מכניקה סטטיסטית - תרגיל 1

31 במרץ 2011

1 תערובת גזים אידאלים

בתרגיל זה אנו נחשב את האנטרופיה ומשוואות המצב של גז אידאלי המורכב משני סוגי חלקיקים בעלי מסות שונות. הגז מכיל $N = N_1 + N_2$ חלקיקים, מהם N_1 בעלי מסה m_1 ו־N_2בעלי מסה m_2. הגז נמצא במיכל בנפח V. נסמן ב־ $q_1, \dots q_{3N_1}$ את המיקומים של החלקיקים מהסוג הראשון וב־ $p_1, \dots p_{3N_1}$ את התנעים המתאימים. באותו אופן נסמן ב־ $Q_1, \dots Q_{3N_2}$ את המיקומים של החלקיקים מהסוג השני וב־ $P_1, \dots P_{3N_2}$ את התנעים המתאימים.

1. כתבו את ההמילטוניאן של המערכת.
2. נגדיר משתנים חדשים עבור החלקיקים מהסוג השני, $\bar{P}_i = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} P_i$. כתבו את ההמילטוניאן של המערכת באמצעות המשתנים $p_i, \bar{P}_i$.
3. חשבו בעזרת ההמילטוניאן בסעיף 2 את מספר המצבים עם אנרגיה קטנה מ־E בעזרת

$$\Sigma(E) = \frac{1}{h^{3N_1+3N_2} N_1! N_2!} \int_{H<E} d^{3N_1}q d^{3N_2}Q d^{3N_1}p d^{3N_2}P$$

לשם כך עליכם לעבור לאינטגרציה במשתנים $\bar{P}_i$ בהם האינטגרל ניתן לחישוב ע"י הנוסחה של נפח היפר־כדור. שימו לב שהחלפת המשתנים באנטרגל צריכה להעשות ע"י הכפלה ביעקוביאן. לדוגמא אינטרגל המוגדר כ־$\int dx f(x)$ ונרצה לחשבו בקואורדינטות $y = ax$.תחילה עלינו לחשב $dy = adx$ ואז לרשום

$$\int dx f(x) = \int \frac{dy}{a} f(\frac{y}{a}) = \frac{1}{a} \int dy f(\frac{y}{a})$$

4. חשבו את האנטרופיה של המערכת, $S(E, V, N_1, N_2)$.
5. השתמשו בזהויות התרמודינמיות, $\frac{P}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N_1,N_2}$ ו־ $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N_1,N_2}$, על מנת לקבל את משוואת המצב של המערכת.

2 תכונות פונקצית האנטרופיה

פונקצית האנטרופיה נותנת לנו מידע רב על המערכת. הצורה שלה תלויה בתכונות המערכת והפרמטרים המאקרוסקופיים שעימם בחרנו לתאר את המערכת. בכל מקרה פונקצית האנטרופיה תקיים מספר תכונות בסיסיות :

- האנטרופיה היא פונקציה אדיטיבית, ולכן גם אקטנסיבית, $S(\lambda E, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(E, V, N)$.
- האנטרופיה גזירה בכל מרחב הפרמטרים.
- האנטרופיה היא פונקציה עולה של האנרגיה.
- האנטרופיה מתאפסת עבור המצב בו $\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N} = 0$(מצב בו הטמפרטורה היא 0).

מצאו מתוך 10 הפוקציות ברשימה את ה־5 שמתאימות לשמש כפונקצית אנטרופיה. עבור פונקציה שמתאימה רשמו את כל התכונות שהיא מקיימת. עבור פונקציה שאיננה מתאימה רשמו לפחות סיבה אחת מדוע לא. כמה הבהרות לפני : R, v_0, θהם פרמטרים חיובים עם יחידות של $\frac{E}{T}, V, T$בהתאמה (R הוא קבוע הגזים, $R = k_B N_A$ עבור $N_A \simeq 6 \cdot 10^{23}$). הסימון של שורש או חזקה שברית מתייחס רק לשורש החיובי של הביטוי.

(א) $S = \left(\frac{R^2}{v_0\theta}\right)^{1/3}[NVE]^{1/3}$

(ב) $S = \left(\frac{R}{\theta^2}\right)^{1/3}\left[\frac{NE}{V}\right]^{2/3}$

(ג) $S = \left(\frac{R}{\theta}\right)^{1/2}\left[NE + \frac{R\theta V^2}{v_0^2}\right]^{1/2}$

(ד) $S = \left(\frac{R^2\theta}{v_0^3}\right)\frac{V^3}{NE}$

(ה) $S = \left(\frac{R^3}{v_0\theta^2}\right)^{1/5}[N^2VE^2]^{1/5}$

(ו) $S = NR\ln(\frac{EV}{N^2R\theta v_0})$

(ז) $S = \left(\frac{R}{\theta}\right)^{1/2}[NE]^{1/2}\exp(-\frac{V^2}{2N^2v_0^2})$

(ח) $S = \left(\frac{R}{\theta}\right)^{1/2}[NE]^{1/2}\exp\left(-\frac{EV}{NR\theta v_0}\right)$

(ט) $E = \left(\frac{v_0\theta}{R}\right)\frac{S^2}{V}\exp(\frac{S}{NR})$

(י) $E = \left(\frac{R\theta}{v_0}\right)NV\left(1+\frac{S}{NR}\right)\exp(-S/NR)$

3 תרגיל אקסל - קירוב סטירלינג והתכנסות להתפלגות גאוסיאנית

1. השוו באמצעות תוכנת אקסל בין הערך האמיתי של עצרת לבין קירוב סטירלינג. ציירו בגרף אחד את הפונקציות $N!$ ואת קירוב סטירלינג של פונקצית העצרת בשני סדרים שונים (לדוגמא סדר הקירוב אותו בחרנו להשתמש בכיתה וקירוב מסדר גבוה יותר). הדפיסו את הגרף וצרפו לתרגיל. מומלץ להציג ציר ה-Y בגרף בסקלה לוגריתמית. עבור איזה ערך מינימלי של N הסטיה של כל אחד מהקירובים מהערך האמיתי של $N!$ תהיה קטנה מ- 5%?

2. בכיתה מצאנו את פונקציה האנטרופיה של מספר החלקיקים בחציו אחד של מיכל המכיל גז אידאלי. פונקצית אנטרופיה מופיעה במקרים רבים במערכות סטטיסטיות בהם מספר חלקיקים יכולים להימצא בשני מצבים אפשריים (מבחינת מיקום, אנרגיה או כל פרמטר אחר).

(א) כעת חשבו את ההסתברות למצוא Q חלקיקים בשליש השמאלי של המיכל. נסמן את מספר החלקיקים הכולל ב-N, את מספר החלקיקים בשליש השמאלי ב-Q ואת ההתפלגות ב-$P(Q,N)$. בחישוב עליכם לקחת בחשבון שהסיכוי לראות חלקיק בשליש השמאלי הוא $1/3$, ולא $1/2$ כפי שחושב בכיתה.

(ב) רשמו את ההסתברות בצורה של $P(Q,N) = C(N)e^{Nf(q)}$, כאשר $C(N)$ הוא מקדם נרמול. אם ברצונכם לוודא שקיבלתם את הפונקציה $f(q)$ הנכונה, בידקו שהיא מקסימלית ב-$q = 1/3$.

(ג) ציירו באקסל את הפונקציה $P(Q,N)$ עבור $N = 15, 25, 60$. צרפו את הגרף לדף התשובות.

(ד) על מנת לבחון את ההתכנסות של ההתפלגות לגאוסיאן ציירו את הפונקציה $P(Q,N)\cdot\sqrt{N}$ כשציר ה-x הוא $x = \sqrt{N}(q-\frac{1}{3})$ עבור $N = 15, 25, 60$. כאשר $q \equiv Q/N$. צרפו את הגרף לדף התשובות.