VJEŽBE 6.
17.4. 2019.

broj čestica na energetskom nivou E_i:

$$N_i \sim g_i e^{-\beta E_i} \qquad \beta = \frac{1}{kT}$$

g_i - broj faznih ćelija

Ista exp ovisnost vrijedi i za vjerojatnost

$$w_i = C g_i e^{-\beta E_i}$$

C → dobivamo iz uvjeta normiranja $\sum_i w_i = 1$

$$C = \frac{1}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}} \qquad w_i = \frac{g_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}}$$

→ odredimo prosječnu vrijednost veličine A koja opisuje neko svojstveno stanje čestice.

A_i → vrijednost veličine A u stanju E_i

$$\bar{A} = \sum_i A_i w_i \quad \rightarrow \quad \bar{A} = \frac{\sum_i A_i g_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i g_i e^{-\beta E_i}}$$

U klasičnoj fizici pretpostavljamo da je energetski spektar kontinuiran.
Energija sustava → Hamiltonova funkcija, izražena generaliziranim koord. i impulsima.
Statističko promatranje provodimo u faznom prostoru kojeg tvore koordinate i impulsi

Ako čestica ima f stupnjeva slobode → 2f dim fazni prostor!

diferencijalni element tog faznog prostora: $d\varphi = dq_1 dq_2 \dots dq_f \, dp_1 dp_2 \dots dp_f$

KVANTNA FIZIKA - stanje određuju spin i orbita
ako čestica ima spin s, svakom orbitalnom stanju pridruženo je 2s+1 različitih spinskih stanja
(npr. spin elektrona je 1/2, odnosno elektron može biti u 2 spinska stanja)

· orbita čestice zadana je generaliziranim koordinatama i impulsima. Orbitalno stanje čestice određeno je reprezentativnom točkom u faznom prostoru.

$\Delta\Phi_i$ - volumen faznog prostora koji pripada i-tom energ. nivou.
taj volumen je podijeljen na fazne ćelije volumena h^f

broj orbitalnih stanja iste energije $= \frac{\Delta\Phi_i}{h^f}$

ukupan broj kvantnih ćelija na energijskom nivou jednak je umnožak broja spinskih i orbitalnih stanja:

$$g_i = (2s+1)\frac{\Delta\Phi_i}{h^f}$$

Neka razmaci između nivoa postaju sve manji. U granici kontinuiranog energetskog spektra možemo uzeti $\Delta\Phi_i \to d\Phi_i$

Suma po energijskim nivoima prelazi u integral po faznom prostoru:

$$\sum_i g_i = \frac{2s+1}{h^f}\int d\phi$$

$$\Rightarrow \quad \overline{A} = \frac{\int A e^{-\beta E} d\phi}{\int e^{-\beta E} d\phi}$$

iako se pri prijelazu sume po energijskim nivoima na integral po f.p. pojavljuje faktor $(2s+1)/h^f$, taj faktor nestaje u izrazu za prosječnu vrijednost fizičke veličine.

PARTICIJSKA FUNKCIJA $\quad Z = \int e^{-\beta E} d\phi$

$$U = -\left(\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z\right)_V \qquad \beta = \frac{1}{kT}$$

S derivacije po parametru β prelazimo na derivaciju po temperaturi

$$\beta\frac{\partial}{\partial\beta} = -T\frac{\partial}{\partial T}$$

$$\rightarrow \quad U = kT^2\left(\frac{\partial}{\partial T}\ln Z\right)_V$$

možemo pisati kao:

$$U = T\left[\left(\frac{\partial}{\partial T}kT\ln Z\right) - k\ln Z\right] = -kT\ln Z + T\left(\frac{\partial}{\partial T}kT\ln Z\right)_V \quad (*)$$

u termodinamici smo definirali slob. energiju sustava kao:

$$\left.\begin{aligned} F &= U - TS \\ S &= -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \end{aligned}\right\} \quad U = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \quad (**)$$

Usporedimo (*) i (**) $\rightarrow$ $F = -kT\ln Z$

ključna relacija koja povezuje termodinamiku sa statističkom fizikom

(1) Energija klasične čestice opisana je sa
$E = c_1 p_x^2 + c_2 p_y^2 + c_3 x^2 + c_4 y^2$ i nalazi se u kontaktu s
termostatom na temperaturi T.

Odredite srednju energiju čestice.

$$\bar{E}(T) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$$

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta[c_1 p_x^2 + c_2 p_y^2 + c_3 x^2 + c_4 y^2]}\, dp_x\, dp_y\, dx\, dy$$

$$\bar{E}(T) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta c_1 p_x^2} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta c_2 p_y^2} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta c_3 x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta c_4 y^2} dy\right]$$

Supstitucija:

$$\sqrt{\beta}\, p_x = U_{px} \qquad \sqrt{\beta}\, p_y = U_{py} \qquad \sqrt{\beta}\, x = U_x \qquad \sqrt{\beta}\, y = U_y$$

$$dp_x = \frac{1}{\sqrt{\beta}} dU_{px} \quad dp_y = \frac{1}{\sqrt{\beta}} dU_{py} \quad dx = \frac{1}{\beta} dU_x \quad dy = \frac{1}{\sqrt{\beta}} dU_y$$

$$\bar{E}(T) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-c_1 U_{px}^2} dU_{px} \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-c_2 U_{py}^2} dU_{py} \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-c_3 U_x^2} dU_x \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-c_4 U_y^2} dU_y\right]$$

Sada sve ove $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ možemo izvaditi van iz integrala

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[(\beta)^{-4/2} + \text{neki integral koji ne ovisi o } \beta\right]$$

njega će derivacija ubiti

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{1}{\beta^2}\right) = \frac{2}{\beta} = \underline{2kT},$$

(2) Ukupna energija klasične čestice u 3D sustavu je

$$E(p_x,p_y,p_z,x,y,z) = a(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+b(x^2+y^2)+cz$$

gdje je $-\infty < p_x,p_y,p_z,x,y < \infty$ $\quad 0<z<\infty$

Sustav se nalazi u kontaktu s termostatom na temperaturi T.

Odredite:

1) Srednju energiju čestice $\bar{E}(T)$

2) Toplinski kapacitet po čestici $C_V(T)$

1) $\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left\{\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta\left[a(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+b(x^2+y^2)+cz\right]}\, dp_x\, dp_y\, dp_z\, dx\, dy\, dz\right\}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left\{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta a p_x^2} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta a p_y^2} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta a p_z^2} dp_z \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta b x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta b y^2} dy \int_{0}^{\infty} e^{-\beta c z} dz\right\}$$

$$\underbrace{u_1=\sqrt{\beta}p_x \quad u_2=\sqrt{\beta}p_y \quad u_3=\sqrt{\beta}p_z \quad u_4=\sqrt{\beta}x \quad u_5=\sqrt{\beta}y}_{dp_{1\ldots5}=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\ldots} \qquad u_6=\beta z$$

$$\frac{1}{\beta}du_6 = dz$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left\{\underbrace{\left(\frac{1}{\sqrt{\beta}}\right)^5\cdot\frac{1}{\beta}}\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\cdots\right\} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\beta^{-5/2}\beta^{-1}\right) = \frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\beta^{-6/2}\right) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\beta^{-3}$$

$$= \frac{3}{\beta}$$

$$\underline{\bar{E} = 3kT}$$

$$\underline{C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3k_B}$$