MIT Açık Ders Malzemeleri

http://ocw.mit.edu

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

8.333: İstatistiksel Mekanik I **Problem Seti # 4** Son Tarih: 09/11/07

Etkileşmeyen Parçacıklar

1. *Moleküler soğurma*: N tane iki atomlu molekül, kare simetrili metal bir yüzeyin üzerine sıkışmıştır. Herbir molekül yüzey üzerinde düz uzanabilir, ki bu durumda x veya y yönlerinden biriyle çakışmalıdır, ya da z doğrultusu boyunca dik durabilir. Dik duruma geçen bir molekül için $\varepsilon > 0$, x veya y doğrultusunda uzanan moleküller için sıfır enerji maliyeti vardır.

(a) Kaç tane mikrodurum enerjinin en küçük değerine sahiptir? En büyük mikrodurum enerjisi nedir?

(b) For *microcanonical* macrostates of energy E, calculate the number of states $\Omega(E,N)$, and the entropy $S(E,N)$. (E enerjili *mikrokanonik* makrodurumları için, durumların sayısı $\Omega(E,N)$'yı ve entropi $S(E,N)$'yi hesaplayınız.

(c) $C(T)$ ısı sığasını hesaplayınız ve çiziniz.

(d) Belirli bir molekülün dik durumda olma olasılığı nedir?

(e) Herhangi bir pozitif sıcaklıktaki içsel enerjinin olası en büyük değeri nedir?

****

2. *Curie alınganlığı:* T sıcaklığında ve bir $\vec{B} = B\hat{z}$ manyetik alanında N tane etkileşmeyen kuantize olmuş spin düşünün. Alan tarafından yapılan iş, $M_z = \mu\sum_{i=1}^{N} m_i$ mıknatıslanma olmak üzere, BM_z'dir. Her bir spin için m_i sadece şu $2s+1$ tane değeri alır, $-s, -s+1, \cdots, s-1, s$.

(a) Gibbs üleşim fonksiyonu $\mathcal{Z}(T,B)$'yi hesaplayınız. (Unutmayınız ki, makrodurum (T,B)'ye karşılık gelen topluluk, manyetik işi içermektedir.)

(b) Gibbs serbest enerjisi $G(T,B)$'yi hesaplayınız ve küçük B için şöyle olduğunu gösteriniz.

$$G(B) = G(0) - \frac{N\mu^2 s(s+1)B^2}{6k_B T} + \mathcal{O}(B^4).$$

(c) Sıfır alan alınganlığı $\chi = \partial M_z/\partial B|_{B=0}$'ı hesaplayınız ve

$$\chi = c/T$$

*Curie yasası*nı sağladığını gösteriniz.

(d) C_B ve C_M sırasıyla sabit B ve M'de ısı sığalarıysa $C_B - C_M = cB^2/T^2$ olduğunu gösteriniz.

****

3. *Langmuir eşısıl eğrileri*: Parçacıklı bir ideal gaz, bir katalizörün yüzeyi ile temas halindedir.

(a) Gaz parçacıklarının kimyasal potansiyelinin, sıcaklık ve basıncıyla, A_0 sabit olmak üzere, $\mu = k_B T[\ln(P/T^{5/2}) + A_0$ biçiminde ilişkili olduğunu gösteriniz.

(b) Eğer yüzeyde $\mathcal{N}$ farklı soğurma noktası varsa ve herbir soğurulan parçacık, soğurma sonucu ε enerjisi kazanıyorsa, kimyasal potansiyeli μ olan iki boyutlu gazın büyük üleşim fonksiyonunu hesaplayınız.

(c) Denge halindeyken, gaz ve yüzeydeki parçacıklar aynı sıcaklık ve kimyasal potansiyeldedir. Dolu yüzey noktalarının oranının $f(T,P) = P/(P + P_0(T))$ ile verildiğini gösteriniz. $P_0(T)$'yi bulunuz.

(d) Büyük kanonik toplulukta, parçacık sayısı N rassal bir değişkendir. Karakteristik fonksiyonu $\langle \exp(-ikN)\rangle$'u $\mathcal{Q}(\beta\mu)$ cinsinden hesaplayınız ve böylece,

$$\langle N^m \rangle_c = -(k_B T)^{m-1} \left.\frac{\partial^m \mathcal{G}}{\partial \mu^m}\right|_T,$$

olduğunu gösteriniz, burada $\mathcal{G}$ büyük potansiyeldir.

(e) Karakteristik fonksiyonu kullanarak şunu gösteriniz

$$\langle N^2 \rangle_c = k_B T \left.\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}\right|_T.$$

(f) Soğurulmuş parçacıkların sayısındaki dalgalanmaların aşağıdaki denklemi sağladığını gösteriniz:

$$\frac{\langle N^2 \rangle_c}{\langle N \rangle_c^2} = \frac{1-f}{\mathcal{N} f}.$$

****

4. *Moleküler oksijen*in net manyetik spini, $\vec{S}$, birdir, yani S^z -1, 0, veya +1 kuantum değerlerine sahiptir. Bu moleküllerin N tanesinin ideal gazı, bir $\vec{B}\|\hat{z}$ manyetik alanı içindeyken, Hamiltonyeni şöyledir,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} - \mu B S_i^z \right],$$

burada $\{\vec{p}_i\}$, moleküllerin kütle merkezi momentumlarıdır. İlgili $\{\vec{q}_i\}$ koordinatları bir *V* hacmi ile sınırlıdırlar (diğer tüm serbestlik derecelerini yoksayınız).

(a) $\{\vec{p}_i, \vec{q}_i\}$'yi klasik, ama spin serbestlik derecelerini kuantumlaşmış gibi ele alarak, üleşim fonksiyonu $\tilde{Z}(T,N,V,B)$'yi hesaplayınız.

(b) Belli bir molekül için S_i^z'nin, T sıcaklığında -1, 0, +1 değerlerini alma olasılıkları nelerdir?

(c) $M = \mu \sum_{i=1}^{N} S_i^z$ olmak üzere, ortalama manyetik dipol moment $\langle M \rangle / V$'yi bulunuz.

(d) Sıfır alan alınganlığı $\chi = \partial < M > / \partial B|_{B=0}$'ı hesaplayınız.

****

5. *Bir boyutlu polimer:* N tane disk şeklindeki molekülün bir boyutlu bir zincir biçiminde bağlanmasıyla oluşan bir polimer düşünün. Herbir molekül uzun ekseni ($2a$ uzunluğunda) veya kısa ekseni (a uzunluğunda) boyunca hizalanabilir. Kısa ekseni boyunca dizilmiş monomerin enerjisi ε kadar daha fazladır, yani toplam enerji, U dik duran monomerlerin sayısı iken, $\mathcal{H} = \varepsilon U$'dur.)

(a) Polimerin üleştirme fonksiyonu $Z(T, N)$'i hesaplayınız

(b) Bir monomerin kısa veya uzun ekseni boyunca hizalanmasının bağıl olasılıklarını bulunuz.

(c) Polimerin ortalama uzunluğu $\langle L(T, N) \rangle$'yi hesaplayınız.

(d) Varyans $\{L(T, N)^2\}_c$'ı elde ediniz.

(e) $L(T, N)$ uzunluğunun olasılık dağılımı hakkında merkezi limit teoremi ne söyler?

****

6. *Polar çubuklar:* I eylemsizlik momenti ve bir μ dipol momenti olan çubuk şekilli moleküller düşünelim. Dönel serbestlik derecelerinin Hamiltonyene katkısı şöyle verilir

$$\mathcal{H}_{\text{rot.}} = \frac{1}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}\right) - \mu E \cos\theta \quad ,$$

burada E bir dış elektrik alandır. ($\varphi \in [0, 2\pi]$, $\theta \in [0, \pi]$ azimut ve polar açılardır, ve p_φ, p_θ da onlarla eşlenik momentumlardır.)

(a) Herbir dipolün dönel serbestlik derecelerinin *klasik* üleşim fonksiyonuna katkısını hesaplayınız.

(b) Herbir dipolün ortalama polarizasyonu $P = \langle \mu \cos\theta \rangle$'yı elde ediniz.

(c) Kutuplaşabilirliği sıfır alan için bulunuz.

$$\chi_T = \left.\frac{\partial P}{\partial E}\right|_{E=0} \quad .$$

(d) Parçacık başına düşen dönel enerjiyi (sonlu E'de) hesaplayınız, ve yüksek ve düşük sıcaklık limitlerini yorumlayınız.

(e) Dipol başına düşen dönel ısı sığasını çiziniz.

****