

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.

Değerlendirme Problemleri & Çözümleri

Üçüncü sınıf içi sınav **28/11/07** Çarşamba günü, **14:30 – 16:00** arası yapılacaktır. **26/11/07** Pazartesi günü sınav değerlendirmesiyle uygulama saati olacaktır.

Sınav kapalı kitaptır, ama isterseniz tek sayfa formül kağıdı getirebilirsiniz. Sınav tamamen aşağıdaki problemlerin bir altkümesinden oluşacaktır. Dolayısıyla, bu problemlerle tanışık ve rahatsanız, sürprizlere yer olmayacaktır!

Aşağıdaki bilgileri yararlı bulabilirsiniz:

Fiziksel Sabitler

Elektron kütlesi	$m_e \approx 9.1 \times 10^{-31} kg$	Proton kütlesi	$m_p \approx 1.7 \times 10^{-27} kg$
Elektron Yüğü	$e \approx 1.6 \times 10^{-19} C$	Planck sab./ 2π	$\hbar \approx 1.1 \times 10^{-34} Js^{-1}$
Işık Hızı	$c \approx 3.0 \times 10^8 ms^{-1}$	Stefan sabiti	$\sigma \approx 5.7 \times 10^{-8} Wm^{-2}K^{-4}$
Boltzmann sabiti	$k_B \approx 1.4 \times 10^{-23} JK^{-1}$	Avogadro sayısı	$N_0 \approx 6.0 \times 10^{23} mol^{-1}$

Çevrim Çarpanları

$$1 atm \equiv 1.0 \times 10^5 Nm^{-2}$$

$$1 \text{Å} \equiv 10^{-10} m$$

$$1 eV \equiv 1.1 \times 10^4 K$$

Termodinamik

$$dE = TdS + dW$$

$$\text{Gaz için: } dW = -PdV$$

$$\text{Tel için: } dW = Jdx$$

Matematiksel Formüller

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-\alpha x} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\left(\frac{1}{2}\right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\int_{-\infty}^\infty dx \exp\left[-ikx - \frac{x^2}{2\sigma^2}\right] = \sqrt{2\pi\sigma^2} \exp\left[-\frac{\sigma^2 k^2}{2}\right]$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \ln N! = N \ln N - N$$

$$\langle e^{-ikx} \rangle = \sum_{n=0}^\infty \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle$$

$$\ln \langle e^{-ikx} \rangle = \sum_{n=1}^\infty \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle_c$$

$$\cosh(x) = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

$$\sinh(x) = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \dots$$

d boyutta birim kürenin yüzey alanı

$$S_d = \frac{2\pi^{d/2}}{(d/2 - 1)!}$$

1. Debye–Hückel teorisi ve halka diyagramları: Virial açılımı, gaz basıncını, $n = N/V$ yoğunluğu cinsinden *analitik* bir açılım olarak verir. Uzun erimli etkileşmeler, ideal gaz durum denkleminde *analitik olmayan* düzeltmelere yolaçabilir. Klasik bir örnek, Debye–Hückel teorisinde, bir kümülant açılımındaki tüm *halka diyagramlarının* toplanmasıyla hesaplanan, plazmalardaki Coulomb etkileşmesidir.

Kolaylık açısından, genel yük dengesini sağlamak için, düzgün bir arka plan pozitif yük yoğunluğu Ne/V içinde hareket eden N elektronlu bir gaz düşünün. Coulomb etkileşmesi şu biçimi alır

$$U_Q = \sum_{i < j} \mathcal{V}(\vec{q}_i - \vec{q}_j), \quad \text{ve} \quad \mathcal{V}(\vec{q}) = \frac{e^2}{4\pi|\vec{q}|} - c.$$

c sabiti arka plandan gelir ve birinci derece düzeltmenin sıfır olmasını sağlar, yani $\int d^3 \vec{q} \mathcal{V}(\vec{q}) = 0$.

(a) $\mathcal{V}(\vec{q})$ 'nin Fourier dönüşümünün aşağıdaki biçimde olduğunu gösteriniz

$$\tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}) = \begin{cases} e^2/\omega^2 & \text{eğer } \vec{\omega} \neq 0 \\ 0 & \text{eğer } \vec{\omega} = 0 \end{cases}.$$

• $\mathcal{V}(\vec{q})$ 'nin Fourier dönüşümü orijinde tekildir, ve açık olarak şöyle tanımlanabilir

$$\tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3 \vec{q} \mathcal{V}(\vec{q}) e^{i\vec{\omega} \cdot \vec{q} - \varepsilon q}.$$

$\vec{\omega} = 0$ 'daki sonuç, c 'nin tanımından hemen gelir. $\vec{\omega} \neq 0$ için,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3 \vec{q} \left(\frac{e^2}{4\pi q} - c \right) e^{i\vec{\omega} \cdot \vec{q} - \varepsilon q} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3 \vec{q} \left(\frac{e^2}{4\pi q} \right) e^{i\vec{\omega} \cdot \vec{q} - \varepsilon q} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\infty q^2 dq \left(\frac{e^2}{4\pi q} \right) e^{i\omega q \cos \theta - \varepsilon q} \right] \\ &= -\frac{e^2}{2} \int_0^\infty \frac{e^{i\omega q - \varepsilon q} - e^{-i\omega q - \varepsilon q}}{i\omega} dq \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^2}{2i\omega} \left(\frac{1}{i\omega - \varepsilon} + \frac{1}{i\omega + \varepsilon} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{e^2}{\omega^2 + \varepsilon^2} \right) = \frac{e^2}{\omega^2}. \end{aligned}$$

(b) $\langle \mathcal{U}_Q^\ell \rangle_c^0$ için kümülant açılımında, sadece bir halka oluşturan diyagramları tutacağız; bu halkalar aşağıdakiyle orantılıdır:

$$R_\ell = \int \frac{d^3 \vec{q}_1}{V} \cdots \frac{d^3 \vec{q}_\ell}{V} \mathcal{V}(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \mathcal{V}(\vec{q}_2 - \vec{q}_3) \cdots \mathcal{V}(\vec{q}_\ell - \vec{q}_1).$$

Fourier dönüşümlerinin özelliklerini kullanarak şunu gösteriniz

$$R_\ell = \frac{1}{V^{\ell-1}} \int \frac{d^3 \vec{\omega}}{(2\pi)^3} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega})^\ell.$$

• $\langle \mathcal{U}_Q^\ell \rangle_c^0$ için kümülant açılımında, sadece bir halka oluşturan diyagramları tutarız. Bu diyagramların üleşim fonksiyonuna katkısı şöyledir,

$$\begin{aligned} R_\ell &= \int \frac{d^3 \vec{q}_1}{V} \frac{d^3 \vec{q}_2}{V} \cdots \frac{d^3 \vec{q}_\ell}{V} \mathcal{V}(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \mathcal{V}(\vec{q}_2 - \vec{q}_3) \cdots \mathcal{V}(\vec{q}_\ell - \vec{q}_1) \\ &= \frac{1}{V^\ell} \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_{\ell-1} d^3 \vec{q}_\ell \mathcal{V}(\vec{x}_1) \mathcal{V}(\vec{x}_2) \cdots \mathcal{V}(\vec{x}_{\ell-1}) \mathcal{V} \left(-\sum_{i=1}^{\ell-1} \vec{x}_i \right), \end{aligned}$$

burada, $i = 1, 2, \dots, \ell - 1$ olmak üzere, yeni değişken kümesi $\{\vec{x}_i \equiv \vec{q}_i - \vec{q}_{i+1}\}$ 'i kullandık. Dikkat edilirse, integrand $\vec{q}_\ell$ 'den bağımsız olduğu için

$$R_\ell = \frac{1}{V^{\ell-1}} \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 \cdots d^3 \vec{x}_{\ell-1} \mathcal{V}(\vec{x}_1) \mathcal{V}(\vec{x}_2) \cdots \mathcal{V} \left(-\sum_{i=1}^{\ell-1} \vec{x}_i \right).$$

Ters Fourier dönüşümü kullanılarak,

$$\mathcal{V}(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{\omega} \cdot \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\omega}},$$

integral şu hale gelir,

$$\begin{aligned} R_\ell &= \frac{1}{(2\pi)^{3\ell} V^{\ell-1}} \int \cdots \int d^3 \vec{x}_1 \cdots d^3 \vec{x}_{\ell-1} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_1) e^{-i\vec{\omega}_1 \cdot \vec{x}_1} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_2) e^{-i\vec{\omega}_2 \cdot \vec{x}_2} \\ &\quad \cdots \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_\ell) \exp \left(-i \sum_{k=1}^{\ell-1} \vec{\omega}_k \cdot \vec{x}_k \right) d^3 \vec{\omega}_1 \cdots d^3 \vec{\omega}_\ell. \end{aligned}$$

Aşağıdaki eşitlik kullanılarak

$$\int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{\omega} \cdot \vec{q}} = \delta^3(\vec{\omega}),$$

şu bulunur

$$R_\ell = \frac{1}{(2\pi)^3 V^{\ell-1}} \int \cdots \int \left(\prod_{k=1}^{\ell-1} \delta(\vec{\omega}_k - \vec{\omega}_\ell) \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_k) d^3 \vec{\omega}_k \right) d^3 \vec{\omega}_\ell,$$

ve sonuçta

$$R_\ell = \frac{1}{V^{\ell-1}} \int \frac{d^3 \vec{\omega}}{(2\pi)^3} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega})^\ell.$$

(c) $\langle \mathcal{U}_Q^\ell \rangle_c^0$ 'de oluşturulan halka grafiklerinin sayısının şöyle olduğunu gösteriniz.

$$S_\ell = \frac{N!}{(N-\ell)!} \times \frac{(\ell-1)!}{2} \approx \frac{(\ell-1)!}{2} N^\ell.$$

- $\langle U_Q^\ell \rangle_c^0$ 'de oluşturulan halka grafiklerinin sayısı, toplam N tane parçacık içinden ℓ tanesini seçmenin yollarının sayısı,

$$\frac{N!}{(N - \ell)!}$$

ile ℓ tane parçacığı bir halka içinde düzenlemenin yollarının sayısı,

$$\frac{\ell!}{2^\ell}$$

çarpılarak verilir.

Kesirdeki pay, halkanın noktaları üzerine ℓ tane etiketi dağıtmanın yollarının sayısıdır. Bu, paydada görülen, birbirine denk düzenlemelerin sayısı kadar fazladan sayım içerir. $1/2$ çarpanı saat yönüne ve tersine düzenlemelerin denkliğinden (yansıma) gelir, ve halkanın başlangıç noktasının seçimi için ℓ tane denk seçenek vardır (dönme). Bundan dolayı,

$$S_\ell = \frac{N!}{(N - \ell)!} \times \frac{\ell!}{2^\ell} = \frac{N!}{(N - \ell)!} \times \frac{(\ell - 1)!}{2}.$$

$N \gg \ell$ için, $N(N - 1) \cdots (N - \ell + 1) \approx N^\ell$ yaklaşıklığını kullanırsak,

$$S_\ell \approx \frac{(\ell - 1)!}{2} N^\ell.$$

Bu sonucu doğrulamanın bir başka yolu tümevarımdır. $\ell + 1$ uzunluğundaki bir halka, ℓ tane bağlantı içeren halkanın varolan ℓ tane noktanın içine bir fazladan nokta ekleyerek oluşturulabilir. Böylece, $S_{\ell+1} = S_\ell \times (N - \ell - 1) \times \ell$ olur ve $S_2 = N(N - 1)/2$ ile başlandığında yukarıdaki sonuca ulaşılır.

(d) Halka diyagramlarının katkılarının şu şekilde toplanabileceğini gösteriniz,

$$\begin{aligned} \ln Z_{\text{halka}} &= \ln Z_0 + \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{(-\beta)^\ell}{\ell!} S_\ell R_\ell \\ &\approx \ln Z_0 + \frac{V}{2} \int_0^\infty \frac{4\pi\omega^2 d\omega}{(2\pi)^3} \left[\left(\frac{\kappa}{\omega} \right)^2 - \ln \left(1 + \frac{\kappa^2}{\omega^2} \right) \right], \end{aligned}$$

burada, $\kappa = \sqrt{\beta e^2 N/V}$ Debye perdeleme uzunluğunun tersidir.

(İpucu: $\ln(1 + x) = -\sum_{\ell=1}^{\infty} (-x)^\ell / \ell$ açılımını kullanın.)

- Halka diyagramlarının katkısı şöyle toplanır,

$$\begin{aligned}
\ln Z_{\text{halka}} &= \ln Z_0 + \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{(-\beta)^{\ell}}{\ell!} S_{\ell} R_{\ell} \\
&= \ln Z_0 + \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{(-\beta)^{\ell}}{\ell!} \frac{(\ell-1)!}{2} N^{\ell} \frac{1}{V^{\ell-1}} \int \frac{d^3 \vec{\omega}}{(2\pi)^3} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega})^{\ell} \\
&= \ln Z_0 + \frac{V}{2} \int_0^{\infty} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3} \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{1}{\ell} \left(-\frac{\beta N}{V} \tilde{\mathcal{V}}(\omega) \right)^{\ell} \\
&= \ln Z_0 + \frac{V}{2} \int_0^{\infty} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3} \sum_{\ell=2}^{\infty} \frac{1}{\ell} \left(-\frac{\beta N e^2}{V \omega^2} \right)^{\ell} \\
&= \ln Z_0 + \frac{V}{2} \int_0^{\infty} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3} \left[\frac{\beta N e^2}{V \omega^2} - \ln \left(1 + \frac{\beta N e^2}{V \omega^2} \right) \right],
\end{aligned}$$

burada, $\ln(1+x) = -\sum_{\ell=1}^{\infty} (-x)^{\ell}/\ell$ eşitliğini kullandık. Son olarak, $\kappa = \sqrt{\beta e^2 N/V}$ yerine konduğunda,

$$\ln Z_{\text{halka}} = \ln Z_0 + \frac{V}{2} \int_0^{\infty} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3} \left[\left(\frac{\kappa}{\omega} \right)^2 - \ln \left(1 + \frac{\kappa^2}{\omega^2} \right) \right].$$

(e) Önceki şıktaki integral, $x = \kappa/\omega$ değişken dönüşümüyle ve kısmi integral alımıyla basitleştirilebilir. Nihai sonucun şöyle olduğunu gösteriniz,

$$\ln Z_{\text{halka}} = \ln Z_0 + \frac{V}{12\pi} \kappa^3.$$

• $x = \kappa/\omega$ değişken dönüşümü yapmak, ve kısmi integral almak şu sonucu verir,

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} \omega^2 d\omega \left[\left(\frac{\kappa}{\omega} \right)^2 - \ln \left(1 + \frac{\kappa^2}{\omega^2} \right) \right] &= \kappa^3 \int_0^{\infty} \frac{dx}{x^4} [x^2 - \ln(1+x^2)] \\
&= \frac{\kappa^3}{3} \int_0^{\infty} \frac{dx}{x^3} \left[2x - \frac{2x}{1+x^2} \right] = \frac{2\kappa^3}{3} \int_0^{\infty} \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi \kappa^3}{3},
\end{aligned}$$

sonuç olarak,

$$\ln Z_{\text{halka}} = \ln Z_0 + \frac{V}{4\pi^2} \cdot \frac{\pi \kappa^3}{3} = \ln Z_0 + \frac{V}{12\pi} \kappa^3.$$

(f) Yukarıdaki halka diyagramlarından basınca gelen düzeltmeyi hesaplayınız.

• İdeal gaz basıncına Debye-Hückel yaklaşıklığından gelen düzeltme şöyledir,

$$\begin{aligned}
P &= k_B T \left(\frac{\partial \ln Z_{\text{halka}}}{\partial V} \right)_{T,N} \\
&= P_0 + k_B T \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{V \kappa^3}{12\pi} \right)_{T,N} = P_0 - \frac{k_B T}{24\pi} \kappa^3 \\
&= P_0 - \frac{k_B T}{24\pi} \left(\frac{e^2 N}{k_B T V} \right)^{3/2}.
\end{aligned}$$

İdeal gaz davranışına gelen düzeltmenin analitik olmadığına ve bir virial serisi olarak ifade edilemeyeceğine dikkat ediniz. Bu, Coulomb etkileşmesinin uzun erimli doğasından kaynaklanır.

(g) İki parçacık arasında bir $\bar{V}(\vec{q} - \vec{q}')$ etkin potansiyelini, diğer tüm parçacıkların koordinatları üzerinden integral alarak tanımlayabiliriz. Bu, bir kümülant açılımında pertürbatif olarak hesaplanabilen bir beklenen değere denktir. Eğer sadece parçacıklar arasında döngüsüz diyagramları (halkaların benzeri) dahil edersek, elimizde,

$$\bar{V}(\vec{q} - \vec{q}') = V(\vec{q} - \vec{q}') + \sum_{\ell=1}^{\infty} (-\beta N)^{\ell} \int \frac{d^3 \vec{q}_1}{V} \cdots \frac{d^3 \vec{q}_{\ell}}{V} \mathcal{V}(\vec{q} - \vec{q}_1) \mathcal{V}(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \cdots \mathcal{V}(\vec{q}_{\ell} - \vec{q}').$$

Bu toplamın, perdelenmiş Coulomb etkileşmesi $\bar{V}(\vec{q}) = \exp(-\kappa|\vec{q}|)/(4\pi|\vec{q}|)$ 'ye götüreceğini gösteriniz.

• Etkin potansiyel $\bar{V}(\vec{q} - \vec{q}')$ 'yi tanımlamak, ve döngüsüz diyagramlar üzerinden toplamak şunu verir,

$$\begin{aligned} \bar{V}(\vec{q} - \vec{q}') &= \mathcal{V}(\vec{q} - \vec{q}') + \sum_{\ell=1}^{\infty} (-\beta N)^{\ell} \int \frac{d^3 \vec{q}_1}{V} \cdots \frac{d^3 \vec{q}_{\ell}}{V} \mathcal{V}(\vec{q} - \vec{q}_1) \mathcal{V}(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \cdots \mathcal{V}(\vec{q}_{\ell} - \vec{q}') \\ &= \mathcal{V}(\vec{q} - \vec{q}') - \beta N \int \frac{d^3 \vec{q}_1}{V} \mathcal{V}(\vec{q} - \vec{q}_1) \mathcal{V}(\vec{q}_1 - \vec{q}') \\ &\quad + (\beta N)^2 \int \frac{d^3 \vec{q}_1}{V} \frac{d^3 \vec{q}_2}{V} \mathcal{V}(\vec{q} - \vec{q}_1) \mathcal{V}(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \mathcal{V}(\vec{q}_2 - \vec{q}') - \cdots \end{aligned}$$

Şu gösterim değişikliklerini yaparak,

$$\begin{aligned} \vec{x}_1 &\equiv \vec{q}, \quad \vec{x}_2 \equiv \vec{q}', \quad \vec{x}_3 \equiv \vec{q}_1, \quad \vec{x}_4 \equiv \vec{q}_2, \quad \cdots \quad \vec{x}_{\ell} \equiv \vec{q}_{\ell}, \\ \mathcal{V}_{12} &\equiv \mathcal{V}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2), \quad \text{ve} \quad n \equiv N/V, \end{aligned}$$

şunu yazabiliriz,

$$\bar{\mathcal{V}}_{12} = \mathcal{V}_{12} - \beta n \int d^3 \vec{x}_3 \mathcal{V}_{13} \mathcal{V}_{32} + (\beta n)^2 \int d^3 \vec{x}_3 d^3 \vec{x}_4 \mathcal{V}_{13} \mathcal{V}_{34} \mathcal{V}_{42} - \cdots$$

Ters Fourier dönüşümünü ((a) şıkkındaki gibi) kullanarak ve $\vec{x}_{ij} \equiv \vec{x}_i - \vec{x}_j$ gösterimiyle

$$\bar{\mathcal{V}}_{12} = \mathcal{V}_{12} - \beta n \int \frac{d^3 \vec{x}_3}{(2\pi)^6} \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_{13}) \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_{32}) e^{-i(\vec{x}_{13} \cdot \vec{\omega}_{13} + \vec{x}_{32} \cdot \vec{\omega}_{32})} d^3 \vec{\omega}_{13} d^3 \vec{\omega}_{32} + \cdots,$$

ve (a) şıkkındaki gibi delta fonksiyonunu kullanarak,

$$\begin{aligned}\bar{V}_{12} &= \mathcal{V}_{12} - \beta n \int \frac{d^3 \vec{\omega}_{13} d^3 \vec{\omega}_{32}}{(2\pi)^3} \delta^3(\vec{\omega}_{13} - \vec{\omega}_{32}) \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_{13}) \tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega}_{32}) \exp[\vec{x}_1 \cdot \vec{\omega}_{13} - \vec{x}_2 \cdot \vec{\omega}_{32}] + \dots \\ &= \mathcal{V}_{12} - \beta n \int \frac{d^3 \vec{\omega}}{(2\pi)^3} [\tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega})]^2 \exp[\vec{\omega} \cdot \vec{x}_{12}] + \dots\end{aligned}$$

Bu sonucu genelleştirip, $\vec{x} \equiv \vec{x}_{12}$ şeklinde alttakıları kaldırarak,

$$\bar{V}_{12} = \mathcal{V}_{12} + \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(-\beta n)^{\ell}}{(2\pi)^3} \int [\tilde{\mathcal{V}}(\vec{\omega})]^{\ell+1} e^{i\vec{x} \cdot \vec{\omega}} d^3 \vec{\omega}.$$

Son olarak, doğrudan potansiyelin (ilk terim) Fourier dönüşümünü dahil etmek şunu verir,

$$\begin{aligned}\bar{V}_{12} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \int \frac{d^3 \vec{\omega}}{(2\pi)^3} (-\beta n)^{\ell} \frac{e^{2\ell+2}}{\omega^{2\ell+2}} e^{i\vec{x} \cdot \vec{\omega}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \int \frac{d^3 \vec{\omega}}{(2\pi)^3} \frac{(-1)^{\ell} e^2 \kappa^{2\ell}}{\omega^{2\ell+2}} e^{ix\omega \cos \theta} \\ &= \int_0^{\infty} d\omega \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(-1)^{\ell} e^2}{2\pi^2} \left(\frac{\kappa}{\omega}\right)^{2\ell} \int_{-1}^1 e^{ix\omega \cos \theta} d \cos \theta \\ &= \int_0^{\infty} d\omega \frac{e^2}{2\pi^2} \frac{2 \sin x\omega}{x\omega} \sum_{\ell=0}^{\infty} (-1)^{\ell} \left(\frac{\kappa}{\omega}\right)^{2\ell}.\end{aligned}$$

$y \equiv \omega/\kappa$ tanımını yapmak, şunu verir,

$$\bar{V}_{12} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2}{2\pi^2} \kappa \frac{e^{ix\kappa y} - e^{-ix\kappa y}}{2ix\kappa y} \frac{-1}{y^2 + 1} dy.$$

Rezidü teoremi yoluyla karmaşık düzlemde integrali aldığımızda,

$$\bar{V}_{12} = \frac{e^2}{4\pi^2} \left(\frac{e^{-\kappa x}}{2x} + \frac{e^{-\kappa x}}{2x} \right) \cdot \pi = \frac{e^2 e^{-\kappa x}}{4\pi x}.$$

Başlangıçtaki gösterimimizi hatırlarsak, $x = |\vec{q} - \vec{q}'| \equiv |\vec{q}|$, perdelenmiş Coulomb potansiyelini elde ederiz.

$$\bar{\mathcal{V}}(\vec{q}) = \frac{e^2}{4\pi} \frac{e^{-\kappa|\vec{q}|}}{|\vec{q}|}.$$

2. Virial katsayıları: d -boyutlu uzayda, ikili merkezi potansiyel $\mathcal{V}(r)$ ile etkileşen parçacıkların bir gazını düşünün, burada potansiyel şöyle tanımlıdır,

$$\mathcal{V}(r) = \begin{cases} +\infty & \text{eğer } 0 < r < a, \\ -\varepsilon & \text{eğer } a < r < b, \\ 0 & \text{eğer } b < r < \infty. \end{cases}$$

(a) İkinci virial katsayısı $B_2(T)$ 'yi hesaplayınız, ve yüksek ve düşük sıcaklık davranışını yorumlayınız.

- İkinci virial katsayısı,

$$B_2 \equiv -\frac{1}{2} \int d^d r_{12} \{ \exp[-\beta \mathcal{V}(r_{12})] - 1 \},$$

ifadesinden başlayarak, $r_{12} \equiv |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ olmak üzere, şöyle elde edilir,

$$\begin{aligned} B_2 &= -\frac{1}{2} \left[\int_0^a d^d r_{12} (-1) + \int_a^b d^d r_{12} (e^{\beta \varepsilon} - 1) \right] \\ &= -\frac{1}{2} \{ V_d(a)(-1) + [V_d(b) - V_d(a)] \cdot [\exp(\beta \varepsilon) - 1] \}, \end{aligned}$$

burada

$$V_d(r) = \frac{S_d}{d} r^d = \frac{2\pi^{d/2}}{d(d/2 - 1)!} r^d,$$

d -boyutlu uzayda r yarıçaplı kürenin hacmidir. Dolayısıyla,

$$B_2(T) = \frac{1}{2} V_d(b) - \frac{1}{2} \exp(\beta \varepsilon) [V_d(b) - V_d(a)].$$

Yüksek sıcaklıklar için $\exp(\beta \varepsilon) \approx 1 + \beta \varepsilon$, ve

$$B_2(T) \approx \frac{1}{2} V_d(a) - \frac{\beta \varepsilon}{2} [V_d(b) - V_d(a)].$$

Çok yüksek sıcaklıklarda, $\beta \varepsilon \ll 1$, potansiyelin sert çekirdek kısmı baskındır, ve

$$B_2(T) \approx \frac{1}{2} V_d(a).$$

Düşük sıcaklıklarda, $\beta \gg 1$, çekici bileşen ön plana çıkar, ve

$$\begin{aligned} B_2 &= -\frac{1}{2} \{ V_d(a)(-1) + [V_d(b) - V_d(a)] \cdot [\exp(\beta \varepsilon) - 1] \} \\ &\approx -\frac{1}{2} [V_d(b) - V_d(a)] \exp(\beta \varepsilon), \end{aligned}$$

$B_2 < 0$ sonucunu verir.

(b) Aşağıdaki eşıl sıkıştırılabilirliğe ilk düzeltmeyi hesaplayınız.

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N}.$$

- Eşıl sıkıştırılabilirlik şöyle tanımlıdır,

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N}.$$

Şu ifadeden,

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{N}{V} + \frac{N^2}{V^2} B_2,$$

sabit sıcaklık ve parçacık sayısı için, şunu elde ederiz,

$$\frac{1}{k_B T} dP = -\frac{N}{V^2} dV - 2B_2 \frac{N^2}{V^3} dV.$$

Dolayısıyla,

$$\left. \frac{\partial V}{\partial P} \right|_{T,N} = -\frac{1}{k_B T} \frac{1}{N/V^2 + 2B_2 N^2/V^3} = -\frac{V^2}{N k_B T} \left(\frac{1}{1 + 2B_2 N/V} \right),$$

ve

$$\kappa_T = \frac{V}{N k_B T} \left(\frac{1}{1 + 2B_2 N/V} \right) \approx \frac{V}{N k_B T} \left(1 - 2B_2 \frac{N}{V} \right).$$

(c) Yüksek sıcaklık limitinde, durum denklemini van der Waals biçiminde düzenleyiniz ve van der Waals parametrelerini belirleyiniz.

- İkinci virial katsayısıyla tanımlanan düzeltme dahil edildiğinde durum denklemi şöyledir,

$$\frac{PV}{N k_B T} = 1 + \frac{N}{V} B_2(T).$$

B_2 'nin yüksek sıcaklık limitindeki ifadesini kullanarak,

$$\frac{PV}{N k_B T} = 1 + \frac{N}{2V} \{V_d(a) - \beta \varepsilon [V_d(b) - V_d(a)]\},$$

ve

$$P + \frac{N^2}{2V^2} \varepsilon [V_d(b) - V_d(a)] = k_B T \frac{N}{V} \left(1 + \frac{N}{2V} V_d(a) \right).$$

$n = N/V$ değişkenini kullanarak, ve düşük derişimler için aşağıdaki yaklaşıklktan yararlanılırsa,

$$1 + \frac{n}{2} V_d(a) \approx \left(1 - \frac{n}{2} V_d(a) \right)^{-1} = V \left(V - \frac{N}{2} V_d(a) \right)^{-1},$$

durum denklemi şu hale gelir,

$$\left(P + \frac{n^2 \varepsilon}{2} [V_d(b) - V_d(a)] \right) \cdot \left(V - \frac{N}{2} V_d(a) \right) = N k_B T.$$

Bu ifade, bilinen van der Waals biçimine dönüştürülebilir,

$$(P - a n^2) \cdot (V - N b) = N k_B T,$$

burada,

$$a = \frac{\varepsilon}{2} [V_d(b) - V_d(a)], \quad \text{ve} \quad b = \frac{1}{2} V_d(a).$$

(d) $b = a$ (sert küre), ve $d = 1$ için, üçüncü virial katsayısı $B_3(T)$ 'ü hesaplayınız.

• Tanım gereği üçüncü virial katsayısı şöyledir,

$$B_3 = -\frac{1}{3} \int d^d r d^d r' f(r) f(r') f(r - r'),$$

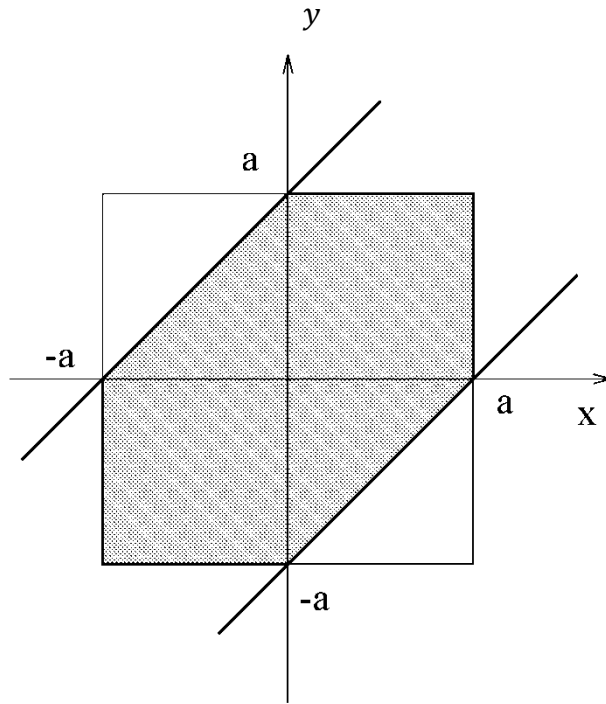
burada, sert çekirdekli bir gaz için

$$f(r) \equiv \exp\left(-\frac{V(r)}{k_B T}\right) - 1 = \begin{cases} -1 & \text{eğer } 0 < r < a, \\ 0 & \text{eğer } a < r < \infty \end{cases}$$

Bir boyutta, katkılar sadece, $f(r) = f(r') = -1$ olan $0 < r$, ve $r' < a$ bölgelerinden gelir. $|x| \equiv r$, $|y| \equiv r'$ (yani $-a < x$, ve $y < a$) gösterimlerini kullanarak,

$$B_3 = -\frac{1}{3} \int_{-a}^a dx \int_{-a}^a dy \cdot f(x - y) = \frac{1}{3} \int \int_{-a < x, y < a, -a < x - y < a} (-1) = \frac{1}{3} \frac{6}{8} (2a)^2 = a^2,$$

integral alınan ilgili alan aşağıda çizilmiştir.



3. Dieterici denklemi: Bir gaz Dieterici durum denklemini sağlamaktadır:

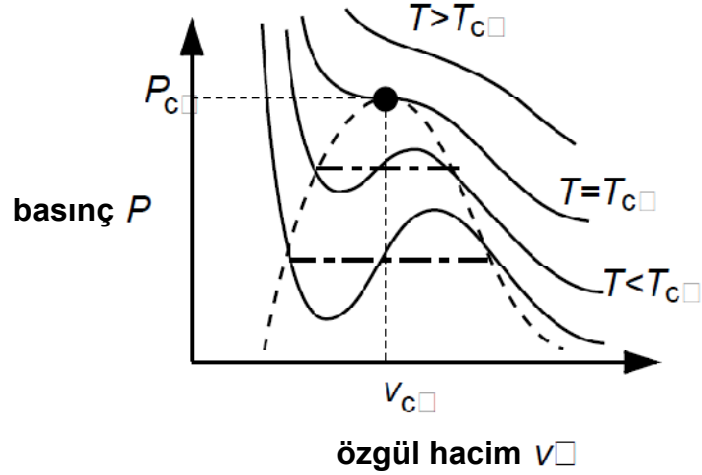
$$P(v - b) = k_B T \exp\left(-\frac{a}{k_B T v}\right),$$

burada $v = V/N$.

(a) Kritik noktada $Pv/k_B T$ oranını bulunuz.

- Kritik nokta, aşağıda tanımlanan bükülme noktasıdır,

$$\left. \frac{\partial P}{\partial v} \right|_{T_c, N} = 0, \quad \text{ve} \quad \left. \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \right|_{T_c, N} = 0.$$



P 'nin birinci türevi,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P}{\partial v} \right|_{T_c, N} &= \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{k_B T}{v-b} \exp \left(-\frac{a}{k_B T v} \right) \right] = \frac{k_B T}{v-b} \exp \left(-\frac{a}{k_B T v} \right) \left(\frac{a}{k_B T v^2} - \frac{1}{v-b} \right) \\ &= P \left(\frac{a}{k_B T v^2} - \frac{1}{v-b} \right), \end{aligned}$$

ikinci türevi ise

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \right|_{T_c, N} &= \frac{\partial}{\partial v} \left[P \left(\frac{a}{k_B T v^2} - \frac{1}{v-b} \right) \right] \\ &= \frac{\partial P}{\partial v} \left(\frac{a}{k_B T v^2} - \frac{1}{v-b} \right) - P \left(\frac{2a}{k_B T v^3} - \frac{1}{(v-b)^2} \right). \end{aligned}$$

Buradan, v_c ve T_c şöyle belirlenir,

$$\frac{a}{k_B T_c v_c^2} - \frac{1}{v_c - b} = 0, \quad \text{ve} \quad \frac{2a}{k_B T_c v_c^3} - \frac{1}{(v_c - b)^2} = 0,$$

çözümler ise,

$$v_c = 2b, \quad \text{ve} \quad k_B T_c = \frac{a}{4b}.$$

Kritik basınç şöyle bulunur,

$$P_c = \frac{k_B T_c}{v_c - b} \exp \left(-\frac{a}{k_B T_c v_c} \right) = \frac{a}{4b^2} e^{-2},$$

ve şu oranı verir,

$$\frac{P_c v_c}{k_B T_c} = 2e^{-2} \approx 0.27.$$

van der Waals gazı için bu oran,

$$\frac{P_c v_c}{k_B T_c} = \frac{3}{8} = 0.375,$$

bazı gerçek gazlar için ise,

$$\left(\frac{P_c v_c}{k_B T_c} \right)_{\text{su}} = 0.230, \quad \text{ve} \quad \left(\frac{P_c v_c}{k_B T_c} \right)_{\text{Argon}} = 0.291.$$

(b) Eşışıl sıkıştırılabilirlik κ_T 'yı, $v = v_c$ için, $T - T_c$ 'nin bir fonksiyonu olarak hesaplayınız.

• Eşışıl sıkıştırılabilirlik şöyle tanımlanır,

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial P} \Big|_{T,N},$$

ve (a) şikkından şu verilir,

$$\frac{\partial P}{\partial v} \Big|_{T_c,N} = P \left(\frac{a}{k_B T v^2} - \frac{1}{v-b} \right).$$

Bu ifadeyi $v = v_c$ 'de $t \equiv k_B T - k_B T_c$ cinsinden açtığımızda ($T > T_c$ için) şu bulunur,

$$\frac{\partial P}{\partial v} \Big|_{T_c,N} \approx P_c \left(\frac{a}{(a/4b + t) 4b^2} - \frac{1}{b} \right) \approx -\frac{P_c}{b} \frac{4bt}{a} = -\frac{2P_c}{v_c k_B T_c} t,$$

ve dolayısıyla,

$$\kappa_T = \frac{k_B T_c}{2P_c} \frac{1}{t} = \frac{be^2}{2k_B(T - T_c)}.$$

Unutmayınız ki herhangi bir analitik durum denklemini açmak, sıkıştırılabilirliğin iraksaması için aynı basit kutbu verecektir.

(c) Kritik eşışıl eğrisi üzerinde basıncı $(v - v_c)$ 'nin sıfırdan farklı en küçük mertebesine kadar açınız.

• $T = T_c$ kritik eşışıl eğrisi üzerinde şöyle bir Taylor-serisi açılımı yaptığımızda

$$P(v, T_c) = P_c + \frac{\partial P}{\partial v} \Big|_{T_c, v_c} (v - v_c) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \Big|_{T_c, v_c} (v - v_c)^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 P}{\partial v^3} \Big|_{T_c, v_c} (v - v_c)^3 + \dots$$

Kritik noktada ilk iki terim sıfırdır, ve

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial^3 P}{\partial v^3} \right|_{T_c, v_c} &= -P_c \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{2a}{k_B T_c v^3} - \frac{1}{(v-b)^2} \right) \\
 &= -P_c \left(\frac{6a}{k_B T_c v_c^4} - \frac{2}{(v_c-b)^3} \right) \\
 &= -\frac{P_c}{2b^3}.
 \end{aligned}$$

Bunu $P(v, T_c)$ 'nin Taylor açılımına yerleştirdiğimizde sonuç,

$$P(v, T_c) = P_c \left(1 - \frac{(v - v_c)^3}{12b^3} \right),$$

ve denk olarak,

$$\frac{P}{P_c} - 1 = -\frac{2}{3} \left(\frac{v}{v_c} - 1 \right)^3.$$

4. İki boyutlu Coulomb gazı: Alanı $A = L \times L$ olan *iki boyutlu* bir kutuda N tane pozitif ve N tane negatif yüklü klasik parçacıkların karışımını düşünün. Hamiltonyen şöyledir,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{2N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \sum_{i < j}^{2N} c_i c_j \ln |\vec{q}_i - \vec{q}_j|, \quad ,$$

burada, $i = 1, \dots, N$ ise $c_i = +c_0$ ve $i = N + 1, \dots, 2N$ ise $c_i = -c_0$ parçacıkların yüklerini, $\{\vec{q}_i\}$ ve $\{\vec{p}_i\}$ sırasıyla koordinat ve momentumlarını gösterir.

(a) Dikkat edilirse, etkileşme teriminde her çift sadece bir kez görünür ve kendiyle etkileşme, $i = j$, yoktur. Kaç çift için itici, ve kaç tanesi için çekici etkileşme vardır?

• N tane pozitif yüklü, N tane negatif yüklü parçacık vardır. Bu nedenle $N \cdot N = N^2$ ters yüklü çift bulunur ve $n_{\text{çekici}} = N^2$. Benzer yükler için, pozitif yüklü N tane parçacıktan veya negatif yüklü N tane parçacıktan çiftler seçebiliriz. Bu nedenle, benzer çiftlerin sayısı,

$$n_{\text{itici}} = 2 \times \binom{N}{2} = 2 \times \frac{N!}{2!(N-2)!} = N(N-1).$$

(b) Üleşim fonksiyonu $Z(N, T, A)$ için $\{\vec{q}_i\}$ ve $\{\vec{p}_i\}$ üzerinden integraller cinsinden bir ifade yazınız. Momentumlar üzerinden integralleri alın ve koordinatların katkılarını, $\{\vec{q}_i\}$ 'nin kuvvetlerini içeren bir çarpım olarak, $e^{\ln x} = x$ eşitliğini kullanarak yeniden yazınız.

• Üleşim fonksiyonu şöyledir,

$$Z(N, T, A) = \frac{1}{(N!)^2 h^{4N}} \int \prod_{i=1}^{2N} d^2 \vec{q}_i d^2 \vec{p}_i \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^{2N} \frac{p_i^2}{2m} + \beta \sum_{i < j} c_i c_j \ln |\vec{q}_i - \vec{q}_j| \right]$$

$$= \frac{1}{\lambda^{4N} (N!)^2} \int \prod_{i=1}^{2N} d^2 \vec{q}_i \exp [\beta \ln |\vec{q}_i - \vec{q}_j|^{c_i c_j}],$$

burada $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$. Üleşim fonksiyonu ifadesini daha sadeleştirerek,

$$Z(N, T, A) = \frac{1}{\lambda^{4N} (N!)^2} \int \prod_{i=1}^{2N} d^2 \vec{q}_i \prod_{i < j} |\vec{q}_i - \vec{q}_j|^{\beta c_i c_j},$$

burada, $e^{\ln x} = x$ oluşunu kullandık.

(c) $\{\vec{q}_i\}$ üzerinden integralleri kesin olarak almak mümkün olmasa da, Z 'nin A 'ya bağımlılığı, koordinatların basit bir yeniden ölçeklendirilmesiyle, $\vec{q}'_i = \vec{q}_i/L$, elde edilebilir. (a) ve (b) şıklarındaki sonuçları kullanarak $Z \propto A^{2N-\beta c_0^2 N/2}$ olduğunu gösteriniz.

• Bu problemde görünen tek uzunluk ölçeği sistem boyutu L ile belirlenir. İfadenin $\vec{q}'_i = \vec{q}_i/L$ kullanılarak yeniden ölçeklenmesi şunu verir,

$$Z(N, T, A) = \frac{1}{\lambda^{4N} (N!)^2} \int \prod_{i=1}^{2N} (L^2 d^2 \vec{q}'_i) \prod_{i < j} L^{\beta c_i c_j} |\vec{q}'_i - \vec{q}'_j|^{\beta c_i c_j}.$$

Etkileşimin çekici ($\beta c_i c_j = -\beta c_0^2$) olduğu N^2 tane, ve itici ($\beta c_i c_j = \beta c_0^2$) olduğu $N(N-1)$ tane terim olduğunu hatırlayınız. Dolayısıyla,

$$Z(N, T, A) = L^{4N} \cdot L^{\beta c_0^2 N(N-1)} \cdot L^{-\beta c_0^2 N^2} \frac{1}{\lambda^{4N} (N!)^2} \int \prod_{i=1}^{2N} d^2 \vec{q}'_i \prod_{i < j} |\vec{q}'_i - \vec{q}'_j|^{\beta c_i c_j}$$

$$= L^{4N-\beta N c_0^2} Z_0(N, T, A' = L'^2 = 1) \propto A^{2N-\beta c_0^2 N/2},$$

çünkü $A = L^2$

(d) Bu gazın iki boyutlu basıncını hesaplayınız, ve yüksek ve düşük sıcaklık davranışlarını yorumlayınız.

• Basınç şuradan hesaplanır

$$P = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial A} \Big|_{N, T} = k_B T \frac{\partial}{\partial A} \ln \left(A^{2N-\beta c_0^2 N/2} Z_0 \right)$$

$$= k_B T \left(2N - \beta c_0^2 N/2 \right) \frac{\partial}{\partial A} \ln A = \frac{2N k_B T}{A} - \frac{N c_0^2}{2A}.$$

Yüksek sıcaklıklarda,

$$P = \frac{2Nk_B T}{A},$$

ifadesi, $2N$ tane parçacığın ideal gaz davranışındır. Basınç şu sıcaklıkta negatif olur

$$T_c^0 = \frac{c_0^2}{4k_B},$$

ki bu fiziksel değildir, parçacıkların çekimlerinden dolayı çökmelerinin göstergesidir.

(e) Düşük sıcaklıklardaki bu fiziksel olmayan davranıştan, herhangi iki parçacığın bir a mesafesinden daha yakına gelmesini engelleyen bir sert çekirdek eklenerek kaçınılır. İki uzunluk ölçeği a ve L 'nin bulunması, (c) şıkkındaki ölçekleme analizini şüpheli kılar. $N = 1$ için üleşim fonksiyonunu inceleyerek, önceki şıkkın sonucunu geçersiz kılacak biçimde üleşim fonksiyonunun hesabında kısa mesafe ölçeği a 'nın önemli hale geldiği T_c sıcaklığı için bir tahminde bulununuz. Bu sistemin düşük ve yüksek sıcaklıklardaki fazları nelerdir?

• Sistemin tamamen çöküşünden (bir tek noktaya), herhangi iki parçacığın bir a mesafesinden daha yakına gelmesini engelleyen bir sert çekirdek itmesi eklenerek kaçınılır. İki parçacık için (yani $N = 1$) üleşim fonksiyonu şimdi şöyle verilir:

$$Z(N = 1, T, A) = \frac{1}{\lambda^4} \int d^2 \vec{q}_1 d^2 \vec{q}_2 \cdot |\vec{q}_1 - \vec{q}_2|^{-\beta c_0^2}.$$

Bu integrali almak için, önce kütle merkezi ve bağıl koordinatlara geçiniz:

$$\begin{cases} \vec{Q} = \frac{1}{2}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2), \\ \vec{q} = \vec{q}_1 - \vec{q}_2. \end{cases}$$

Kütle merkezi üzerinden integrali almak şunu verir,

$$\begin{aligned} Z(N = 1, T, A) &= \frac{A}{\lambda^4} \int d^2 \vec{q} q^{-\beta c_0^2} \approx \frac{2\pi A}{\lambda^4} \int_a^L dq \cdot q^{1-\beta c_0^2} \\ &= \frac{2\pi A}{\lambda^4} \left. \frac{q^{2-\beta c_0^2}}{2-\beta c_0^2} \right|_a^L = \frac{2\pi A}{\lambda^4} \frac{L^{2-\beta c_0^2} - a^{2-\beta c_0^2}}{2-\beta c_0^2}. \end{aligned}$$

Eğer $2 - \beta c_0^2 < 0$ ise, $L \rightarrow \infty$ limitinde,

$$Z \approx \frac{2\pi A}{\lambda^4} \frac{a^{2-\beta c_0^2}}{2-\beta c_0^2},$$

kısa mesafe kesmesi a ile, $2 - \beta c_0^2 > 0$ olduğunda ise integral, (c) şıkkında alındığı gibi, sistem boyutu L ile kontrol edilir. Bundan dolayı kritik sıcaklık $\beta c_0^2 = 2$ ile kestirilebilir, ve şunu verir,

$$T_c = \frac{c_0^2}{2k_B},$$

bu değer T_c^0 'dan 2 kat büyüktür. Dolayısıyla düşük sıcaklıklardaki fiziksel olmayan çöküş, sert çekirdeklerin önemli hale geldiği daha yüksek sıcaklıkta etkisizleştirilir. Yüksek sıcaklık ($T > T_c$) fazı bir ayrılmış plazma; düşük sıcaklık fazı ise bir çiftleşmiş dipoller gazıdır.

5. Bir boyutlu gazın kesin çözümleri: İstatistiksel mekanikte, *kesin* olarak çözülebilen çok az etkileşen parçacık sistemi vardır. Bu tür kesin çözümler, çeşitli yaklaşımların güvenilirliğini kontrol etmeyi sağladıkları için çok önemlidirler. Kısa erimli etkileşmelerle bir boyutlu bir gaz, bu tür çözülebilir bir durumdur.

(a) Daha uzak komşularla etkileşmeleri perdeleyen sert çekirdekli bir potansiyel için N tane parçacığın Hamiltonyeninin şöyle yazılabileceğini gösterin.

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(x_i - x_{i-1}).$$

(Ayırt edilemez) parçacıklar, $\{x_i\}$ koordinatlarıyla işaretlenmiştir, öyle ki

$$0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N \leq L,$$

burada L parçacıkları sınırlandıran kutunun uzunluğudur.

- Her i parçacığı sadece bitişik parçacıklar $i - 1$ ve $i + 1$ ile etkileşirler, çünkü bu eb yakın komşuların sert çekirdekleri diğer parçacıklarla etkileşimi perdeler. Dolayısıyla sadece en yakın komşu etkileşmelerini ele almamız gerekir, kinetik enerjilerle birlikte Hamiltonyen şöyle verilir,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(x_i - x_{i-1}), \quad \text{eğer} \quad 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N \leq L.$$

(b) Üleşim fonksiyonu $Z(T, N, L)$ için ifadeyi yazınız. Değişkenleri $\delta_1 = x_1$, $\delta_2 = x_2 - x_1, \dots, \delta_N = x_N - x_{N-1}$ biçiminde değiştiriniz, ve izin verilen integral aralıkları ile kısıtları dikkatlice belirtiniz.

- Üleşim fonksiyonu,

$$\begin{aligned}
 Z(T, N, L) &= \frac{1}{h^N} \int_0^L dx_1 \int_{x_1}^L dx_2 \cdots \int_{x_{N-1}}^L dx_N \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(x_i - x_{i-1}) \right] \\
 &\quad \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dp_N \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \right] \\
 &= \frac{1}{\lambda^N} \int_0^L dx_1 \int_{x_1}^L dx_2 \cdots \int_{x_{N-1}}^L dx_N \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(x_i - x_{i-1}) \right],
 \end{aligned}$$

burada $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$. (Parçacıkların dizilimi belirtildiğinden, $N!$ çarpanının olmadığına dikkat ediniz.) Yeni bir değişkenler kümesi tanımlayarak,

$$\delta_1 = x_1, \quad \delta_2 = x_2 - x_1, \quad \cdots \quad \delta_N = x_N - x_{N-1},$$

ya da eşdeğeri

$$x_1 = \delta_1, \quad x_2 = \delta_1 + \delta_2, \quad \cdots \quad x_N = \sum_{i=1}^N \delta_i,$$

integral şu hale gelir,

$$Z(T, N, L) = \frac{1}{\lambda^N} \int_0^L d\delta_1 \int_0^{L-\delta_1} d\delta_2 \int_0^{L-(\delta_1+\delta_2)} d\delta_3 \cdots \int_0^{L-\sum_{i=1}^N \delta_i} d\delta_N e^{-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i)}.$$

Bu integral şöyle de ifade edilebilir,

$$Z(T, N, L) = \frac{1}{\lambda^N} \left[\int d\delta_1 d\delta_2 \cdots d\delta_N \right]' \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right],$$

şu kısıtla birlikte:

$$0 \leq \sum_{i=1}^N \delta_i \leq L.$$

Basamak fonksiyonu kullanılarak,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{eğer } x < 0 \\ 1 & \text{eğer } x \geq 0 \end{cases},$$

bu kısıt denklemin içine açıkça konabilir,

$$Z(T, N, L) = \frac{1}{\lambda^N} \int_0^\infty d\delta_1 \int_0^\infty d\delta_2 \cdots \int_0^\infty d\delta_N \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right] \Theta \left(L - \sum_{i=1}^N \delta_i \right).$$

(c) Laplace dönüşümünden elde edilen Gibbs üleşim fonksiyonunu ele alalım,

$$\mathcal{Z}(T, N, P) = \int_0^\infty dL \exp(-\beta PL) Z(T, N, L),$$

ve integrandın uç değerlerini belirleyerek, kanonik toplulukta P 'nin standart fomülünü bulunuz.

- Gibbs üleşim fonksiyonu,

$$\mathcal{Z}(T, N, P) = \int_0^\infty dL \exp(-\beta PL) Z(T, N, L).$$

Eyer noktası, integrandın L 'ye göre uç değerlerini belirleyerek bulunur:

$$\left. \frac{\partial}{\partial L} \exp(-\beta PL) Z(T, N, L) \right|_{T, N} = 0,$$

bu ise şunu gerektirir,

$$\beta P = \left. \frac{\partial}{\partial L} \ln Z(T, N, L) \right|_{T, N}, \quad \Rightarrow \quad P = k_B T \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial L} \right|_{T, N}.$$

Termodinamikten, bir-boyutlu bir gaz için elimizde,

$$dF = -SdT - PdL, \quad \Rightarrow \quad P = - \left. \frac{\partial F}{\partial L} \right|_{T, N}.$$

Ayrıca,

$$F = -k_B T \ln Z,$$

ifadesi de yine aynı sonucu verir,

$$P_{\text{kanonik}} = k_B T \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial L} \right|_{T, N}.$$

(d) Değişkenleri L 'den $\delta_{N+1} = L - \sum_{i=1}^N \delta_i$ 'e çeviriniz ve $Z(T, N, P)$ 'nin ifadesini, her δ_i üzerinden integrallerin çarpımı olarak bulunuz.

- Yukarıda verilen üleşim fonksiyonunun ifadesi şöyledir,

$$Z(T, N, L) = \frac{1}{\lambda^N} \int_0^\infty d\delta_1 \int_0^\infty d\delta_2 \cdots \int_0^\infty d\delta_N \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right] \Theta \left(L - \sum_{i=1}^N \delta_i \right).$$

Bu denklemin Laplace dönüşümü,

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}(T, N, P) &= \frac{1}{\lambda^N} \int_0^\infty dL \exp(-\beta PL) \int_0^\infty d\delta_1 \int_0^\infty d\delta_2 \cdots \int_0^\infty d\delta_N \\
&\quad \cdot \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right] \Theta \left(L - \sum_{i=1}^N \delta_i \right) \\
&= \frac{1}{\lambda^N \beta P} \int_0^\infty d\delta_1 \int_0^\infty d\delta_2 \cdots \int_0^\infty d\delta_N \exp \left[-\beta \sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right] \exp \left[-\beta P \left(\sum_{i=1}^N \delta_i \right) \right] \\
&= \frac{1}{\lambda^N (\beta P)^2} \int_0^\infty d\delta_2 \cdots \int_0^\infty d\delta_N \exp \left\{ -\sum_{i=2}^N [\beta \mathcal{V}(\delta_i) + \beta P \delta_i] \right\}.
\end{aligned}$$

Farklı δ_i 'ler için integraller aynı olduğundan, şunu elde ederiz,

$$\mathcal{Z}(T, N, P) = \frac{1}{\lambda^N (\beta P)^2} \left\{ \int_0^\infty d\delta \exp [-\beta (\mathcal{V}(\delta) + P\delta)] \right\}^{N-1}.$$

Bu ifade, basamak fonksiyonu kullanmadan da, doğrudan şöyle elde edilebilir,

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}(T, N, P) &= \frac{1}{\lambda^N} \int_0^L d\delta_1 \int_0^{L-\delta_1} d\delta_2 \int_0^{L-(\delta_1+\delta_2)} d\delta_3 \cdots \int_0^{L-\sum_{i=1}^N \delta_i} d\delta_N \\
&\quad \cdot \int_0^\infty dL \exp \left[-\beta PL - \beta \left(\sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right) \right] \\
&= \frac{1}{\lambda^N} \int_0^L d\delta_1 \int_0^{L-\delta_1} d\delta_2 \cdots \int_0^{L-\sum_{i=1}^N \delta_i} d\delta_N \int_{-\sum_{i=1}^N \delta_i}^\infty d \left(L - \sum_{i=1}^N \delta_i \right) \\
&\quad \cdot \exp \left\{ -\beta P \left[\sum_{i=1}^N \delta_i + \left(L - \sum_{i=1}^N \delta_i \right) \right] - \beta \left(\sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right) \right\}.
\end{aligned}$$

Değişkenleri $\delta_{N+1} \equiv L - \sum_{i=1}^N \delta_i$ 'e çeviriniz ve her δ 'nın komşu parçacıklar arasındaki mesafeyi belirttiğini hatırlayınız. Gazın boyut L herhangi bir değere uzatıldığından, her δ bağımsızca 0'dan ∞ 'a değiştirilebilir. Dolayısıyla, Gibbs üleşim fonksiyonu,

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}(T, N, P) &= \frac{1}{\lambda^N} \int_0^\infty d\delta_1 \int_0^\infty d\delta_2 \cdots \int_0^\infty d\delta_N \int_0^\infty d\delta_{N+1} \\
&\quad \cdot \exp \left[-\beta P \left(\sum_{i=1}^{N+1} \delta_i \right) - \beta \left(\sum_{i=2}^N \mathcal{V}(\delta_i) \right) \right] \\
&= \frac{1}{\lambda^N} \left(\int_0^\infty d\delta \cdot \exp [-\beta \mathcal{V}(\delta) - \beta P \delta] \right)^{N-1} \int_0^\infty d\delta_1 \exp(-\beta P \delta_1) \\
&\quad \cdot \int_0^\infty d\delta_{N+1} \exp(-\beta P \delta_{N+1}) \\
&= \frac{1}{\lambda^N (\beta P)^2} \left\{ \int_0^\infty d\delta \exp [-\beta (\mathcal{V}(\delta) + P\delta)] \right\}^{N-1}.
\end{aligned}$$

(e) Sabit bir P basıncında, ortalama uzunluk $L(T, N, P)$ ve yoğunluk $n = N/L(T, N, P)$ için ifadeleri bulunuz (yorumlaması kolay integrallerin oranlarını içeren).

- Ortalama uzunluk,

$$L(T, N, P) = -k_B T \left. \frac{\partial}{\partial (\beta P)} \ln Z(T, N, P) \right|_{T, N}$$

$$= \frac{2}{\beta P} + (N-1) \frac{\int_0^\infty d\delta \cdot \delta \cdot \exp[-\beta \mathcal{V}(\delta) - \beta P\delta]}{\int_0^\infty d\delta \cdot \exp[-\beta \mathcal{V}(\delta) - \beta P\delta]},$$

ve yoğunluk n şöyle verilir,

$$n = \frac{N}{L(T, N, P)} = N \left\{ \frac{2k_B T}{P} + (N-1) \frac{\int_0^\infty d\delta \cdot \delta \cdot \exp[-\beta (\mathcal{V}(\delta) - P\delta)]}{\int_0^\infty d\delta \cdot \exp[-\beta (\mathcal{V}(\delta) - P\delta)]} \right\}^{-1}.$$

İdeal gaz için $\mathcal{V}_{i.g.}(\delta) = 0$ olduğunu hatırlayınız, ve

$$L_{i.g.}(T, N, P) = \frac{(N+1)k_B T}{P},$$

şuna götürür,

$$n(p)_{i.g.} = \frac{N}{N+1} \frac{P}{k_B T}.$$

Herhangi bir olası potansiyel seçimi için (e) şıkkındaki $n(T, P)$ sürekli ve tekil olmayan bir ifade olduğundan, aslında bir boyutlu gazda yoğunlaşma geçişi bulunmaz. Tersine, yaklaşık van der Waals denklemi (ya da ortalama alan hesabı) yanlış biçimde böyle bir geçiş öngörür.

(f) Parçacıklar arası minimum mesafesi a olan bir sert küre gazının durum denklemi $P(T, n)$ 'yi hesaplayınız. Dışlanan hacim oranını önceki problemlerde bulunan yaklaşık sonuçla karşılaştırınız, ve ayrıca genel virial katsayısı $B_\ell(T)$ 'yi elde ediniz.

- Sert küre gazı için,

$$\delta_i \geq a, \quad \text{for} \quad i = 2, 3, \dots, N,$$

Gibbs üleşim fonksiyonu şöyledir,

$$\begin{aligned} Z(T, N, P) &= \frac{1}{\lambda^N (\beta P)^2} \left[\int_a^\infty d\delta \exp(-\beta \mathcal{V}(\delta) - \beta P\delta) \right]^{N-1} \\ &= \frac{1}{\lambda^N (\beta P)^2} \left[\int_a^\infty d\delta \exp(-\beta P\delta) \right]^{N-1} \\ &= \frac{1}{\lambda^N} \left(\frac{1}{\beta P} \right)^{N+1} \exp(-\beta P a)^{N-1}. \end{aligned}$$

Üleşim fonksiyonundan ortalama uzunluğu hesaplayabiliriz,

$$L = -k_B T \left. \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial P} \right|_{T,N} = \frac{(N+1)k_B T}{P} + (N-1)a,$$

yeniden düzenlediğimizde,

$$\beta P = \frac{(N+1)}{L - (N-1)a} = \frac{n + 1/L}{1 - (n - 1/L)a} \approx (n + 1/l)(1 + (n - 1/L)a + (n - 1/L)^2 a^2 + \dots).$$

$N \gg 1$ için, $n \gg 1/L$, ve

$$\beta P \approx n(1 + na + n^2 a^2 + \dots) = n + an^2 + a^2 n^3 + \dots,$$

buradan virial katsayıları bulunur,

$$B_\ell(T) = a^{\ell-1}.$$

$B_3 = a^2$ değeri önceki bir problemde elde edilen sonuçla uyumludur. Ayrıca, dikkat edilirse, van der Waals denkleminin türetiminde kullanılan $Na/2$ tahmini yerine, kesin 'dışlanan hacim' $(N-1)a$ 'dır.

6. Bir boyutlu zincir. m kütleli $N+1$ tane parçacıktan oluşan bir zincir, N tane kütesiz, yay sabiti K ve gevşemiş uzunluğu a olan yayla bağlanmıştır. İlk ve son parçacıklar Na denge mesafesinde sabit tutulmaktadır. Parçacıkların denge konumlarından boyuna yer değiştirmelerini $\{u_i\}$ ile gösterelim; uçtaki parçacıklar sabit olduğundan $u_0 = u_N = 0$. $\{u_i\}$ ve eşlenik $\{p_i\}$ momentumlarını yöneten Hamiltonyen şöyledir.

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{K}{2} \left[u_1^2 + \sum_{i=1}^{N-2} (u_{i+1} - u_i)^2 + u_{N-1}^2 \right].$$

(a) Uygun (sinüs) Fourier dönüşümünü kullanarak normal modlar $\{\tilde{u}_k\}$ ve ilgili frekanslar $\{\omega_k\}$ 'yı bulunuz.

• Aşağıdaki Hamiltonyenden

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{K}{2} \left[u_1^2 + \sum_{i=2}^{N-1} (u_i - u_{i-1})^2 + u_{N-1}^2 \right],$$

klasik hareket denklemleri şöyle elde edilir,

$$m \frac{d^2 u_j}{dt^2} = -K(u_j - u_{j-1}) - K(u_j - u_{j+1}) = K(u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}),$$

$j = 1, 2, \dots, N-1$, ve $u_0 = u_N = 0$ olmak üzere. Bir normal modda parçacıklar fazda salınırlar. Modları ve ilgili frekansları elde etmenin alışılmış yolu, hareket denkleminin sağ tarafındaki yerdeğiştirmeleri bağlantılandırarak katsayıların matrisini

köşegenleştirmektir. Tüm doğrusal sistemlerde, elimizdeki denklemler $md^2u_i/dt^2 = \mathcal{K}_{ij}u_j$ 'dir ve $\mathcal{K}_{ij}$ 'yi köşegenleştirmek gerekir. Yukarıdaki örnekte, $\mathcal{K}_{ij}$ sadece $i - j$ 'nin bir fonksiyonudur. Bu, öteleme simetrisinin bir sonucudur ve matrisi Fourier modlarını kullanarak köşegenleştirmemizi sağlar. Bu problemdeki sınır koşullarından dolayı uygun dönüşüm sinüsü gerektirir, ve j inci parçacığın bir normal moddaki hareketi şöyle verilir,

$$\tilde{u}_{k(n)}(j) = \sqrt{\frac{2}{N}} e^{\pm i\omega_n t} \sin(k(n) \cdot j).$$

Başlangıç zamanı keyfidir, ama $u_N = 0$ olmasını sağlamak için şöyle ayarlamamız gerekir,

$$k(n) \equiv \frac{n\pi}{N}, \quad \text{eğer} \quad n = 1, 2, \dots, N-1.$$

n 'nin daha büyük değerleri, sadece π 'nin bir katı kadar kaymış dalga vektörleri verir ve bundan dolayı yukarıdaki normal modlardan biriyle çakışır. Dolayısıyla, normal modların sayısı, olması gerektiği gibi, başlangıçtaki yerdeğiştirme değişkenlerinin sayısına eşittir. Ayrıca, normal modlar birimlik olacak şekilde genlikler seçilir, yani,

$$\sum_{j=1}^{N-1} \tilde{u}_{k(n)}(j) \cdot \tilde{u}_{k(m)}(j) = \delta_{n,m}.$$

Normal modları hareket denklemlerine yerleştirerek dağılım bağıntısını elde ederiz,

$$\omega_n^2 = 2\omega_0^2 \left[1 - \cos\left(\frac{n\pi}{N}\right) \right] = \omega_0^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{2N}\right),$$

burada $\omega_0 \equiv \sqrt{K/m}$.

Her bir normal mod için potansiyel enerji şöyle verilir,

$$\begin{aligned} U_n &= \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N |u_i - u_{i-1}|^2 = \frac{K}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \sin\left(\frac{n\pi}{N}i\right) - \sin\left[\frac{n\pi}{N}(i-1)\right] \right\}^2 \\ &= \frac{4K}{N} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2N}\right) \sum_{i=1}^N \cos^2\left[\frac{n\pi}{N}\left(i - \frac{1}{2}\right)\right]. \end{aligned}$$

Aşağıdaki toplamı aldığımızda,

$$\sum_{i=1}^N \cos^2\left[\frac{n\pi}{N}\left(i - \frac{1}{2}\right)\right] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ 1 + \cos\left[\frac{n\pi}{N}(2i-1)\right] \right\} = \frac{N}{2},$$

elimizde,

$$U_{k(n)} = 2K \sin^2\left(\frac{n\pi}{2N}\right).$$

(b) Hamiltonyeni normal modların genlikleri $\{\tilde{u}_k\}$ cinsinden ifade ediniz ve *klasik* üleşim fonksiyonunu hesaplayınız. ($\{u_i\}$ integrallerini $-\infty$ 'dan $+\infty$ 'a alabilirsiniz.)

- Klasik üleşim fonksiyonunu hesaplamadan önce, yerdeğıştirmeleri, normal modların bazını kullanıp aşağıdaki gibi açarak, potansiyel enerjiyi hesaplayalım,

$$u_j = \sum_{n=1}^{N-1} a_n \cdot \tilde{u}_{k(n)}(j).$$

Toplam potansiyel enerji ifadesi şöyledir,

$$U = \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N (u_i - u_{i-1})^2 = \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} a_n [\tilde{u}_{k(n)}(j) - \tilde{u}_{k(n)}(j-1)] \right\}^2.$$

Aşağıdaki bağıntıdan dolayı,

$$\sum_{j=1}^{N-1} \tilde{u}_{k(n)}(j) \cdot \tilde{u}_{k(m)}(j-1) = \frac{1}{N} \delta_{n,m} \sum_{j=1}^{N-1} \{-\cos[k(n)(2j-1)] + \cos k(n)\} = \delta_{n,m} \cos k(n),$$

toplam potansiyel enerjinin şu denk biçimleri vardır

$$\begin{aligned} U &= \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N (u_i - u_{i-1})^2 = K \sum_{n=1}^{N-1} a_n^2 (1 - \cos k(n)), \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} a_{k(n)}^2 \varepsilon_{k(n)}^2 = 2K \sum_{i=1}^{N-1} a_{k(n)}^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right). \end{aligned}$$

Sonraki adım faz uzayının koordinatlarını u_j 'den a_n 'ye değıştirmektir. Bu değışken dönüşümüyle ilgili Jacobiyen birdir ve klasik üleşim fonksiyonu şimdi şuradan elde edilir,

$$Z = \frac{1}{\lambda^{N-1}} \int_{-\infty}^{\infty} da_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} da_{N-1} \exp \left[-2\beta K \sum_{n=1}^{N-1} a_n^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right) \right],$$

burada $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$, üleşim fonksiyonuna her bir momentum koordinatının katkısına karşılık gelir. Gauss integrallerini hesaplayarak şunu elde ederiz,

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{\lambda^{N-1}} \prod_{n=1}^{N-1} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} da_n \exp \left[-2\beta K a_n^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right) \right] \right\}, \\ &= \frac{1}{\lambda^{N-1}} \left(\frac{\pi k_B T}{2K} \right)^{\frac{N-1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} \left[\sin \left(\frac{n\pi}{2N} \right) \right]^{-1}. \end{aligned}$$

(c) Önce $\langle |\tilde{u}|^2 \rangle$ 'yi bulunuz ve sonucu kullanarak $\{u_i^2\}$ 'yi hesaplayınız. Hesaplanan, her parçacığın yerdeğıştirmesinin karesini denge konumunun fonksiyonu olarak çiziniz.

- Her normal modun genlik karesinin ortalaması şöyledir

$$\begin{aligned}\langle a_n^2 \rangle &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} da_n (a_n^2) \exp \left[-2\beta K a_n^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right) \right]}{\int_{-\infty}^{\infty} da_n \exp \left[-2\beta K a_n^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right) \right]} \\ &= \left[4\beta K \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right) \right]^{-1} = \frac{k_B T}{4K} \frac{1}{\sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right)}.\end{aligned}$$

Yerdeğiştirmelerin değişimi şöyle verilir,

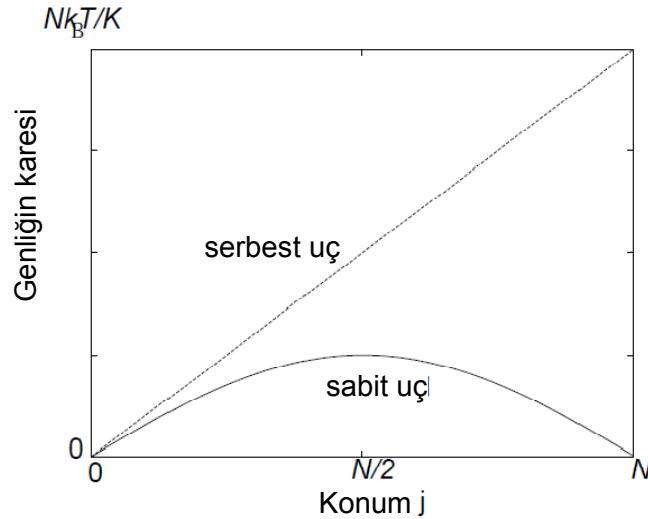
$$\begin{aligned}\langle u_j^2 \rangle &= \left\langle \left[\sum_{n=1}^{N-1} a_n \tilde{u}_n(j) \right]^2 \right\rangle = \sum_{n=1}^{N-1} \langle a_n^2 \rangle \tilde{u}_n^2(j) \\ &= \frac{2}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \langle a_n^2 \rangle \sin^2 \left(\frac{n\pi}{N} j \right) = \frac{k_B T}{2KN} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\sin^2 \left(\frac{n\pi}{N} j \right)}{\sin^2 \left(\frac{n\pi}{2N} \right)}.\end{aligned}$$

Yukarıdaki toplamın hesabı şu kombinasyonu ele alarak oldukça basitleşir,

$$\begin{aligned}\langle u_{j+1}^2 \rangle + \langle u_{j-1}^2 \rangle - 2\langle u_j^2 \rangle &= \frac{k_B T}{2KN} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{2 \cos \left[\frac{2n\pi}{N} j \right] - \cos \left[\frac{2n\pi}{N} (j+1) \right] - \cos \left[\frac{2n\pi}{N} (j-1) \right]}{1 - \cos \left(\frac{n\pi}{N} \right)} \\ &= \frac{k_B T}{2KN} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{2 \cos \left(\frac{2n\pi}{N} j \right) [1 - \cos \left(\frac{n\pi}{N} \right)]}{1 - \cos \left(\frac{n\pi}{N} \right)} = -\frac{k_B T}{KN},\end{aligned}$$

burada $\sum_{n=1}^{N-1} \cos(\pi n/N) = -1$ olduğunu kullandık. Yukarıdaki yineleme bağıntısının, sınır koşulları $\langle u_0^2 \rangle = \langle u_N^2 \rangle = 0$ ile uyumlu çözümünün şöyle olduğunu doğrulamak kolaydır,

$$\langle u_j^2 \rangle = \frac{k_B T}{K} \frac{j(N-j)}{N}.$$



(d) Eğer sadece birinci parçacık sabit ($u_0 = 0$), diğer uç serbest ($u_N \neq 0$) ise sonuçlar nasıl değişir? (Dikkat edilirse, üleşim fonksiyonu, değişkenleri $N - 1$ tane yay uzamalarına değiştirerek hesaplanabildiğinden, bu, çok daha basit bir problemdir.)

• Son parçacık serbest olduğunda, toplam potansiyel enerji her yaydan gelen katkıların toplamıdır, yani $U = K \sum_{j=1}^{N-1} (u_j - u_{j-1})^2 / 2$. Dolayısıyla her uzama bağımsız olarak ele alınabilir, ve yeni bir bağımsız değişkenler kümesi $\Delta u_j \equiv u_j - u_{j-1}$ tanımlarız. (İki ucun sabit olduğu önceki durumda bu değişkenler bağımsız değildi.) Üleşim fonksiyonu her yay için ayrı ayrı şöyle hesaplanabilir,

$$Z = \frac{1}{\lambda^{N-1}} \int_{-\infty}^{\infty} du_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} du_{N-1} \exp \left[-\frac{K}{2k_B T} \sum_{j=1}^{N-1} (u_j - u_{j-1})^2 \right]$$

$$= \frac{1}{\lambda^{N-1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta u_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta u_{N-1} \exp \left[-\frac{K}{2k_B T} \sum_{j=1}^{N-1} \Delta u_j^2 \right] = \left(\frac{2\pi k_B T}{\lambda^2 K} \right)^{(N-1)/2}.$$

Her yay uzaması için elimizde,

$$\langle \Delta u_j^2 \rangle = \langle (u_j - u_{j-1})^2 \rangle = \frac{k_B T}{K}.$$

Yerdeğiştirme

$$u_j = \sum_{i=1}^j \Delta u_i,$$

bağımsız rassal değişkenlerin bir toplamıdır, ve şu varyansa yol açar,

$$\langle u_j^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_{i=1}^j \Delta u_i \right)^2 \right\rangle = \sum_{i=1}^j \langle (\Delta u_i)^2 \rangle = \frac{k_B T}{K} j.$$

Açık ve kapalı uçlu zincirlerin yerdeğiştirmeleri için sonuçlar yukarıdaki şekilde karşılaştırılmıştır.

7. Kara delik termodinamiği: Bekenstein ve Hawking'e göre, bir kara deliğin entropisi alanı A ile orantılıdır ve şöyle verilir,

$$S = \frac{k_B c^3}{4G\hbar} A.$$

(a) Klasik mekaniği kullanarak M kütleli bir cisimden R yarıçapı uzaklıkta kaçış hızını hesaplayınız. Bu kaçış hızını ışık hızı c alarak, kara deliğin yarıçapı ve kütlesi arasında bir bağıntı bulunuz. (İlk olarak Laplace tarafından elde edilen bu sonucu göreceli hesaplamalar değiştirmez.)

• Klasik kaçış hızı, kütleçekim enerjisi ve kinetik enerjiyi yüzeyde eşitleyerek şöyle bulunur,

$$G \frac{Mm}{R} = \frac{mv_E^2}{2},$$

sonuç olarak,

$$v_E = \sqrt{\frac{2GM}{r}}.$$

Kaçış hızını ışık hızı olarak şunu buluruz,

$$R = \frac{2G}{c^2}M.$$

Bu oran tarafından verilenden daha büyük bir kütle için (yani $M > c^2 R / 2G$), hiçbir şey R 'den daha yakın mesafelerden kaçamaz.

(b) İki kara delik birleşip tek olduğunda entropi artar mı, azalır mı? Güneş kadar kütlesi olan ($M_\odot \approx 2 \times 10^{30} \text{kg}$) iki kara delik birleştiğinde evrenin entropi değişimi (denk bilginin bit sayısı cinsinden) nedir?

- Kütlesi M olan iki kara delik birleştiğinde entropi değişimi şöyledir,

$$\begin{aligned} \Delta S &= S_2 - 2S_1 = \frac{k_B c^3}{4G\hbar} (A_2 - 2A_1) = \frac{k_B c^3}{4G\hbar} 4\pi (R_2^2 - 2R_1^2) \\ &= \frac{\pi k_B c^3}{G\hbar} \left[\left(\frac{2G}{c^2} 2M \right)^2 - 2 \left(\frac{2G}{c^2} M \right)^2 \right] = \frac{8\pi G k_B M^2}{c\hbar} > 0. \end{aligned}$$

Dolayısıyla kara deliklerin birleşmesi evrenin entropisini artırır.

Güneş kütleli iki kara deliğin birleşmesini ele alalım. Entropi değişimi,

$$\begin{aligned} \Delta S &= \frac{8\pi G k_B M_\odot^2}{c\hbar} \\ &\approx \frac{8\pi \cdot 6.7 \times 10^{-11} (N \cdot m^2 / kg^2) \cdot 1.38 \times 10^{-23} (J/K) \cdot (2 \times 10^{30})^2 kg^2}{3 \times 10^8 (m/s) \cdot 1.05 \times 10^{-34} (J \cdot s)} \\ &\approx 3 \times 10^{54} (J/K). \end{aligned}$$

Bit birimi cinsinden kaybolan bilgi şudur,

$$N_I = \frac{\Delta S \ln 2}{k_B} = 1.5 \times 10^{77}.$$

(c) Kara deliğin içsel enerjisi Einstein bağıntısı $E = Mc^2$ ile verilir. Kara deliğin sıcaklığını kütlesi cinsinden bulunuz.

- Sıcaklığın termodinamik tanımı $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ 'yi ve Einstein bağıntısı $E = Mc^2$ 'yi kullanarak,

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial M} \left[\frac{k_B c^3}{4G\hbar} 4\pi \left(\frac{2G}{c^2} M \right)^2 \right] = \frac{8\pi k_B G}{\hbar c^3} M, \quad \Rightarrow \quad T = \frac{\hbar c^3}{8\pi k_B G} \frac{1}{M}.$$

(d) Bir “kara delik” aslında, olay ufkunda çift yaratım süreçleri sayesinde, termal radyasyon yayar. Bu tür ışıma dolayısıyla enerji kaybetme hızını bulunuz.

• (Kuantum) vakum, parçacık-antiparçacık çiftlerinin sürekli yaratıldığı ve yok edildiği dalgalanmalar yaşar. Kara deliğin sınırı yakınlarında, bazen çiftin bir üyesi kara deliğin içine düşerken diğeri kaçır. Bir kara delikten gelen radyasyon yayımının basit açıklaması budur. Alanı A , sıcaklığı T olan bir kara cismin enerjisi E 'deki düşme Stefan-Boltzmann yasasıyla verilir,

$$\frac{1}{A} \frac{\partial E}{\partial t} = -\sigma T^4, \text{ burada } \sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^2}.$$

(e) Yalıtılmış bir kara deliğin buharlaşması için gereken zamanı bulunuz. Güneş kütleli bir kara delik için bu süre ne kadardır?

• (d) şıkkındaki sonucu kullanarak, bir kara deliğin buharlaşması için gereken zamanı hesaplayabiliriz. Bir kara delik için,

$$A = 4\pi R^2 = 4\pi \left(\frac{2G}{c^2} M \right)^2 = \frac{16\pi G^2}{c^4} M^2, \quad E = Mc^2, \quad \text{ve} \quad T = \frac{\hbar c^3}{8\pi k_B G} \frac{1}{M}.$$

Böylece,

$$\frac{d}{dt} (Mc^2) = -\frac{\pi^2 k_B^4}{60 \hbar^3 c^2} \left(\frac{16\pi G^2}{c^4} M^2 \right) \left(\frac{\hbar c^3}{8\pi k_B G} \frac{1}{M} \right)^4,$$

olur, ve şunu gerektirir,

$$M^2 \frac{dM}{dt} = -\frac{\hbar c^4}{15360 G^2} \equiv -b.$$

Bu çözüldüğünde sonuç,

$$M(t) = (M_0^3 - 3bt)^{1/3}.$$

Kütlenin sıfıra gidip kara deliğin buharlaştığı süre,

$$\tau = \frac{M_0^3}{3b} = \frac{5120 G^2 M_\odot^3}{\hbar c^4} \approx 2.2 \times 10^{74} s,$$

bulunur, ki bu evrenin mevcut yaşından (yaklaşık $10^{18} s$) çok daha uzundur.

(f) Mevcut kozmik arkaplan radyasyonu $T = 2.7^\circ K$ ile termal dengede bir kara deliğin kütlesi nedir?

• Bir kara deliğin sıcaklık ve kütlesi şöyle ilişkilidir, $M = \hbar c^3 / (8\pi k_B G T)$. Mevcut kozmik arkaplan radyasyonu $T = 2.7^\circ K$ ile termal dengede bir kara delik için,

$$M \approx \frac{1.05 \times 10^{-34} (J \cdot s) (3 \times 10^8 m/s)^3}{8\pi \cdot 1.38 \times 10^{-23} (J/K) \cdot 6.7 \times 10^{-11} (N \cdot m^2/kg^2) \cdot 2.7^\circ K} \approx 4.5 \times 10^{22} kg.$$

(g) Uzayın yarıçapı R olan küresel bir hacmini düşünün. Son zamanlarda formüle edilen *Hologram İlkesi*'ne göre, içeriğinden bağımsız olarak(!) bu uzay hacminin sahip olabileceği entropinin bir maksimum değeri vardır. Bu maksimum entropi nedir?

- R yarıçaplı küresel hacmin içindeki kütle, bu hacmi dolduran bir kara delik yaratacak kütleden daha az olmalıdır. Hacmin içine, bu hacmi kaplayan bir kara delik oluşturacak kadar ek kütle (sonsuzdan) getirelim. Açıkça, bu işlem sırasında sistemin entropisi artacaktır, ve kara deliğin entropisi olan son entropi, hacimdeki başlangıç entropisinden daha büyüktür, ve şu eşitsizlikle ifade edilir,

$$S \leq S_{BH} = \frac{k_B c^3}{4G\hbar} A,$$

burada, $A = 4\pi R^2$ hacmi sınırlayan alandır. Şaşırtıcı gözlem, herhangi bir parçacık sistemi için entropinin parçacık sayısı N ile orantılı olmasını beklediğimiz halde, entropinin üst sınırının alanla orantılı olmasıdır. Bu, etkileşmelerin önemsiz olduğu çok yüksek sıcaklıklarda bile geçerli kalmalıdır. “Hologram ilkesi”, serbestlik derecelerinin sistemin hacmi yerine sanki yüzeyinde yaşıyorlarmış gibi görüldüğü bu gözleme atıfta bulunur. Bu ilke, serbestlik dereceleri olarak parçacıkları sicimlerle değiştiren, tutarlı bir kuantum kütleçekim teorisi oluşturmak için çalışan sicim teorisi bağlamında formüle edilmiştir.

8. Kuantum harmonik salınıcı: Hamiltonyeni aşağıdaki gibi olan tek bir harmonik salınıcıyı ele alalım.

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}, \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq}.$$

(a) Üleşim fonksiyonu Z 'yi T sıcaklığında bulunuz, ve $\langle \mathcal{H} \rangle$ enerjisini hesaplayınız.

- Üleşim fonksiyonu Z , T sıcaklığında, şöyle verilir,

$$Z = \text{tr } \rho = \sum_n e^{-\beta E_n}.$$

Harmonik salınıcının enerji seviyeleri aşağıdaki gibi olduğundan,

$$\epsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

üleşim fonksiyonu

$$Z = \sum_n \exp \left[-\beta \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] = e^{-\beta \hbar \omega / 2} + e^{-3\beta \hbar \omega / 2} + \dots$$

$$= \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega / 2} - e^{-\beta \hbar \omega / 2}} = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)}.$$

Enerjinin beklenen değeri şöyledir,

$$\langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right) \frac{\cosh(\beta \hbar \omega / 2)}{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)} = \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right) \frac{1}{\tanh(\beta \hbar \omega / 2)}.$$

(b) Kanonik yoğunluk matrisi ρ için, $\mathcal{H}$ 'nin öz durumları ($\{|n\rangle\}$) ve enerji seviyeleri ($\{\varepsilon_n\}$) cinsinden, formal ifadeyi yazınız.

• Enerji öz durumlarının formal gösterimini kullanarak, yoğunluk matrisi ρ ,

$$\rho = 2 \sinh \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \left(\sum_n |n\rangle \exp \left[-\beta \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \langle n| \right).$$

Koordinat gösteriminde özfonksiyonlar şöyle yazılır,

$$\langle n|q\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \frac{H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left(-\frac{\xi^2}{2} \right),$$

burada

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q,$$

ve

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n \exp(-\xi^2)$$

$$= \frac{\exp(\xi^2)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (-2iu)^n \exp(-u^2 + 2i\xi u) du.$$

Örneğin,

$$H_0(\xi) = 1, \quad \text{and} \quad H_1(\xi) = -\exp(\xi^2) \frac{d}{d\xi} \exp(-\xi^2) = 2\xi,$$

şu öz durumları verir:

$$\langle 0|q\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 \right),$$

ve

$$\langle 1|q\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} q \cdot \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 \right).$$

Yukarıdaki ifadeleri kullanarak, matris elemanları şöyle elde edilir,

$$\begin{aligned}\langle q' | \rho | q \rangle &= \sum_{n, n'} \langle q' | n' \rangle \langle n' | \rho | n \rangle \langle n | q \rangle = \frac{\sum_n \exp \left[-\beta \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \cdot \langle q' | n \rangle \langle n | q \rangle}{\sum_n \exp \left[-\beta \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]} \\ &= 2 \sinh \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \cdot \sum_n \exp \left[-\beta \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \cdot \langle q' | n \rangle \langle n | q \rangle.\end{aligned}$$

(c) Genel bir operatör $A(x)$ için şunu gösteriniz:

$$\frac{\partial}{\partial x} \exp [A(x)] \neq \frac{\partial A}{\partial x} \exp [A(x)], \quad \text{eğer } \left[A, \frac{\partial A}{\partial x} \right] = 0 \text{ değilse,}$$

ancak her durumda,

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{tr} \{ \exp [A(x)] \} = \text{tr} \left\{ \frac{\partial A}{\partial x} \exp [A(x)] \right\}.$$

• Tanım gereği

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n,$$

ve

$$\frac{\partial e^A}{\partial x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial A^n}{\partial x}.$$

Ama n tane operatörün çarpımı için,

$$\frac{\partial}{\partial x} (A \cdot A \cdots A) = \frac{\partial A}{\partial x} \cdot A \cdots A + A \cdot \frac{\partial A}{\partial x} \cdots A + \cdots + A \cdot A \cdots \frac{\partial A}{\partial x}.$$

$\frac{\partial A}{\partial x}$ terimi, sadece eğer $\left[A, \frac{\partial A}{\partial x} \right] = 0$ ise kendisini çevreleyen A 'lara göre yeri kaydırılabilir, bu durumda,

$$\frac{\partial A}{\partial x} = n \frac{\partial A}{\partial x} A^{n-1}, \quad \text{ve} \quad \frac{\partial e^A}{\partial x} = \frac{\partial A}{\partial x} e^A.$$

Halbuki, bir iz fonksiyonu (tr) içindeki operatörlerin her zaman yerini değiştirebildiğimiz için, örneğin $\text{tr}(BC) = \text{tr}(CB)$

$$\text{tr} \left(A \cdots A \cdots \frac{\partial A}{\partial x} \cdots A \right) = \text{tr} \left(\frac{\partial A}{\partial x} \cdot A^{n-1} \right),$$

ve şu eşitlik

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{tr} (e^A) = \text{tr} \left(\frac{\partial A}{\partial x} \cdot e^A \right),$$

her durumda, $\left[A, \frac{\partial A}{\partial x} \right]$ üzerinde herhangi bir kısıt olmadan sağlanır.

(d) Dikkat edilirse, (a) şıkında hesaplanan üleşim fonksiyonu kütle m 'den bağımsızdır, yani $\partial Z/\partial m = 0$. Bu bilgiyi (c) şıkındaki sonuçla birlikte kullanarak, şunu gösteriniz,

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right\rangle.$$

• Kinetik ve potansiyel enerjilerin beklenen değerleri şöyle verilir,

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \text{tr} \left(\frac{p^2}{2m} \rho \right), \quad \text{ve} \quad \left\langle \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right\rangle = \text{tr} \left(\frac{m\omega^2 q^2}{2} \rho \right).$$

(a) şıkında hesaplanan üleşim fonksiyonu ifadesinin kütle m 'den bağımsız olduğunu hatırlarsak, $\partial Z/\partial m = 0$ olduğunu biliyoruz. $Z = \text{tr}(e^{-\beta\mathcal{H}})$ ile başlayıp türev aldığımızda,

$$\frac{\partial Z}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \text{tr} (e^{-\beta\mathcal{H}}) = \text{tr} \left[\frac{\partial}{\partial m} (-\beta\mathcal{H}) e^{-\beta\mathcal{H}} \right] = 0,$$

burada (c) şıkındaki sonucu kullandık. Hamiltonyenin türevini alarak,

$$\text{tr} \left[\beta \frac{p^2}{2m^2} e^{-\beta\mathcal{H}} \right] + \text{tr} \left[-\beta \frac{m\omega^2 q^2}{2} e^{-\beta\mathcal{H}} \right] = 0.$$

Sonuçta,

$$\text{tr} \left[\frac{p^2}{2m} e^{-\beta\mathcal{H}} \right] = \text{tr} \left[\frac{m\omega^2 q^2}{2} e^{-\beta\mathcal{H}} \right],$$

kinetik ve potansiyel enerjilerin beklenen değerlerinin eşit olduğu bulunur.

(e) (d) ve (a) şıklarının sonuçlarını kullanarak, veya başka yoldan, $\langle q^2 \rangle$ 'yi hesaplayınız. Problem 6'daki sonuçlar kuantum mekaniksel etkilerin dahil edilmesiyle düşük sıcaklıklarda nasıl değişir?

• (a) şıkında $\langle \mathcal{H} \rangle = (\hbar\omega/2)(\tanh(\beta\hbar\omega/2))^{-1}$ olduğu bulunmuştu. $\langle \mathcal{H} \rangle = \langle p^2/2m \rangle + \langle m\omega^2 q^2/2 \rangle$ olduğunu ve (d) şıkında kinetik ve potansiyel enerji terimlerinden gelen katkıların eşit bulunduğunu hatırlayın. Bundan dolayı,

$$\langle m\omega^2 q^2/2 \rangle = \frac{1}{2} (\hbar\omega/2) (\tanh(\beta\hbar\omega/2))^{-1}.$$

$\langle q^2 \rangle$ için çözersek,

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\tanh(\beta\hbar\omega/2))^{-1} = \frac{\hbar}{2m\omega} \coth(\beta\hbar\omega/2).$$

Klasik sonuç, $\langle q^2 \rangle = k_B T / m \omega^2$, $T \rightarrow 0$ için sıfıra giderken, kuantum sonucu $T = 0$ 'da $\langle q^2 \rangle = \hbar / (2m\omega)$ sabit değerinde doyuma ulaşır. Problem 6'daki yerdeğiştirme genliği eğrileri de tam olarak aynı doyum oranlarıyla etkilenir.

(f) Bir koordinat gösteriminde, $\langle q' | \rho | q \rangle$ 'yu yüksek sıcaklık limitinde hesaplayınız. Bir yaklaşım, aşağıdaki sonucu kullanmaktır,

$$\exp(\beta A) \exp(\beta B) = \exp [\beta(A + B) + \beta^2[A, B]/2 + \mathcal{O}(\beta^3)] .$$

• Şu genel operator özdeşliğini kullanarak

$$\exp(\beta A) \exp(\beta B) = \exp [\beta(A + B) + \beta^2[A, B]/2 + \mathcal{O}(\beta^3)] ,$$

Boltzmann operatörü, yüksek sıcaklık limitinde kinetik ve potansiyel enerjininkilere ayrıştırılabilir; en düşük mertebede,

$$\exp \left(-\beta \frac{p^2}{2m} - \beta \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right) \approx \exp(-\beta p^2 / 2m) \cdot \exp(-\beta m\omega^2 q^2 / 2).$$

İlk terim, bir ideal gazın Boltzmann operatörüdür. İkinci terim, $|q\rangle$ tarafından köşegenleştirilen bir operatör içerir. Yoğunluk matrisi elemanı şöyledir,

$$\begin{aligned} \langle q' | \rho | q \rangle &= \langle q' | \exp(-\beta p^2 / 2m) \exp(-\beta m\omega^2 q^2 / 2) | q \rangle \\ &= \int dp' \langle q' | \exp(-\beta p^2 / 2m) | p' \rangle \langle p' | \exp(-\beta m\omega^2 q^2 / 2) | q \rangle \\ &= \int dp' \langle q' | p' \rangle \langle p' | q \rangle \exp(-\beta p'^2 / 2m) \exp(-\beta q^2 m\omega^2 / 2). \end{aligned}$$

Serbest parçacık bazını, $\langle q' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-iq \cdot p / \hbar}$, kullanarak,

$$\begin{aligned} \langle q' | \rho | q \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' e^{ip'(q-q')/\hbar} e^{-\beta p'^2 / 2m} e^{-\beta q^2 m\omega^2 / 2} \\ &= e^{-\beta q^2 m\omega^2 / 2} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' \exp \left[- \left(p' \sqrt{\frac{\beta}{2m}} + \frac{i}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\beta}} (q - q') \right)^2 \right] \exp \left(-\frac{1}{4} \frac{2m}{\beta\hbar^2} (q - q')^2 \right), \end{aligned}$$

yazılabilir, burada kareyi tamamladık. Böylece,

$$\langle q' | \rho | q \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\beta q^2 m\omega^2 / 2} \sqrt{2\pi m k_B T} \exp \left[-\frac{m k_B T}{2\hbar^2} (q - q')^2 \right].$$

Yüksek sıcaklıkta uygun normalleştirme şudur,

$$\begin{aligned}
 Z &= \int dq \langle q | e^{-\beta p^2/2m} \cdot e^{-\beta m\omega^2 q^2/2} | q \rangle \\
 &= \int dq \int dp' \langle q | e^{-\beta p^2/2m} | p' \rangle \langle p' | e^{-\beta m\omega^2 q^2/2} | q \rangle \\
 &= \int dq \int dp |\langle q | p \rangle|^2 e^{-\beta p^2/2m} e^{-\beta m\omega^2 q^2/2} = \frac{k_B T}{\hbar \omega}.
 \end{aligned}$$

Bu nedenle, yüksek sıcaklık limitinde uygun biçimde normalleştirilmiş matris elemanı,

$$\langle q' | \rho | q \rangle_{\lim T \rightarrow \infty} = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2k_B T} q^2\right) \exp\left[-\frac{mk_B T}{2\hbar^2} (q - q')^2\right].$$

(g) Düşük sıcaklıklarda, ρ 'da düşük enerjili durumlar baskındır. Taban durum dalga fonksiyonunu kullanıp, $\langle q' | \rho | q \rangle$ 'nin $T \rightarrow 0$ limitindeki davranışını değerlendiriniz.

- Düşük sıcaklık limitinde, toplamdaki sadece ilk terimleri tutarız

$$\rho_{\lim T \rightarrow 0} \approx \frac{|0\rangle e^{-\beta \hbar \omega/2} \langle 0| + |1\rangle e^{-3\beta \hbar \omega/2} \langle 1| + \dots}{e^{-\beta \hbar \omega/2} + e^{-3\beta \hbar \omega/2}}.$$

Payda sadece taban durumun terimini alıp, ama paydada geometrik seriyi hesaplayarak,

$$\langle q' | \rho | q \rangle_{\lim T \rightarrow 0} \approx \langle q' | 0 \rangle \langle 0 | q \rangle e^{-\beta \hbar \omega/2} \cdot \left(e^{\beta \hbar \omega/2} - e^{-\beta \hbar \omega/2} \right).$$

$\langle q | 0 \rangle$ 'nin (b) şıkkında hesaplanan ifadesini kullanarak,

$$\langle q' | \rho | q \rangle_{\lim T \rightarrow 0} \approx \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (q^2 + q'^2)\right] (1 - e^{-\beta \hbar \omega}).$$

(h) $\langle q' | \rho | q \rangle$ 'nin tam ifadesini hesaplayınız.

9. Göreceli Coulomb gazı: $V = L^3$ hacimli bir kutuda N tane pozitif ve N tane negatif yüklü göreceli parçacığın bir göreceli sistemini düşünün. Hamiltonyen şöyledir,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{2N} c |\vec{p}_i|^2 + \sum_{i < j} \frac{e_i e_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|},$$

burada $i = 1, \dots, N$ ise $e_i = +e_0$, ve $i = N + 1, \dots, 2N$ ise $e_i = -e_0$ parçacıkların yüklerini temsil eder; $\{\vec{r}_i\}$ ve $\{\vec{p}_i\}$ ise ilgili koordinat ve momentlerdir. Bu, çözmek için çok karmaşık bir sistem olmakla beraber yine de bazı kesin sonuçlar elde etmek mümkündür.

(a) Özdeğerler $\varepsilon_n(L)$ ve özfonksiyonlar (konum uzayında) $\Psi_n(\{\vec{r}\})$ için Schrödinger denklemini yazınız. Parçacıkların bozon ya da fermion olmasına göre $\Psi_n(\{\vec{r}\})$ üzerine uygulanacak kısıtları yazınız.

- Konum gösteriminde $\vec{p}_i$ yerine $-i\hbar\vec{\nabla}_i$ alınır ve Schrödinger denklemi şöyle yazılır,

$$\left[\sum_{i=1}^{2N} c \left| -i\hbar\vec{\nabla}_i \right| + \sum_{i<j}^{2N} \frac{e_i e_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \Psi_n(\{\vec{r}_i\}) = \varepsilon_n(L) \Psi_n(\{\vec{r}_i\}).$$

$+e_0$ yüklü N tane özdeş parçacık ve $-e_0$ yüklü N tane özdeş parçacık vardır. Bu iki alt sistem üzerinde permütasyon operatörleri P_+ ve P_- 'nin etkisini inceleyebiliriz. Simetri kısıtları compact biçimde aşağıdaki gibi yazılabilir

$$P_+ P_- \Psi_n(\{\vec{r}_i\}) = \eta_+^{P_+} \cdot \eta_-^{P_-} \Psi_n(\{\vec{r}_i\}),$$

burada bozonlar için $\eta = +1$ ve fermiyonlar için $\eta = -1$ 'dir, ve $(-1)^P$ permütasyonun paritesini gösterir. Farklı yüklü parçacıkların değiş tokuşunda kısıtlama olmadığına dikkat ediniz.

(b) $\vec{r}'_i = \vec{r}_i/L$ ölçek değişimiyle özdeğerlerin $\varepsilon_n(L) = \varepsilon_n(1)/L$ ölçek değişimini sağladığını gösteriniz.

- $\vec{r}'_i = \vec{r}_i/L$ ölçek değişimiyle (ve türevde ilgili değişimle: $\nabla'_i = L\nabla_i$), yukarıdaki Schrödinger denklemi aşağıdaki hali alır;

$$\left[\sum_{i=1}^{2N} c \left| -i\hbar \frac{\nabla'_i}{L} \right| + \sum_{i<j}^{2N} \frac{e_i e_j}{L |\vec{r}'_i - \vec{r}'_j|} \right] \Psi_n \left(\left\{ \frac{\vec{r}'_i}{L} \right\} \right) = \varepsilon_n(L) \Psi_n \left(\left\{ \frac{\vec{r}'_i}{L} \right\} \right).$$

Yukarıdaki denklemde koordinatlar birim uzunluktaki bir kutuya sınırlanmıştır. Bunu, böyle bir kutuda, dalga fonksiyonları $\Psi'_n(\{\vec{r}'_i\}) = \Psi_n(\{\vec{r}'_i/L\})$ olan Schrödinger denklemi olarak alınabilir. Karşılık gelen özdeğerler ise $\varepsilon_n(1) = L\varepsilon_n(L)$ 'dir (yukarıdaki denklemin her iki tarafının L ile çarpılmasıyla elde edilir). Dolayısıyla ölçek ilişkisi aşağıdaki gibi elde edilir;

$$\varepsilon_n(L) = \frac{\varepsilon_n(1)}{L}.$$

(c) Üleşim fonksiyonu $Z(N, V, T)$ 'nin, özdeğerler $\{\varepsilon_n(L)\}$ cinsinden olan genel biçimini kullanarak Z 'nin T ve V 'ye ayrı ayrı bağlı olmadığını fakat farklı oranlarda özel bir kombinasyonla bağlı olduğunu gösteriniz.

- Üleşim fonksiyonun genel biçimi şöyledir,

$$Z(N, V, T) = \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right) = \sum_n \exp \left(-\frac{\varepsilon_n(L)}{k_B T} \right) \\ = \sum_n \exp \left(-\frac{\varepsilon_n(1)}{k_B T L} \right),$$

burada enerji seviyelerinin ölçeklenmiş biçimini kullanıldık. Açıkça görüldüğü gibi, yukarıdaki toplamda T ve L hep TL çarpımı halindedir. Ve $V = L^3$ olduğundan asıl ölçek değişkeni VT^3 'tür ve

$$Z(N, V, T) = \mathcal{Z}(N, VT^3).$$

(d) Gazın E enerjisini ve P basıncını üleşim fonksiyonunun değişimleri ile ilişkilendiriniz. $E = 3PV$ kesin sonucunu kanıtlayınız.

- Kanonik toplulukta ortalama enerji aşağıdaki gibi verilir

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = k_B T^2 (3VT^2) \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (VT^3)} = 3k_B VT^4 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (VT^3)}.$$

Serbest enerji $F = -k_B T \ln Z$ 'dir ve değişimi $dF = -SdT - PdV + \mu dN$ şeklindedir. Bundan dolayı gaz basıncı aşağıdaki gibi verilir

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = k_B T^4 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (VT^3)}.$$

Yukarıdaki ifadelerin oranı $E = 3PV$ kesin eşitliğini verir.

(e) d boyutlu bir uzayda Coulomb etkileşmesi uzaklıkla $e_i e_j / |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{d-2}$ ($d = 2$ 'de logaritmik bir etkileşim vardır.) Hangi d boyutunda *göreceli olmayan* parçacıklar için E ve P arasında kesin bir ilişki kurabilirsiniz (kinetik enerji $\sum_i \vec{p}_i^2 / 2m$)? Enerji ve basınç için karşılık gelen kesin ilişki nasıldır?

- Yukarıdaki kesin sonuç, enerji özdeğerleri $\varepsilon_n(L)$ 'i sistem boyutuyla ilişkilendiren e basit ölçekleme yasasının bir sonucudur. (b) şıkkındaki ölçekleme biçimini, kinetik ve potansiyel enerjiler aynı şekilde ölçeklendiğinden elde edebildik. Göreceli olmayan parçacıklar için kinetik enerji, $\sum_i \vec{p}_i^2 / 2m = -\sum_i \hbar^2 \nabla_i^2 / 2m$, $\vec{r}_i' = \vec{r}_i / L$ ölçek değişimiyle $1/L^2$ olarak ölçeklenir, etkileşim enerjisi $\sum_{i < j}^{2N} e_i e_j / |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{d-2}$ ise d boyutta $1/L^{d-2}$ şeklinde ölçeklenir. Bu iki biçim $d = 4$ olunca aynı şekilde ölçeklenecektir, sonuç olarak,

$$\varepsilon_n(L) = \frac{\varepsilon_n(1)}{L^2}.$$

Artık üleşim fonksiyonu aşağıdaki ölçekleme biçimine sahiptir;

$$Z(N, V = L^d, T) = \mathcal{Z}(N, (TL^2)^2) = \mathcal{Z}(N, VT^2).$$

Bir önceki bölümdeki adımları takip ederek, kesin ilişkiyi $E = 2PV$ olarak buluruz.

(f) Yukarıdaki ‘kesin’ ölçekleme yasasının neden yoğun (sıvı ya da katı) Colulomb karışımlarında geçerli olması beklenmez?

- Ölçekleme sonuçları, problemin istatistiksel mekaniğiyle ilgili tek bir ölçekleme uzunluğu L ’nin varlığı varsayımıyla elde edildi. Bu, bir gaz fazı için iyi bir yaklaşımdır. Yoğun (sıvı ya da katı) bir fazda, parçacıklar arasındaki kısa mesafeli itmelerin önemli olması beklenir, ve parçacık boyutu a başka bir ilgili uzunluk ölçeği olarak Schrödinger denkleminin çözümüne girecektir ve ölçekleme sonuçlarını geçersiz kılacaktır.

10. Virial teoremi N (klasik ya da kuantum) parçacıktan oluşan bir sistem için faz uzayının ölçek değişimi gibi kanonik dönüşümler altında değişmez kalmasının bir sonucudur. Sorunun devamında genelleştirilmiş koordinatları ve momentumları $(i = 1, \dots, N)$ olan N parçacığın Hamiltonyenini $\mathcal{H}(\{\vec{p}_i\}, \{\vec{q}_i\})$ olarak düşününüz.

(a) *Klasik model*: Klasik üleşim fonksiyonunun, $Z \equiv Z[\mathcal{H}]$, ifadesini yazınız ve $\vec{q}_1 \rightarrow \lambda \vec{q}_1$, $\vec{p}_1 \rightarrow \vec{p}_1/\lambda$ değişimi gibi bir çift eşlenik değişkenin yeniden ölçeklendirilmesi altında değişmez olduğunu gösteriniz. Örneğin $Z[\mathcal{H}_\lambda]$ λ ’dan bağımsızdır, ki burada $\mathcal{H}_\lambda$ yukarıdaki ölçeklendirmeden sonra elde edilen Hamiltonyendir.

- Klasik üleşim fonksiyonu faz uzayı üzerinde uygun integraller alınarak elde edilir;

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \left(\prod_i d^3 p_i d^3 q_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}}.$$

Yeniden ölçeklendirilmiş Hamiltonyen, $\mathcal{H}_\lambda = \mathcal{H}(\vec{p}_1/\lambda, \{\vec{p}_{i \neq 1}\}, \lambda \vec{q}_1, \{\vec{q}_{i \neq 1}\})$, yeniden ölçeklendirilmiş üleşim fonksiyonunu verir;

$$Z[\mathcal{H}_\lambda] = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \left(\prod_i d^3 p_i d^3 q_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}_\lambda},$$

bu da $\vec{q}_1' = \lambda \vec{q}_1$, $\vec{p}_1' = \vec{p}_1/\lambda$ değişken dönüşümleriyle aşağıdaki denkleme indirgenir;

$$Z[\mathcal{H}_\lambda] = \frac{1}{N!h^{3N}} \int (\lambda^3 d^3 p_1') (\lambda^{-3} d^3 q_1') \left(\prod_i d^3 p_i d^3 q_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}} = Z,$$

(b) *Kuantum mekaniksel model*: Kuantum üleşim fonksiyonunu veren ifadeyi yazınız.

$\vec{q}_1 \rightarrow \lambda \vec{q}_1$, $\vec{p}_1 \rightarrow \vec{p}_1/\lambda$ dönüşümleri altında bu üleşim fonksiyonunun da değişmez olduğunu gösteriniz. Burada $\vec{p}_i$ ve $\vec{q}_i$ artık kuantum mekaniksel operatörlerdir. (İpucu: zamandan bağımsız Schrödinger denkleminde başlayın.)

- Enerji bazını kullanarak

$$Z = \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right) = \sum_n e^{-\beta E_n},$$

E_n özdeğerleri aşağıdaki Schrödinger denkleminde elde edilir;

$$\mathcal{H}(\{\vec{p}_i\}, \{\vec{q}_i\}) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle,$$

burada $|\psi_n\rangle$ öz durumlarıdır. Yeniden ölçeklendirme dönüşümünden sonra Hamiltonyen;

$$\mathcal{H}(\vec{p}_1/\lambda, \{\vec{p}_{i \neq 1}\}, \lambda \vec{q}_1, \{\vec{q}_{i \neq 1}\}) \left| \psi_n^{(\lambda)} \right\rangle = E_n^{(\lambda)} \left| \psi_n^{(\lambda)} \right\rangle.$$

Koordinat gösteriminde momentum operatörü $\vec{p}_i = -i\hbar \partial / \partial \vec{q}_i$ 'dir ve bu yüzden $\psi_\lambda(\{\vec{q}_i\}) = \psi(\{\lambda \vec{q}_i\})$, $E_n^{(\lambda)} = E_n$ özdeğerli yeniden ölçeklendirilmiş denklemin çözümüdür. Özenerjiler dönüşüm altında değişmez olduğundan, ilgili üstlerin toplamı olan üleşim fonksiyonu da değişmeden kalır.

(c) Aşağıdaki biçimde bir Hamiltonyen varsayalım

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\{\vec{q}_i\}).$$

$Z[\mathcal{H}_\lambda]$ 'nin λ 'dan bağımsız olduğu sonucunu kullanarak *virial* ilişkisini kanıtlayınız,

$$\left\langle \frac{\vec{p}_1^2}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_1} \cdot \vec{q}_1 \right\rangle,$$

burada parantezler termal ortalamaları gösterir. (Cevabınızı, muhtemel bir kuantum mekaniksel çıkarım da benzer olduğu için klasik olarak formüle edebilirsiniz.)

• Serbest enerjinin λ 'ya göre $\lambda = 1$ 'de türevini alarak

$$0 = \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1} = -\beta \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda=1} = -\beta \left\langle -\frac{\vec{p}_1^2}{m} + \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_1} \cdot \vec{q}_1 \right\rangle,$$

buradan da,

$$\left\langle \frac{\vec{p}_1^2}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_1} \cdot \vec{q}_1 \right\rangle.$$

(d) Yukarıdaki ilişki bazen uzak galaksilerin kütlelerini tahmin etmek için kullanılır.

G-8.333 galaksisinin dış sınırındaki yıldızların $v \approx 200$ km/s hızla hareket ettiği ölçülmüştür. G-8.333 'ün kütlelerinin boyutuna oranını sayısal olarak tahmin ediniz.

• Virial ilişkisi kütleçekimsel sistemlere uygulandığında

$$\langle mv^2 \rangle = \left\langle \frac{GMm}{R} \right\rangle.$$

Galaksideki yıldızların kinetik ve potansiyel enerjilerinin bir çeşit dengeye ulaştığını düşünürsek aşağıdaki sonucu elde ederiz;

$$\frac{M}{R} \approx \frac{v^2}{G} \approx 6 \times 10^{20} \text{ kg/m}.$$
