d) Solidoak: bi dimentsioko solidoa (2)

Frenkel-en akatsak.

Solido perfektu baten ereduan, N atomo daude ohiko sare-puntuetan kokatuta. Ohiko sare-puntu horien arteko sare-puntuak, deskribatu nahi dugun solidoan, N' dira. Bi kopuruak, N eta N' magnitude-ordena berekoak dira. Solido perfektuaren, ohiko sare-puntuak atomoz betetakoa bera, barne-energia da U_o.

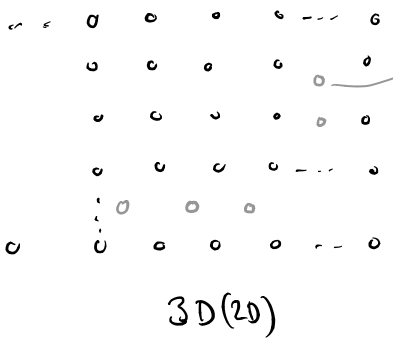
Tenperatura finituan, T, atomo batek ohiko sare-puntu batetik ihes egin dezake, ez-ohiko sare-puntu batera, eta, beraz, hutsunea, (*vacancy*) utzi. Horrelako kasuan solidoa ez da perfektua eta *Frenkel-en* akatsa sortu dela esan ohi da. Akatsa sor daidin beharrezkoa den energia da $\epsilon > 0$.

Aztertuko duzun solidoa isolatuta dago eta n *Frenkel-en* akats dauzka. Demagun $N \approx N' \ggg 1$ onargarria dela.

Frogatu honako hau betetzen dela:

$$n(T) \approx \sqrt{(NN')}\, e^{-\frac{\epsilon}{2 k_B T}}$$

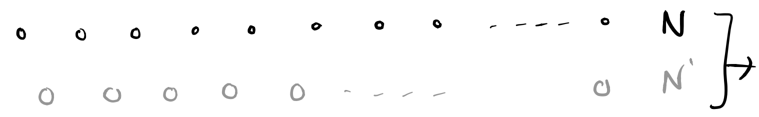
Solidoa 3D koa da, baina, halere, etiketei dagokienez, aurreko ariketan komentatu dun moduan, 1Dko balira datzke. Ez-ohiko sare-puntuei dagokienez, gauza bera dugu.



3D (2D)

N' → Ez-ohiko sare-puntuak; nahiz eta kantitatean ez duen N-ren berdin zerendatuko dugu

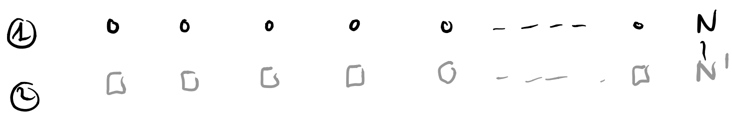
→ 1D



magnitude-ordena berekoak dira biak $N \sim N'$

- Tenperaturaren arabera n dira Frenkel-en akatsak: honek esan nahi du N atomo horietatik, n daudela ez-ohiko sare-puntuetan; datu ezaguna da. Gainerako atomoak ohiko sare-puntuetan daude

↓ Beraz, aurreko ariketaren baldintza berberetan gaude: 2 sare daude!



n atomo dago sare horretan; beraz ↑ N-n hontan

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

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

$$\Omega = \Omega_1 \cdot \Omega_2 \Rightarrow \boxed{\Omega = \frac{N!\,N'!}{(N-n)!\,n!\,n!\,(N'-n)!}}$$

parte hartzen duten denak handiak dira

$$S = k_B \ln \left[\frac{N!\,N'!}{(N-n)!\,n!\,n!\,(N'-n)!} \right]$$

mikrokanonikoan, ganatu SH.

$$S = k_B\left[\ln\left(\frac{N!}{(N-n)!\,n!}\right) + \ln\left(\frac{N'}{(N'-n)!\,n!}\right)\right] + \text{St}$$

$$\left[\underline{N\ln N} - n\ln n - \underbrace{(N-n)\ln(N-n)}_{\cup} + \underline{N'\ln N'} - n\ln n - \underbrace{(N'-n)\ln(N'-n)}\right]$$

$$-N\ln(N-n) + n\ln(N-n) \qquad -N'\ln(N'-n) + n\ln(N'-n)$$

$$N\ln\left(\frac{N}{N-n}\right) \qquad N'\ln\left(\frac{N'}{N'-n}\right)$$

$$-2n\ln n + n\ln(N-n) + n\ln(N'-n)$$

$$\boxed{S = k_B\left[N\ln\left(\frac{N}{N-n}\right) + N'\ln\left(\frac{N'}{N'-n}\right) + n\left[-2\ln n + \ln(N-n) + \ln(N'-n)\right]\right]}$$

partizipioz, mikrokanonikoan, bukatuta

$$\frac{1}{T} \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V} \Rightarrow \frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,N'}$$

baina $E = n\cdot\epsilon$ eta hauxe da sistemaren energia, bakarra bera.

$$\Downarrow \left(\frac{\partial n}{\partial E}\right) = \frac{1}{\epsilon}$$

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)_{N,N'}\left(\frac{\partial n}{\partial E}\right) = \underline{\underline{\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)}}\cdot\frac{1}{\epsilon}$$

Kalkulatu !!

$$\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right) = -N\cancel{\frac{1}{(N-n)}}(-1) + \left(\ln(N-n) + \cancel{\frac{n}{(N-n)}}(-1)\right) - \left(\ln n + \cancel{\frac{n}{n}}\right) +$$

$$-N'\cancel{\frac{1}{(N'-n)}}(-1) + \left(\ln(N'-n) + \cancel{\frac{n}{(N'-n)}}(-1)\right) - \left(\ln n + \cancel{\frac{n}{n}}\right)$$

$$= \ln\left(\frac{N-n}{n}\right) + \ln\left(\frac{N'-n}{n}\right) \Rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial n}\right) = \ln(N-n) + \ln(N'-n) - 2\ln n$$

$$= \ln N\underbrace{\left(1-\frac{n}{N}\right)}_{\simeq 1} + \ln N'\underbrace{\left(1-\frac{n}{N'}\right)}_{\simeq 1} - 2\ln n$$

$$\simeq \ln N + \ln N' - 2\ln n$$

$$\frac{1}{T} \cong k_B\left[\ln\frac{N\cdot N'}{n^2}\right]\cdot\frac{1}{\epsilon}$$

$$\frac{\epsilon}{k_B T} \simeq \ln\left[\frac{\left(\sqrt{NN'}\right)^2}{n^2}\right]$$

$$\frac{\epsilon}{2k_B T} \simeq \ln \frac{NN'}{n} \Rightarrow \boxed{n \approx \sqrt{NN'} \cdot e^{-\frac{\epsilon}{2k_B T}}}$$

$\Downarrow$ jakina, aurreko kasuan izan dugun emaitza berbera

$N \sim N' \Rightarrow N \cdot N' \approx N^2 \sim N'^2$

$$\boxed{n \simeq N e^{-\frac{\epsilon}{2k_B T}}}$$