

מכניקה סטטיסטית - תרגיל 3

ניתן בתאריך 12/05/2011, להגשה בתאריך 26/05/2011

1 גז אידאלי תחת פוטנציאל מדרגה

בתרגיל האחרון עסקנו בגז אידאלי שנמצא תחת פוטנציאל מדרגה. ראינו שבעיה זאת מתארת מצב שבו שני מיכלים מחוברים ביניהם בצינורית דקה כאשר אחד המיכלים מונח בגובה נמוך יותר. בשאלה זו ננתח מצב זה באמצעות הצבר הגרנד-קנוני. נתייחס לשני מיכלים כך שבכל אחד נמצא גז אידאלי. לחלקיקים במיכל העליון, שמספרם N_1 , יש בנוסף לאנרגיה הקינטית גם אנרגיה פוטנציאלית אחידה (זהה לכל החלקיקים) mgh , בעוד שלחלקיקים במיכל התחתון, שמספרם N_2 , יש אנרגיה קינטית בלבד. נסמן $N = N_1 + N_2$

1. כתבו את ההמילטוניאן של המערכת.
2. חשבו את פונקציית החלוקה של הקנונית של הגז כולו (בשני המיכלים יחד) הגז ואת האנרגיה החופשית שלו. רמז: השתמשו בפונקציית הבינום של ניוטון.
3. חשבו את מספר החלקיקים במיכל העליון, N_1 , לפי החישוב הקנוני.
4. קעת ננתח את הבעיה בצבר הגרנד קנוני. נתייחס לגזים במיכל העליון והתחתון כל אחד כגז אידאלי גרנד קנוני עם מספר חלקיקים משתנה ופוטנציאל כימי μ_1, μ_2 בהתאמה. חשבו את פונקציית החלוקה הגרנד קנונית של הגזים. רמז: השתמשו בפיתוח טיילור של פונקציית האקספוננט.
5. חשבו את מספר החלקיקים הממוצע בכל מיכל ע"י גזירת האנרגיה פונקציית החלוקה,

$$\langle N \rangle = z \frac{\partial \ln \mathcal{L}}{\partial z}$$

6. נרצה שבשווי משקל נוכל לחבר את שני המיכלים ולא יהיה זרם של חלקיקים, ולכן נדרוש $\mu_1 = \mu_2$. השתמשו במשוואה זו בתוצאה של סעיף 5 כדי למצוא את מספר החלקיקים במיכל העליון. האם קיבלתם תוצאה זהה לסעיף 3?

2 גז אידאלי בשדה כבידה

בשאלה זו נבחן מחדש את המודל של גז אידאלי תחת פוטנציאל כבידתי בעזרת הצבר הגרנד קנוני. כזכור עסקנו בגז אידאלי תחת פוטנציאל מהצורה mgh שנמצא במיכל בשטח A ואורך L . קעת נחשוב על הגז בצורה הבאה: נדמיין שהמיכל נפרס לפרוסות אופקיות דקות מאוד המקבילות לבסיס. רוחב כל פרוסה הוא dh , ומספרן L/dh . בכל פרוסה ישנו, בקירוב, גז אידאלי בעל צפיפות אחידה ומספר חלקיקים $N(h_i)$ שנמצאת תחת פוטנציאל μ .

1. כתבו את ההמילטוניאן של כל פרוסה.
2. חשבו את פונקציית החלוקה הגרנד קנונית של הפרוסה.
3. מצאו את מספר החלקיקים בפרוסה כתלות ב- μ ע"י גזירת פונקציית החלוקה. כאשר המערכת נמצאת בשווי משקל הפוטנציאל הכימי בכל השכבות זהה ולא תלוי ב- h . מצאו את הפוטנציאל הכימי מתוך הנחה ששה"כ במיכל יש N חלקיקים. את הסכום על כל השכבות העריכו כאינטרגרל. חשבו מתוך ביטוי זה את צפיפות החלקיקים $\rho(h) = \lim_{dh \rightarrow 0} \frac{N(h_i)}{dh}$. האם תוצאה זו מתאימה לתוצאה משאלה 2 בתרגיל הקודם?
4. חשבו מתוך הנוסחה $PV = k_B T \ln \mathcal{L}$ את התלות של הלחץ בגובה $p(h)$. מהו לחץ האוויר בפסגת האוורסט (8484 מ' מעל פני הים)? נניח שהאוויר מורכב ממולקולות חנקן, שהטמפ' שלו אחידה $T = 300K$ ושהלחץ בגובה פני הים הוא $1.atm$.

3 ריאקציה כימית - צבר קנוני וגרנד קנוני

קופסה בנפח V המצומדת לאמבט חום בטמפ' T מכילה גז אידאלי המורכב ממולקולות משני זנים, A ו- B , שיכולים לעבור את הריאקציה הכימית $A + A \rightleftharpoons B$ (מערכת כזו ניתן למצוא לדוגמא בריאקציה בה $A = H$, הם אטומי מימן ו- $B = H_2$ הן מולקולות מימן). לכל מולקולות מסוג A אנרגיה כימית אפס ומסה m_A , ולמולקולות מסוג B אנרגיה כימית ϵ ומסה m_B . בתחילה המערכת מונה $N_{A,initial} = N_I$ מולקולות מסוג A ואין אף מולקולה מסוג B ($N_{B,initial} = 0$).

1. על מנת למצוא את מספר המולקולות הממוצע מסוג B , הניחו בתחילה כי N_B מאולץ להיות מספר קבוע ונתון. חשבו את האנרגיה החופשית כתלות ב- N_B בלבד (שימו לב ליחס הקבוע בין N_A , N_B ו- N_I). לשם כך הראו תחילה ש-

$$F(T, V, N_I, N_B) = F_{i.g.}^{(A)}(T, V, N_A) + F_{i.g.}^{(B)}(T, V, N_B) - \epsilon N_B$$

והשתמשו בביטויים לאנרגיה החופשית של הגז אידאלי בצבר הקנוני, $F_{i.g.}(T, V, N)$, שמצאנו בתרגולים.

2. במערכת האמתית אין אילוץ על הערך של N_B . מצאו את הערך הממוצע $\langle N_B \rangle$ על ידי מציאת המינימום של האנרגיה החופשית $F(T, V, N_I, N_B)$. מומלץ לבטא את התוצאה באמצעות אורך הגל התרמי של החלקיקים מאחד הסוגים והפרמטר $\frac{m_B}{m_A}$. הסבירו את התוצאה בגבול של טמפ' גבוהה ונמוכה (ביחס למה צריכה הטמפ' להיות גבוהה/נמוכה?). איזה גבול קשור לשאלה 1 בדף התרגילים הראשון שפתרתם?

3. נפתור את השאלה מחדש בעזרת חישוב בצבר הגרנד-קנוני. נתייחס לכל אחד משני הזנים כגז אידאלי בעל מספר חלקיקים משתנה ופוטנציאל כימי נפרד, μ_A, μ_B . בסעיף זה ניתן להשתמש בתוצאות שחושבו בכיתה עבור גז אידאלי בצבר גרנד קנוני (שימו לב אם לחלקיקים יש או אין גם אנרגיה קבועה בנוסף לאנרגיה הקינטית). מהו מספר החלקיקים הממוצע עבור כל גז, $\langle N_A \rangle, \langle N_B \rangle$ כתלות ב- μ_A, μ_B ?

4. עתה יש למצוא קשר בין הפוטנציאלים הכימיים של שני הזנים. רשמו את שני התנאים שמגדירים את הפוטנציאל הכימי, אחד מתוך תנאי על $\langle N_A \rangle$ ו- $\langle N_B \rangle$ והשני מתוך גזירה של האנרגיה החופשית לפי מספר החלקיקים מכל זן בהתאם להסבר שנשלח לכם (שימו לב ליחס הקבוע בין N_A, N_B ו- N_I). כתבו מתוך שני התנאים משוואה עבור $\langle N_B \rangle$ והראו שהיא זהה לזו שקיבלתם בסעיף 2.

5. ידוע שאנרגיה הקשר של מולקולת מימן היא $4.13 \frac{kJ}{mole}$. ציירו את הגרף $\frac{N_{H_2}}{N_I}$ כתלות בטמפ' והשתמשו בהתנהגות בגבול של טמפ' גבוהה ונמוכה לוודא שהגרף תקין. נניח שבביל השרטוט $\frac{V}{\lambda_T^3 N_I} = 1000$ ושמסת מולקלת מימן היא בדיוק פי 2 ממסת אטום המימן. מומלץ שסקלת הטמפ' תהיה לוגריתמית.