

MIT Açık Ders Malzemeleri

<http://ocw.mit.edu>

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

Bu materyallerden alıntı yapmak veya Kullanım Şartları hakkında bilgi almak için

<http://ocw.mit.edu/terms> ve <http://tuba.acikders.org.tr>

sitesini ziyaret ediniz.

### Etkileşen parçacıklar & Kuantum toplulukları

1. *Sürfaktan yoğuşması*:  $N$  tane sürfaktan molekülü, bir  $A$  alanı içinde su yüzeyine eklenir. İlgili Hamiltonyen şöyledir,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{V}(\vec{q}_i - \vec{q}_j),$$

burada  $\vec{q}_i$  ve  $\vec{p}_i$ , parçacık  $i$ 'nin konum ve momentumunu belirten iki boyutlu vektörlerdir. (Bu basit biçim sıvının kendisine bağlanmaları göz ardı eder. Gerçek kinetik ve potansiyel enerjiler daha karmaşıktır.)

(a)  $Z(N, T, A)$  üleşim fonksiyonunun ifadesini  $\vec{q}_i$  ve  $\vec{p}_i$  üzerinden integrallerle yazınız ve momentumlar üzerinden olan integralleri alınız.

Parçacıklar arası potansiyel  $\mathcal{V}(\vec{r})$ ,  $|\vec{r}| < a$  için sonsuz, ve  $|\vec{r}| > a$  için  $\int_a^\infty 2\pi r dr \mathcal{V}(r) = -u_0$  olmak üzere çekicidir.

(b)  $N$  tane parçacık sisteminin konumsal faz uzayında mevcut, toplam dışlanmamış alanı tahmin ediniz

(c) *Tekdüze yoğunluk yaklaşımı*  $n = N/A$  çerçevesinde, sistemin toplam *potansiyel* enerjisini tahmin ediniz. Bu potansiyel enerjiyi, önceki şıkta izin verilen tüm konfigürasyonlar için kullanarak  $Z$  için yaklaşık bir ifade yazınız.

(d) Suyun sürfaktansız yüzey gerilimi  $\sigma_0$ 'dur, ve yaklaşık olarak sıcaklıktan bağımsızdır. Sürfaktanların varlığında yüzey gerilimi  $\sigma(n, T)$ 'yi hesaplayınız.

(e) Belli bir  $T_c$  sıcaklığının altında  $\sigma$  ifadesinin açıkça yanlışı olduğunu gösterin. Sizce düşük sıcaklıklarda ne olmaktadır?

(f)  $C_A$  ısı sığasını hesaplayınız ve açıkça hesaplamadan sürfaktanlardan kaynaklı  $C_\sigma$  için bir ifade yazınız.

\*\*\*\*\*

2. *Kritik nokta davranışı*: Bir gazın basıncı  $P$ , yoğunluğu  $n = N/V$  ve sıcaklık  $T$ 'ye şu kesilmiş açılımla bağlıdır,

$$P = k_B T n - \frac{b}{2} n^2 + \frac{c}{6} n^3$$

burada  $b$  ve  $c$ 'nin *pozitif*, sıcaklıktan bağımsız sabitler oldukları varsayılmıştır.

(a) Bu denklemin daha düşük değerlerde geçersiz olmasının gerektiği  $T_c$  kritik sıcaklığını ve kritik noktanın ona karşılık gelen  $n_c$  yoğunluğu ve  $P_c$  basıncını belirleyiniz. Böylece  $k_B T_c n_c / P_c$  oranını bulunuz.

(b) Eşisil sıkışabilirlik  $\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T$  'yi hesaplayınız ve  $n = n_c$  için  $T$ 'nin fonksiyonu olarak davranışını çiziniz.

(c) Kritik eşisil eğrisi üzerinde,  $(P - P_c)$  için  $(n - n_c)$ 'nin bir fonksiyonu olan bir ifade yazınız.

(d)  $T < T_c$  için eşisil eğrilerindeki kararsızlıklar,  $n_+$  yoğunluğunda bir sıvı ve  $n_-$  yoğunluğunda bir gaz faz bölünmeyle önlenir.  $T_c$ 'ye yakın sıcaklıklarda bu yoğunluklar  $n_{\pm} \approx n_c(1 \pm \delta)$  biçiminde davranır. Bir Maxwell yöntemi kullanılarak, veya başka yoldan,  $\delta(T)$  için kesin bir denklem bulunuz, ve  $(T_c - T) \rightarrow 0$  için davranışını belirtiniz. (İpucu: Bir eşisil eğrisi boyunca kimyasal potansiyelin değişimleri  $d\mu = dP/n$  'e uyar.)

\*\*\*\*\*

**3. Manning geçişi:** DNA gibi iyonik polimerler (polielektrolitler) suya batırıldığında negatif yüklü ters iyonlar, geride pozitif yüklü bir polimer bırakarak çözültüye karışır. Geride bırakılan yüklerin elektrostatik itmesi yüzünden, aşağıdaki şekilde görüldüğü gibi polimer  $a$  yarıçaplı bir silindir biçiminde uzar. Termal dalgalanmalar iyonların çözültü içinde dolaşmalarını desteklerken, elektrostatik çekmeler dönüp polimer üzerinde yoğunlaşmalarını tercih eder. Eğer karşı-iyonların sayısı  $N$  ise, çubuk üzerinde kalan  $N$  tane pozitif yük  $\varphi(r) = -2(Ne/L) \ln(r/L)$  potansiyeliyle etkileşir, burada  $r$  silindirik geometride radyal koordinattır. Eğer karşı-iyonlar arasındaki Coulomb itmesini gözardı edersek, şu klasik Hamiltonyen ile tanımlanabilirler,

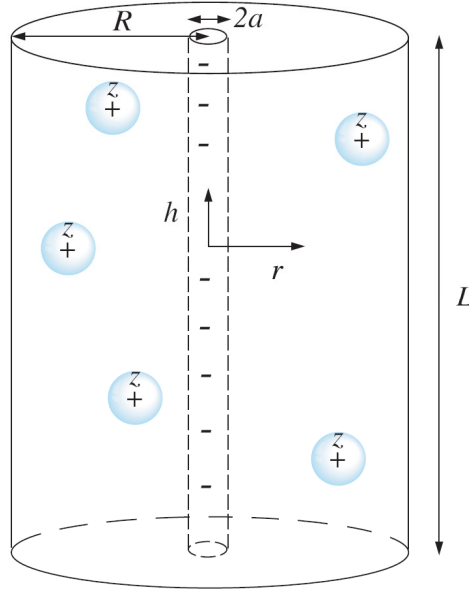
$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + 2e^2 n \ln \left( \frac{r_i}{L} \right) \right],$$

burada  $n = N/L$ 'dir.

(a) Yarıçapı  $R$  olan silindirik bir kap için, kanonik üleşim fonksiyonu  $Z$ 'yi sıcaklık  $T$ , yoğunluk  $n$ , ve yarıçaplar  $R$  ve  $a$  cinsinden hesaplayınız.

(b) Bir karşı-iyonun radyal konumu ve birinci momenti  $\langle r \rangle$  için olasılık dağılım fonksiyonu  $p(r)$ 'yi hesaplayınız.

(c) Yukarıda  $R \gg a$  limitinde hesaplanan sonuçların davranışı, yüksek ve düşük sıcaklıklarda çok farklıdır. Geçiş sıcaklığını belirleyiniz ve bu iki fazın doğasını tanımlayınız. Özellikle, her iki durumda  $\langle r \rangle$ 'nin  $R$  ve  $a$  bağımlılığı nasıldır?



(d) Karşı-iyonların kabın duvarlarına uyguladığı basıncı  $r = R$ 'de,  $R \gg a$  limitinde, tüm sıcaklıklar için hesaplayınız.

(e) Karşı-iyonlar arasındaki Coulomb etkileşmesi hesaba katılırsa, (d) şıkkında incelenen geçişin karakteri değişir. Etkileşimli probleme yaklaşık bir yöntem, karşı-iyonların  $N_1$ 'lik bir bölümünün polimer çubuk boyunca yoğunlaşmasına izin vermektir, geri kalan  $N_2 = N - N_1$  tanesi ise çözücüde dalgalandır. Serbest karşı-iyonlar yine etkileşmeyen, aşağıdaki Hamiltonyene tabi parçacıklar gibi ele alınır

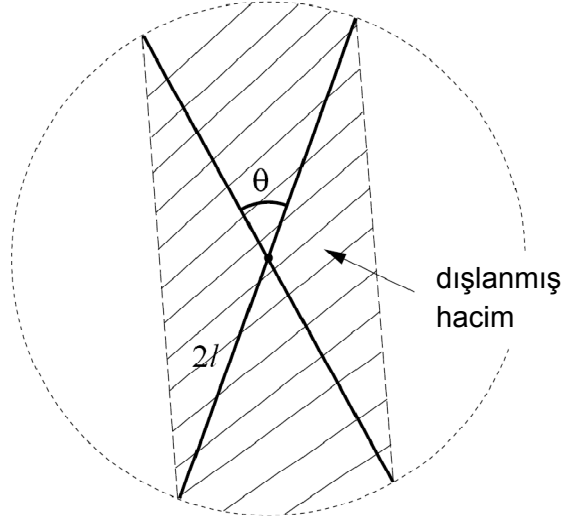
$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + 2e^2 n_2 \ln \left( \frac{r_i}{L} \right) \right],$$

burada  $n_2 = N_2/L$ 'dir. Etkileşmeyen iyonların dengedeki sayısı  $N_2^*$ 'yi tahmin ediniz, ve tahmininizi, sistemin  $N_2^*$ 'den küçük sapmalara verdiği tepkiyi tartışarak doğrulayınız. (Bu niceliksel bir soru olup, yeni hesaba hiç gerek yoktur.)

\*\*\*\*\*

**4. (İsteğe bağlı problem) Sert çubuklar:** İki boyutta,  $N$  tane asimetrik molekül topluluğu, herbirinin uzunluğu  $2l$  olan ve bir düzlemde uzanan çubuklardan oluşan bir gaz gibi modellenilebilir. Başka bir çubukla karşılaşmadıkça, bir çubuk kütle merkezinin ötelenmesiyle ve eksenini etrafında dönüşüyle hareket edebilir. Sert çekirdek etkileşmesini tam olarak uygulamadan, çubukların dönel hareketinin bir  $\theta$  açısıyla kısıtlandığını (diğer çubuklar tarafından) varsayarak yaklaşık olarak bu etkileşmeyi hesaba katabiliriz. Bu kısıtlama bir dışlanan hacim  $\Omega(\theta)$  getirir (her bir

çubuk için). Daha sonra  $\theta$ 'nın değeri,  $V$  toplam ulaşılabilir alan olmak üzere, belli bir  $n = N/V$  yoğunluğunda entropiyi maksimize ederek öztutarlı olarak hesaplanır.



(a) Böyle bir çubuklar topluluğunun entropisini,  $N$ ,  $n$ ,  $\Omega$ , ve *tek* bir çubuğun dönel serbestliğiyle ilgili faz uzayı hacmi  $A(\theta)$  cinsinden yazınız. (Momentumdan gelen katkıları tamamen göz ardı edebilir ve büyük  $N$  limitini alabilirsiniz.)

(b)  $\theta$ 'nın fonksiyonu olarak entropinin uç değerlerini bulup, yoğunluğu,  $\Omega$ ,  $A$  ve onların türevleri olan  $\Omega'$ ,  $A'$  ile ilişkilendiriniz; sonucunuzu  $n = f(\Omega, A, \Omega', A')$  biçiminde ifade ediniz.

(c) Dışlanmış hacim  $\Omega'$ 'yi  $\theta$  cinsinden ifade ediniz ve  $A \propto \theta$  varsayarak  $\theta \in [0, \pi]$ 'nin bir fonksiyonu olarak  $f'$ 'yi çizin.

(d) Yüksek yoğunluklardaki denge durumunu tanımlayınız. Yoğunluk azalırken bir faz geçişi tanımlayabilir misiniz? Çiziminizde ilgili  $n_c$  kritik yoğunluğunu gösteriniz. Faz geçişindeki kritik açı  $\theta_c$  nedir?  $\theta_c$ 'yi açıkça hesaplamamız gerekmemektedir, ancak onu tanımlayan (kapalı) bir bağıntı veriniz.  $\theta$ ,  $n < n_c$ 'de hangi değeri alır?

\*\*\*\*\*

**5. Electron spini:**  $\vec{B}$  manyetik alanı içindeki bir elektronun Hamiltonyeni,

$$\mathcal{H} = -\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad \text{burada} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{ve} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Pauli spin operatörleri, ve  $\mu_B$  Bohr manyetonudur.

(a) Kuantum kanonik topluluğunda, eğer  $\vec{B}$ ,  $z$  doğrultusu boyunca ise yoğunluk matrisini hesaplayınız.

(b)  $\vec{B}$ 'nin  $x$ -yönü boyunca olduğunu varsayarak hesabı tekrarlayınız.

(c) Yukarıdaki durumların her birinde ortalama enerjiyi hesaplayınız.

\*\*\*\*\*

**6. (İsteğe bağlı problem) Kuantum çarkı:** Aşağıdaki Hamiltonyen ile iki boyutlu bir çark düşünelim

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\theta^2}, \quad \text{ve} \quad 0 \leq \theta < 2\pi.$$

(a) Sistemin öz durumlarını ve enerji düzeylerini bulunuz.

(b)  $T$  sıcaklığındaki bir kanonik topluluk içinde yoğunluk matrisi  $\langle \theta' | \rho | \theta \rangle$  için ifadeyi yazınız ve onu düşük ve yüksek sıcaklık limitlerinde hesaplayınız.

\*\*\*\*\*

**7. Kuantum mekaniksel entropi:**  $T$  sıcaklığındaki bir kuantum mekaniksel sistem (bir Hamiltonyen  $\mathcal{H}$  tarafından tanımlanan),  $S(t) = -\text{tr}[\rho(t) \ln \rho(t)]$  entropisi ile ilişkili bir yoğunluk matrisi  $\rho(t)$  ile tanımlanmıştır.

(a) Yoğunluk matrisi için zamanda evrim denklemini yazınız ve  $dS/dt$ 'yi hesaplayınız.

(b) Lagrange çarpanları yöntemini kullanarak, fonksiyonel  $S[\rho]$ 'i  $\langle \mathcal{H} \rangle = \text{tr}(\rho \mathcal{H}) = E$  sabit ortalama enerji kısıtı altında maksimize eden yoğunluk operatörü  $\rho_{\max}$ 'ı bulunuz.

(c) (b) şıkkındaki çözümün durağan, yani  $\partial \rho_{\max} / \partial t = 0$  olduğunu gösteriniz.

\*\*\*\*\*

**8. (İsteğe bağlı problem) Ortho-para hidrojen:** Hidrojen molekülleri ortho ve para durumlarında bulunabilir.

(a) Para-hidrojen  $H_2$ 'nin iki elektronu bir tekil (antisimetrik) durum oluşturur. Yörüngesel açıl momentum, böylece sadece çift değerleri alabilir; yani

$$\mathcal{H}_p = \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell + 1),$$

burada, sadece  $\ell = 0, 2, 4, \dots$ . Para-hidrojenin dönel üleşim fonksiyonunu hesaplayınız, ve düşük ve yüksek sıcaklık limitlerini değerlendiriniz.

(b) Ortho-hidrojendeki elektronlar bir üçlü yozlaşmış simetrik durumdadır, böylece

$$\mathcal{H}_o = \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell + 1),$$

ifadesinde  $\ell = 1, 3, 5, \dots$ . Ortho-hidrojenin dönel üleşim fonksiyonunu hesaplayınız, ve düşük ve yüksek sıcaklık limitlerini değerlendiriniz.

(c)  $N$  hidrojen molekülünden oluşmuş dengede bir gaz için üleşim fonksiyonunu hesaplayınız. (İpucu: Karışımda  $N_p$  para- ve  $N_o = N - N_p$  ortho-hidrojen parçacıklarından gelen katkılar üzerinden toplayınız. Titreşimsel serbestlik derecelerini yoksayınız.)

(d) İçsel enerjiye dönel katkı  $\langle E_{rot} \rangle$ 'nin ifadesini yazınız ve düşük ve yüksek sıcaklık limitlerini yorumlayınız.

Aslında, ortho-ve para-hidrojen arasındaki küçük geçiş hızları nedeniyle çoğu durumda karışım dengede değildir.

\*\*\*\*\*

**9. van Leeuwen teoremi:** Aşağıdaki biçimde genel bir Hamiltonyene tabi, yüklü parçacıklardan oluşan bir gaz düşünün:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + U(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N).$$

Bir dış manyetik alan,  $\vec{B}$ , içinde, kanonik momentumlar,  $\vec{p}_n$ , yerine  $\vec{p}_n - e\vec{A}$  yazılır, burada  $\vec{A}$  vektör potansiyel, ve  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ 'dir. Kuantum etkileri göz ardı edildiğinde, problemin termodinamiğinin  $\vec{B}$ 'den bağımsız olduğunu gösteriniz.

\*\*\*\*\*