bat zeinaren partikula kopurua edozein izan daitekeen

↓ Kasu honetan kontuan hartuta sistema inpurutasunen sistema bat da
akatsdun solidoa
akatsen multzoa deskribatzen ari gara

horren kasuan akatsen kopuruak izan daitezke:

$$M \in \{\underbrace{0}_{\text{ez dago akatsik}}, 1, \dots, \underbrace{N}_{\text{denak dira akatsak}}\}$$

Ematen diogu aukera sistemari edozein akats kopuru izateko !!

Beste multzo batean ari gara: $\boxed{\text{multzo estatistiko makrokanonikoan}}$

zeinaren partizio-funtzio makrokanonikoa honako hau den:

$$\mathcal{Z}(T,V,\mu) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N \cdot Z_N(T)$$

definizioz

$$z = e^{\frac{\mu}{k_BT}}$$

$$Z_M(T) = \Omega(M)\, e^{-\frac{M\varepsilon}{k_BT}}$$

$$\Omega(M) = \left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!}\right]^2$$

$$\boxed{\mathcal{Z}(T,\mu) = \sum_{M=0}^{N} e^{\frac{\mu M}{k_BT}} \cdot \left[\frac{N!}{M!\,(N-M)!}\right]^2 e^{-\frac{M\varepsilon}{k_BT}}}$$

$$\mathcal{Z}(T,\mu) = \sum_{M=0}^{N} \left(\frac{N!}{M!\,(N-M)!} \right)^2 e^{-\frac{(\epsilon-\mu)}{k_B T} M}$$