Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky

Príklady z cvičenia - návody a komentáre

cviko bolo 20.2.2024 *opakovanie štatistickej fyziky*

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

Príklad 1 (Čriepky z termodynamiky)**.** Tieto príklady sú celkom priamočiare. Viac menej viete, kam sa chcete dostať, odkiaľ máte začínať a tak sa snažíte žonglovať so vzťahmi, kým nedostanete to, čo máte. Ak sa vám to nedarí, v skriptách Vlada Černého to je spravené. Alebo v Tongovi. Alebo niekde inde, skúste pohľadať.

Príklad 2 (Čriepky z pravdepodobnosti)**.**

- Ako sme povedali na cvičení, tu netreba počítať tú konvolúciu pravdepodobností, výsledok pre $\langle x+y\rangle$ a $\left\langle (x+y)^2\right\rangle - \langle x+y\rangle^2$ sa dá podkladať z $\langle x\rangle, \langle y\rangle, \left\langle x^2\right\rangle, \left\langle y^2\right\rangle$ ak sú nezávislé.

- Nezabudnúť na jakobián a faktor r^2 v rozdelení pravdepodobnosti za to, že vo väčšej vzdialenosti od stredu je väčšia časť gule.

- ■ Odpoveď na prvú otázku sa dá získať dvojako. Buď ako

$$\frac{28}{32}\cdot\frac{27}{31}\cdot\ldots\cdot\frac{21}{25}\,,$$

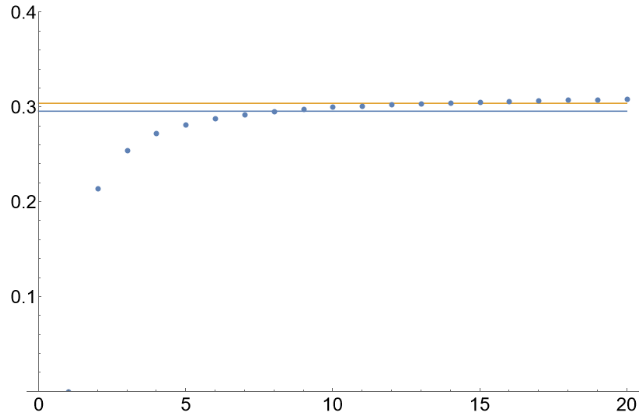
alebo ako podiel pozitívnych možností

$$\binom{28}{8}\cdot\binom{24}{8}\cdot\binom{16}{8}\cdot\binom{8}{8}$$

a všetkých možností

$$\binom{32}{8}\cdot\binom{24}{8}\cdot\binom{16}{8}\cdot\binom{8}{8}\,.$$

Takto vyzerá všeobecný prípad, na x-ovej osi počet kariet, ktoré dostane jeden človek, vyznačené pravdepodobnosti pre $n = 8, 13$.



Pre druhú, zložitejšiu, otázku je vhodnejší druhý prístup. Zaujímavé je, že obe pravdepodobnosti vyjdú podobne veľké.

- Pre každú časticu je pravdepodobnosť, že bude v nejakej inej časti priestoru ako tej našej $1-\frac{V}{N}$. Pravdepodobnosť, že daný kus priestoru zostane prázdny je teda toto číslo na N-tú. Pre makroskopický počet častíc je tento výsledok na nerozoznanie od $1/e$.

Príklad 3. [Kruhové deje]

a. Nič špeciálne, iba práca so stavovou rovnicou a rovnicou pre adiabatický dej.

b. Tlak, pri ktorom sa plyn rozpína musí byť vyšší ako tlak, pri ktorom plyn stláčame. Tak dostaneme $\oint p\,dV$ kladné, resp. ľudskou rečou plyn vykoná viac práce pri rozpínaní ako my na §om pri stláčaní a výsledkom je práca premenená na teplo.

c. Prvá veta termodynamická hovorí, že $dE = \delta Q + \delta W$. Pre ideálny plyn $dE = 3nRT/2$ a $\delta W = -pdV$. Podľa zmeny teploty a objemu sa dá rozmyslieť, či je δQ väčšie alebo menšie ako nula. Napríklad ak sa plyn rozpína jeho teplota rastie, určite musí prijímať teplo. Ak je jeho objem konštantný a teplota klesá, musí teplo odovzdávať.

d. Plyn koná prácu tam, kde sa rozpína.

e. Explicitné výpočty podľa spomínaného prvého termodynamického zákona. K tomu sa zíde vzťah pre zmenu entropie[1]

$$S_2 - S_1 = nR \log \frac{V_2}{V_2} + \frac{3}{2} nR \log \frac{T_2}{T_1} \ .$$

Ešte sa môže zísť, že pre izochorický/izobarický dej vieme $\Delta Q = c_{P,V} \Delta T$.

f. Účinnosť je vykonaná práca vydelená celkovým dodaným teplom. Takže si treba rozmyslieť kde plyn konal prácu, kde sme museli konať prácu nad plynom my a kde sme plynu dodávali teplo. Odovzdane teplo nás v tomto výpočte nezaujíma.

Príklad 4 (Maxwellovia Boltzmanovia)**.**

a. Maxwell-Boltzmanovo rozdelenie

$$\rho(x, v) = Ce^{\frac{1}{kT}\left(\frac{1}{2}mv^2 + V(x)\right)} \ ,$$

konštanta z toho, že $\int dvdx\, \rho(x, v) = 1$ a rozdelenie v x je $\rho(x) \int dv\, \rho(x, v)$.

b. Spočítať $\langle x \rangle$ a σ_x z prechádzajúceho rozdelenia.

c. $p = \int_I dx \rho(x)$

d. V limite malej teploty by výsledok mal byť rovnomerným rozdelením na x, kde je potenciál nulový (resp. minimálny) a v limite veľkých teplôt by malo byť rozdelenie rovnomerné na všetkých povolených hodnotách x. Rozmyslite si prečo a rozmyslite si, ako do toho vstupuje nekonečná hodnota potenciálu mimo povolených hraníc.

Príklad 5. Až na tretiu časť sú to všetko vcelku priamočiare výpočty podobné príkladu 3. Tretia časť je trochu problematickejšia. Vnútorné energie plynov budú na konci a na začiatku rovnaké, keďže teplota celej škatule bude po ustálení rovnaká a energia ideálneho plynu závisí iba od teploty. Teplo teda bude tiecť smerom z menšej časti do väčšej a bude rovné celkovej vykonanej práci väčšej časti plynu na menšej.

Táto práca ale závisí od konkrétnej realizácie toho procesu. Najjednoduchšou je izotermická, ktorá by predpokladala, že plyny menia objem dostatočne pomaly a prepážka je dostatočne tepelne vodivá. Čokoľvek komplikovanejšie si vyžaduje akísi iteratívny proces, kde sa plyny postupne dostávajú do rovnováhy.

Extrémnym príkladom je napríklad adiabatický prechod s dokonale nevodivou prepážkou. Keď sa dosiahne rovnováha, prepážku zafixujeme aby sa nemenil objem a necháme izochoricky pretiecť energiu až do dosiahnutia rovnakej teploty. Potom zas prepážku uvoľníme a plyny necháme adiabaticky vyrovnávať tlaky. A tak ďalej až kým nedosiahneme definitívnu rovnováhu.

Alebo môžeme plynom pomôcť zvonku a mechanicky presunúť prepážku do polohy s výslednou rovnováhou (zatiaľ sa budú adiabaticky stláčať/rozťahovať), potom prepážku zafixovať a nechať ich dosiahnuť teplotu T. Alebo niečo sofistikovanejšie s infinitizemálnymi krokmi.

Skúste si všetko toto nakresliť v pV diagrame pre jednu z častí nádoby a rozmyslieť, ako tie deje vyzerajú tam.

Príklad 6. V prvých dvoch častiach si treba spomenúť na mikrokanonické rozdelenie. V prvej si rozmyslieť, koľko existuje mikrostavov tých častíc, ktoré majú energiu 4Δ a v druhej spočítať strednú hodnotu cez súbor, v ktorom sú všetky tieto možnosti rovnako pravdepodobné.

V tretej časti si treba spomenúť na kanonický súbor. K dispozícií sú všetky možné konfigurácie častíc, ale každá s pravdepodobnosťou $p_i = e^{-E_i/kT}/Z$.

Príklad 7. ■

a. Pravdepodobnosť výskytu častice v danej energetickej hladine

$$p_i = \frac{e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_j e^{-\frac{E_i}{kT}}}.$$

Limitu $T \to 0$ prežije iba najnižšia energia a teda pri T_1 budú všetky častice v stave $k = 0$. Pri teplote T_2 sa zotrie rozdiel medzi

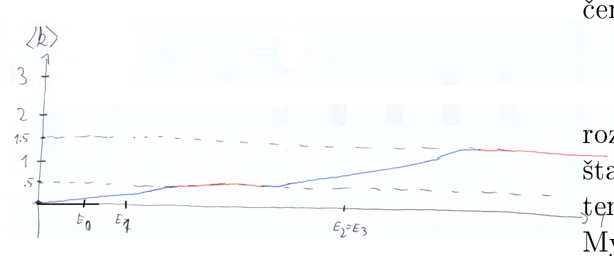
[1] Ktorý sa dá odvodiť z toho istého zákona a z $\delta Q = TdS$. Je dobré si pamätať, že výsledok je logaritmus pomerov.

energiami E_0 a E_1 a obe hladiny budú rovnako pravdepodobné, ale pravdepodobnosť nájsť častice v stavoch 2 a 3 bude nulová, takže $\langle E\rangle = (E_0 + E_1)/2$. Pre T_2 sú všetky stavy rovnako pravdepodobné a teda

$$\langle E\rangle = \frac{E_0 + E_1 + 2E_2}{4} \ .$$

Dá sa na to celé pozerať takto. Teplota T dovoľuje fluktuovať energií približne o kT, takže energetické rozdiely malé v porovnaní s touto hodnotou sú zanedbateľné, veľké naopak nedosiahnuteľné.

b.



c. Priamočiare výpočty v kanonickom rozdelení. Dostávame

$$Z = \left(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + 2e^{-\beta E_2}\right)^N$$

a potom z $\langle E\rangle = -d\log Z/d\beta$

$$\langle E\rangle = N\frac{E_0 e^{-\beta E_0} + E_1 e^{-\beta E_1} + 2E_2 e^{-\beta E_2}}{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + 2e^{-\beta E_2}}$$

a z $\langle k\rangle = \sum_{i=0}^{3} k_i \langle n_i\rangle /N$, kde $n_i = Np_i$ je stredný počet častíc s kvantovým číslom k_i,

$$\langle k\rangle = \frac{e^{-\beta E_1} + 5e^{-\beta E_2}}{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + 2e^{-\beta E_2}} \ .$$

Príklad 8. Až do poslednej časti tohto príkladu ide o priamočiare výpočty v kanonickom a grandkanonickom súbore. Posledná časť je ale dosť tricky. Môžu sa tu miešať označenia a nie je ľahké si rozmyslieť čo kam napísať. Naivne by sme chceli písať, tak ako pre strednú obsadenosť energetických hladín v kanonickom súbore, niečo ako (n_i je počet častíc v jednočasticovom stave i, N je celkový počet častíc v systéme)

$$\langle n_0\rangle \sim Np_0 = \dots$$

a máme problém, lebo nie je jasné čo písať za p_0. Pavlovovsky by sa tam hodilo niečo ako

$$\frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{E_i - \mu N_i}{kT}}$$

ale tu je i niečo úplne iné ako pri n_i. Takže čo ďalej?

Vrátime sa na úplný začiatok, k odvodeniu grandkanonického rozdelenia. Tam sa bral celkom systém+rezeroár ako mikrokanonický súbor. Nech má teda tento supersystém M častíc a nech N z nich je v našom systéme. Povie sa, že pravdepodobnosť I-teho stavu systému je úmerná počtu mikrostavov rezervoára, čo v štandardnom označení dá

$$p_I \sim \Omega_R(E - E_I, M - N_I) \ .$$

rozvojom Ω_R pre $E \gg E_I, M \gg N_I$ dostaneme štandardnú formulu s teplotou a chemickým potenciálom rezervoára ako patričné derivácie Ω_R. My ale potrebujeme vedieť, ako je N_I častíc rozdelených medzi jednočasticové stavy i.

Ideme na to postupne. Nech $N_I = 0$. Potom máme len jeden možný mikrostav systému s $E_I = 0$ a $n_0 = 0$. Ak máme v systému jednu časticu $N_I = 1$, potom už máme viac možností. Energetické možnosti sú $E_I = 0, \Delta, 2\Delta$. Problém ale je, že pre rozlíšiteľné častice závisí na tom, ktorá častica z rezervára prišla a každý jeden z mikrostavov (ktorých je 6) zodpovedá vlastne M mikrostavom podľa toho, o ktorú časticu ide. Také niečo nemá rozumnú limitu $M \to \infty$ a nie je dobre definovaný. Poučenie teda je, že grandkanonické rozdelenie je dobre definované iba pre nerozlíšiteľné častice[2]. Pre nerozlíšiteľné častice je to teraz variácia na neskoršie príklady tejto sady, kde pre rôzne hodnoty N_I vypisujem všetky možné mikrostavy, pozerám sa na ich energie, píšem pravdepodobnosti p_I a nakoniec chcem spočítať stretnú hodnotu

$$\langle n_0\rangle = \sum_{N_I=0}^{\infty} \sum_{E_I, N=N_I} n_0 \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{E_I - \mu N_I}{kT}} \ .$$

Nemám rozmyslené, či a ako sa to dá urobiť systematicky úplne dokonca. Rád si vypočujem riešenie od kohokoľvek, kto si to rozmyslí skôr ako ja :)

[2]Tu to ešte nemám dokonale domyslené, či sa nedajú nejak rozumne definovať veličiny "na jednu časticu"vydelením počtom častíc M, čo by malo šancu čosi rozumné dávať. Dajte mi prosím vedieť, ak k tomu máte čo povedať.

Všimnite si, že to je niečo podobné ako pri počítaní grandkanonickej partičnej sumy

$$\mathcal{Z} = \sum_I e^{-\frac{E_I - \mu N_I}{kT}}$$

a jej prepísaní skrz

$$\sum_I \to \sum_{N_I=0}^{\infty} \sum_{j,N=N_I} e^{-\frac{E_j}{kT}} e^{-\frac{\mu N_I}{kT}}$$

kde teraz j čísluje stavy systému, ktoré majú zafixovaný počet častíc $N = N_I$.

Príklad 9. Opäť priamočiare výpočty v kanonickom súbore s tým, že stredná obsadenosť energetickej hladiny je opäť Np_i.

Príklad 10. Tri nasledujúce príklady majú rovnakú logiku. Máme dané rôzne možnosti, kde sa častice/pešiaci môžu nachádzať a máme dané pravidlá, podľa ktorých sa tieto možnosti obsadzujú. Potrebujeme nájsť všetky možnosti usporiadania podľa týchto pravidiel, patrične ich ováhovať faktormi $e^{-E/kT}$ a možno spočítať nejakú strednú hodnotu v rozdelení týchto možností s patričnými pravdepodobnosťami. Vo všetkých prípadoch je najdôležitejšie vymyslieť si systém, podľa ktorého nájdeme všetky možnosti, na žiadnu nezabudneme ale žiadnu nezarátame viac krát. Dobré je napríklad vedieť skontrolovať, ak sa dá, koľko malo byť dohromady všetkých možností a overiť, že ich máme vypísaných toľko a nie viac alebo menej.

Konkrétne v tretej časti tejto úlohy ešte treba nejak systematicky ubrať energiu konfiguráciám, v ktorých sú pešiaci tej istej farby blízko pri sebe. Napríklad ubrať energiu ε mikrostavom, v ktorých sú pešiaci rovnakej farby na políčkach, ktoré majú spoločný vrchol. A možno ešte pridať energiu ε mikrostavom, v ktorých sú v opačných rohoch šachovnice. Prípadne rôzne hodnoty pre rôznu farbu pešiakov.

Príklad 11 (Štatistika 1)**.**

Príklad 12 (■ Štatistika 2)**.**

Tieto dva príklady boli v písomkách ako bonusové.

Príklad 13. Tento príklad bude na domácu úlohu.

Príklad 14. Idea príkladu je nechať zbehnúť Carnotov stroj infinitizemálny počet krát. Teplo, ktoré pri tom odoberieme teplejšiemu telesu je $\delta Q_+ = C_1 dT_+$ a teplo ktoré dodáme chladnejšiemu telesu je $\delta Q_- = C_2 dT_-$. Teraz zavoláme na pomoc vzťah pre účinnosť Carnotovho stroja

$$\eta = 1 - \frac{T_-}{T_+} = 1 - \frac{|\delta Q_-|}{\delta Q_+} \; .$$

Z toho dostaneme separovateľnú diferenciálnu rovnicu pre teploty $T_\pm$, ktorú vyriešime a hľadáme kedy $T_+ = T_-$ a stroj zastane. Výsledok by mal byť geometrický priemer počiatočných teplôt chladiča a ohrievača.

Prácu dostaneme ako súčet (resp. integrál) malých prác $\delta W = \delta Q_+ - |\delta_Q|$ a celkovú účinnosť ako podiel vykonanej práce a tepla, ktoré stratilo teplejšie teleso.