# חוק החלוקה השווה באנסמבל הקנוני

אמיר בר

25 באפריל 2013

## 1 הקדמה

בשיעור דיברתם על חוק החלוקה השווה באנסמבל המיקרוקנוני. בשעור זה נראה כיצד חוק זה מתקבל באנסמבל הקנוני ותוך כדי כך נתרגל מעט חישובים באנסמבל זה.

## 2 תוחלת באנסמבל הקנוני

כמו שראיתם בשיעור, הסיכוי של מצב מיקרוסקופי $C$ עם אנרגיה $H\left(C\right)$ של מערכת קנונית בטמפרטורה $T$ הוא

$$P\left(C\right)=\frac{1}{Z}e^{-\beta H\left(C\right)}$$

כאשר $\beta=k_{B}T$, ופונקציית החלוקה $Z$ דואגת לכך שפונקציית ההסתברות תהיה מנורמלת, כלומר

$$Z=\sum_{C'}e^{-\beta H\left(C'\right)}$$

לכן התוחלת של פונקציה כלשהי של קונפיגורציה, $f(C)$, ניתנת על ידי

$$\begin{aligned}\left\langle f\right\rangle &= \sum_{C}P\left(C\right)f\left(C\right)\\ &= \sum_{C}\frac{1}{Z}e^{-\beta H\left(C\right)}f\left(C\right)\\ &= \frac{\sum_{C}e^{-\beta H\left(C\right)}f\left(C\right)}{\sum_{C'}e^{-\beta H\left(C'\right)}} \qquad (1)\end{aligned}$$

לצורך הבהרת הנוסחה להלן מספר דוגמאות עבור גז אידאלי

### 2.1 ממוצע של $x$ בגז אידאלי

כזכור, האנרגיה של גז אידאלי בעל $N$ חלקיקים במיקומים $\{q_i\}$ותנעים $\{p_i\}$נתונה על ידי

$$H\left(p\right)=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_{i}^{2}}{2m}.$$

נחשב עכשיו את הערך הממוצע של רכיב ה־$x$ של מיקומו של החלקיק הראשון (כל החלקיקים זהים כמובן). לשם כך נניח שהגז נמצא בקופסא בעלת אורך, רוחב וגובה $L$. עתה נשתמש בנוסחה (1) כאשר הסכום יהפוך לאינטגרל מכיוון שדרגות החופש רציפות

$$\begin{aligned}\langle q_{1,x}\rangle &= \frac{\int dq^{3N}dp^{3N}q_{1,x}e^{-\beta H(p)}}{\int dq^{3N}dp^{3N}e^{-\beta H(p)}}\\ &= \frac{\int_0^L dq_{1,x}q_{1,x}\int_0^L dq_{1,z}\int_0^L dq_{1,z}\int dq^{3(N-1)}\int dp^{3N}e^{-\beta H(p)}}{\int_0^L dq_{1,x}\int_0^L dq_{1,z}\int_0^L dq_{1,z}\int dq^{3(N-1)}\int dp^{3N}e^{-\beta H(p)}}\\ &= \frac{\int_0^L dq_{1,x}q_{1,x}}{\int_0^L dq_{1,x}}\end{aligned}$$

כאשר שמנו לב שכל האינטגרלים במונה ובמכנה זהים מלבד האינטגרל על $q_{1,x}$. מאינטגרציה ישירה מקבלים

$$\langle q_{1,x}\rangle = \frac{\left[\frac{1}{2}q_{1,x}^2\right]_0^L}{\left[q_{1,x}\right]_0^L} = \frac{\frac{1}{2}L^2}{L} = \frac{L}{2}$$

כלומר, בממוצע החלקיק יהיה באמצע הקופסה, כפי שאפשר היה לצפות מלכתחילה.

## 3 ממוצע של $p$ בגז אידאלי

עכשיו נחשב את הממוצע של רכיב ה־$x$ של התנע של החלקיק הראשון בצורה דומה

$$\begin{aligned}\langle p_{1,x}\rangle &= \frac{\int dq^{3N}dp^{3N}p_{1,x}e^{-\beta\sum_i p_i^2/2m}}{\int dq^{3N}dp^{3N}e^{-\beta\sum_i p_i^2/2m}}\\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,y}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,z}p_{1,x}e^{-\beta p_1^2/2m}\int dq^{3N}\int dp^{3N-1}e^{-\beta\sum_{i>1}p_i^2/2m}}{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,y}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,z}e^{-\beta p_1^2/2m}\int dq^{3N}\int dp^{3N-1}e^{-\beta\sum_{i>1}p_i^2/2m}}\\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}p_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,y}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,z}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}}{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,y}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,z}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}}\\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}p_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}}{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}}\end{aligned}$$

הפעם האינטגרציה הישירה היא מעט קשה יותר מהמקרה הקודם עקב הגאוסיאן המופיע באינטגרל, אם כי לא הרבה יותר. עם זאת, ניתן לחשב את האינגרל מידית ללא חישוב, אם שמים לב שהאינטגרנד במונה הוא פונקציה אי־זוגית ותחום האינטגרציה הוא זוגי, ולכן המונה הוא 0. המכנה איננו 0 (האינטגרנד תמיד חיובי) ולכן קיבלנו

$$\langle p_{1,x}\rangle = 0$$

כלומר שבממוצע וקטור המהירות של כל חלקיק הוא 0. למעשה, יכולנו לצפות זאת מראש מכיוון שאין כיוון מועדף בגז (הוא איזוטרופי) ולכן לא יתכן שלוקטור המהירות יהיה ערך ממוצע. דרך אחרת לראות זאת, יותר אינטואיטיבית ופחות מדויקת, היא דרך הצפייה שלמרכז המסה של הגז לא תהיה מהירות, ולכן ממוצע וקטורי המהירויות של כל החלקיקים צריך להיות 0 (כאמור, טיעון זה אינו מדוייק).

## 4 ממוצע האנרגיה של חלקיק וחוק החלוקה השווה

באנסמבל המיקרוקנוני ראיתם שהאנרגיה של מערכת היא $\frac{1}{2}k_BT$ עבור כל דרגת חופש ריבועית. נרצה עתה לראות כיצד תוצאה זו מתקבלת מהאנסמבל הקנוני. לשם כך נחשב את האנרגיה הקינטית של חלקיק בגז אידאלי בדרך דומה לחישובים למעלה. האנרגיה הקינטית של החלקיק הראשון היא

$$E_{kin}=\frac{p_1^2}{2m}=\frac{p_{1,x}^2+p_{1,y}^2+p_{1,z}^2}{2m}$$

מכיוון שהכיוונים $x,y,z$ הם סימטריים, נחשב רק עבור הכיוון $x$.

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{p_{1,x}^2}{2m}\right\rangle &= \frac{\int dq^{3N}dp^{3N}p_{1,x}e^{-\beta\sum_i p_i^2/2m}}{\int dq^{3N}dp^{3N}e^{-\beta\sum_i p_i^2/2m}}\\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}\frac{1}{2m}p_{1,x}^2e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}}{\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}}\end{aligned}$$

כדי לחשב את האינטגרל נשתמש בנוסחה של אינטגרל גאוסיאני $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$. לכן המכנה הוא פשוט

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}=\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}$$

כדי לחשב את המונה נשתמש בטריק הבא

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}\frac{1}{2m}p_{1,x}^2e^{-\beta p_{1,z}^2/2m} &= \int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}\left(-\frac{d}{d\beta}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}\right)\\ &= -\frac{d}{d\beta}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{1,x}e^{-\beta p_{1,z}^2/2m}\\ &= -\frac{d}{d\beta}\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}\\ &= \frac{1}{2\beta}\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}\end{aligned}$$

לכן

$$\left\langle\frac{p_{1,x}^2}{2m}\right\rangle=\frac{\frac{1}{2\beta}\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}}{\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}}=\frac{1}{2\beta}=\frac{1}{2}k_BT$$

בהתאם לחוק החלוקה השווה. עתה ניתן לראות שהחישוב היה נשאר זהה עבור כל דרגת חופש ריבועית. לדוגמה, אם היינו מוסיפים להמילטוניאן איבר מהצורה $\sum_{i=1}^{N}k\left(q_i-q_{0i}\right)^2$ אז באותה צורה היינו מקבלים ש $\left\langle k\left(q_{1,x}-q_{01,x}\right)^2\right\rangle=\frac{1}{2}k_BT$. דוגמה נוספת היא גז המורכב משני סוגי חלקיקים בעלי מסה $m_1$ ו $m_2$ (כמו בתרגיל). מהחישוב למעלה ברור ש $\left\langle\frac{p_{1,x}^2}{2m_1}\right\rangle=\left\langle\frac{p_{2,x}^2}{2m_2}\right\rangle=\frac{1}{2}k_BT$ בהנחה שהחלקיק הראשון הוא מסוג 1 והשני מסוג 2.