Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 30.3.2021 *numerické metódy, grandkanonické rozdelenie*

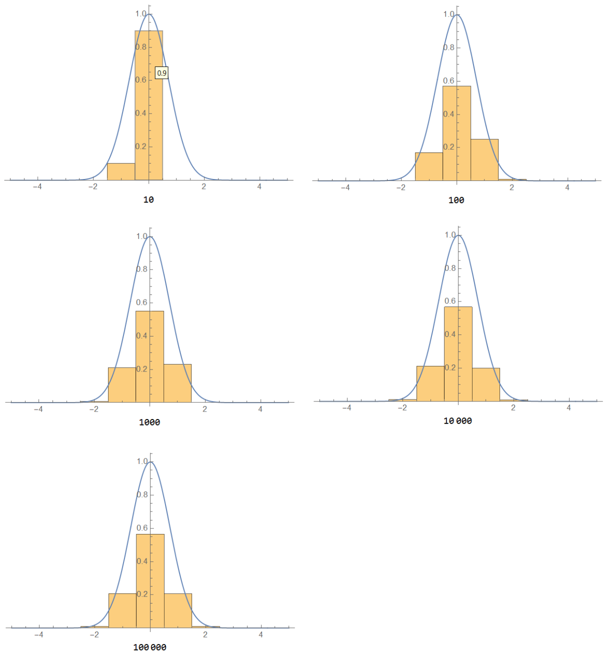
Akékoľvek otázky smelo smerujte na `juraj(a)tekel(b)gmail(c)com`

Metropolisov algortimus

Príklad 1 (Metropolisov algoritmus ako generátor
Vcelku priamočiaro sa normalizačné konštanty vo vzťahu pre α vykrátia. Dôležité je preto, že nie vždy vieme normalizáciu spočítať explicitne, alebo to je niekedy len zbytočná otrava.

b. Pozriem, rozmyslím, vidím.

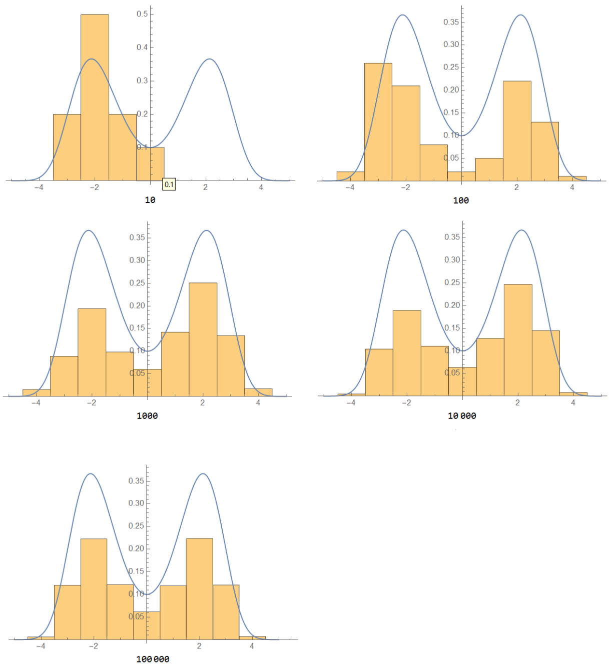
c. Výsledky môjho programu v Mathematice pre rôzne hodnoty N.



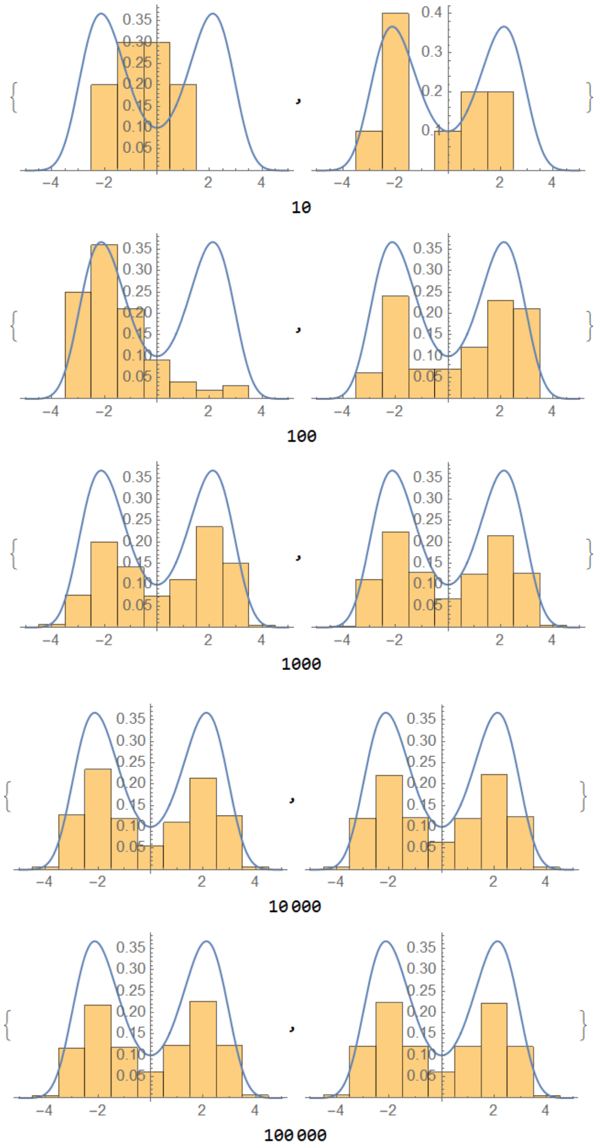
d. Toto už nechám na vás.

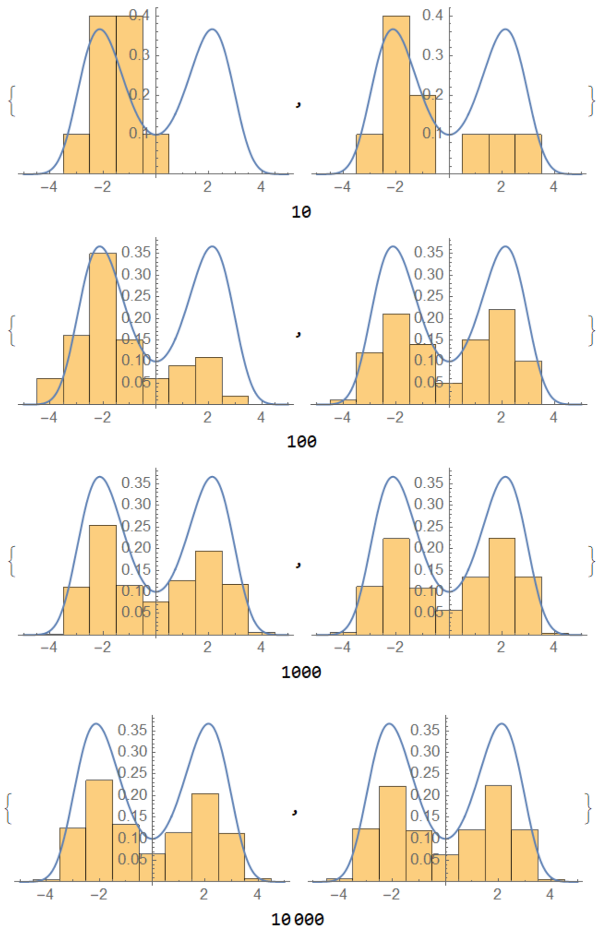
e. Výsledky môjho programu pre funkciu

$$p(x) = \frac{1+x^2}{10} e^{-x^4/50} \ .$$



Príklad 2 (Metropolisov algoritmus ako generátor náhodných čísel 2)**.** Program z prechádzajúcej úlohy pre druhé rozdelenie pravdepodobnosti. V prvom prípade je $N_1 = 100$, v druhom 1000, číslo pod obrázkom dáva N_2. Na ľavo pre porovnanie výsledok prvého programu pre rovnaké $N = N_2$.





Aké závery plynú z týchto obrázkov už nechám na vás.

Príklad 3 (Metropolis pre dvojhladinový systém)**.** Táto úloha je vyriešená napríklad v skriptách Vlada Černého.

Príklad 4 (■ Metropolis pre trojhladinový systém)**.** Príklad je vyriešený vo videu.

Grandkanonické rozdelenie

Príklad 5 (Chemický potenciál ideálneho plynu)**.** Kľúčové je si rozmyslieť, že z

$$dE = -pdV + TdS + \mu dN$$

vyplýva, že chemický potenciál je energia potrebná na dodanie jednej častice, ale za podmienky konštantnosti entropie. Tým, že do ideálneho plynu pridáme jednu časticu výrazne zvýšime množstvo spôsobov, ako môže byť táto energia medzi častice rozdelená. Ak chceme zachovať entropiu, musíme znížiť celkové množstvo energie. Výsledok dodania jednej častice pri konštantnej entropii je teda ubudnutie energie.

Príklad 6 (Príklad z prednášky)**.** Zopakujte odvodenie Langmuirovej adsorbčnej rovnice pre proteíny, na ktoré sa vedia zachytiť dve molekuly kyslíka. Koľko molekúl kyslíka na daný počet molekúl proteínu, bude vedieť takáto látka preniesť pri rovnakých podmienkach?

Ako by to vyzeralo pre proteín, na ktorý sa vie naviazať n kyslíkov?

Príklad 7 (Môj obľúbený príklad o grandkanonikcých súboroch)**.** Treba odvodiť vzťah pre chemický potenciál pre ideálny plyn v dvoch rozmeroch a potom jednoducho zobrať

$$\mu_S^{2D} = \mu_V^{3D} \ .$$

Tam si treba dať pozor na to, že v troch rozmeroch funguje trochu inak integrovanie cez všetky stavy, nakoľko objemový element v priestore hybností vyzerá inak.

Pri odvodení grandkanonického súboru sa predpokladá, že stav rezervoáru sa ubudnutím jednej častice príliš nezmení. Nič sa ale nepredpokladalo o veľkosti systému. V našej úlohe môže ako rezervoár fungovať objem škatule, ale aj stena na ktorej sú častice nalepené. Aspoň na jednom z týchto miest teda musí byť veľmi veľa častíc. To ale znamená, že stačí, aby N bolo veľmi veľké.

Príklad 8 (Začiatok viriálového rozvoja)**.** Kľúčové vzťahy sú

$$\begin{aligned} \frac{pV}{kT} &= \log \mathcal{Z} \ , \\ \frac{N}{V} &= \frac{z}{V} \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial z} \ , \end{aligned}$$

kde $z = e^{\mu\beta}$.

Prvý je dôsledkom funkcionálnej závislosť grandkanonického potenciálu $\Phi = -\beta \log \mathcal{Z}$. Z toho, že $S = k\frac{\partial T \log \mathcal{Z}}{\partial T}$ a $\langle E \rangle - \mu \langle N \rangle = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta}$ dostaneme $\Phi = F - \mu N$. Keďže N a F sú extenzívne veličiny a μ je intenzívna veličina, Φ je intenzívna veličina. Keďže jej prirozdené parametre sú V, μ, T, musí byť v tvare

$$\text{intenzívna veličina} \ \times \ V \ .$$

Z toho, ako vyzerá $d\Phi$ zistíme, že táto intenzívna veličina je $-p$.

Druhý je priamočiarym dôsledkom definície $\langle N \rangle$.