Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 18.4.2023 *grandkanonické rozdelenie, klasická štatistická fyzika*

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

Grandkanonické rozdelenie

Príklad 1 (Chemický potenciál ideélneho plynu). Na prednáške sa objavil vzorec pre chemický potenciál ideálneho plynu. Rozmyslite si, že je záporný. Ako táto vec korešponduje sa tvrdením, že chemický potenciál je energia potrebná na pridanie jednej častice do systému?

Príklad 2 (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 3 (■ Môj obľúbený príklad o grandkanonikcých súboroch). Majme ideálny plyn N častíc v kockatej škatuli s hranou a. Častice sa však môžu za cenu energie ε nalepiť na jednu zo stien nádoby a tam si žiť ako plyn v dvoch rozmeroch. Koľko častíc je nalepených na stenu, ak je škatula pri teplote T?

Návod. Popisujte systém grandkanonickým súborom, ale dobre si rozmyslite, za akých okolností je tento prístup rozumný.

Príklad 4 (Začiatok viriálového rozvoja). Ak si spomínate na príklad o Viriálovom rozvoji, jeho riešenie začínalo slovami "z grandkanonického súboru vypočítame $p/kT = \ldots$ a $N/V = \ldots$, kde pravé strany závisa od chemického potenciálu μ". Tento príklad od vás chce, aby ste to ozaj spravili.

Klasická štatistická fyzika

Príklad 5 (Gibbsov paradox revisited). Pripomeňte si, čo presne robí faktor $1/N!$ v zápise ako napríklad $Z_N = Z_1^N/N!$ a prečo zodpovedá nerozlíšiteľnosti častíc. Rozmyslite si, že to ale platí iba v limite veľmi veľkého počtu častíc.

Môže pomôcť vypočítať Z_N v jednoduchých systémoch pre nejaké malé N. Napríklad zoberte dvojhladinový systém s energiami 0 a E. Z_2 pre rozlíšiteľné častice je triviálne $(1 + e^{-\beta E})^2$, dá sa aké dopočítať aj explicitným sumovaním cez mikrostavy dvojčasticového systému. Pre nerozlíšiteľné častice už jednoduchá cesta nie je, treba zapísať všetky mikrostavy a počítať $\sum_n e^{-\beta E_n}$. Ukážte, že v tomto prípade $Z_2 \neq Z_1^2/2!$.

Skúste vypisovať povolené mikrostavy pre $N = 3, 4, \ldots$ v prípade rozlíšiteľných a nerozlíšiteľných častíc a na základe toho si rozmyslite, že v limite $N \to \infty$ už ale faktor $N!$ bude ozaj robiť to, čo má. A teda eliminovať zo sumy tie mikrostavy, ktoré sú rôzne pre rozlíšiteľné častice, ale identický mikrostav pre nerozlíšiteľné častice.

Príklad 6 (■ Viriálový rozvoj). V skriptách Vlada Černého a/alebo Davida Tonga si pozrite odvodenie van der Waalsovej rovnice. Rozmyslite si, že je to príkladom viriálového rozvoja, ktorý je rozvojom stavovej rovnice do hustoty častíc

$$\frac{p}{kT} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n(T) \left(\frac{N}{V}\right)^n \ . \qquad (1)$$

Čomu sa rovná prvý viriálový koeficient?

Príklad 7 (Druhý viriálový koeficient 1). Rozmyslite si, že pri odvodení sme dokázali, že

$$B_2(T) = -\frac{1}{2V} \int f_{12} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \ , \qquad (2)$$

kde $f(r)$ je Mayerova f funkcia daná ako

$$f_{ij} = f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \ , \ f(r) = e^{-\beta V(r)} - 1 \qquad (3)$$

a $V(r)$ je dvojčasticový potenciál. Pre akú asymptotiku $V \sim r^n$ ked $r \to \infty$ je tento koeficient konečný?

Príklad 8 (■ Nečakaný faktor 2 pre biliardové gule)**.** Majme interakčný potenciál v tvare

$$V(R) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} . \tag{4}$$

a. Rozmyslite si, o akú interakciu ide.

b. Ukážte, že v takom prípade $B_2 = 2\pi\sigma^3/3$.

c. Rozmyslite si, že to je o faktor 2 inak, ako by ste čakali.

Príklad 9 (■ Druhý viriálový koeficient 2)**.** Majme interakčný potenciál v tvare

$$V(R) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ -V_0 & \sigma < r < 2\sigma \\ 0 & r > 2\sigma \end{cases} . \tag{5}$$

a. Rozmyslite si, o akú interakciu ide.

b. Vypočítajte B_2 pre takýto potenciál.

c. Ako vyzerá B_2 pre vysoké teploty?

Príklad 10 (Tretí viriálový koeficient)**.** Nájdite tretí viriálový koeficient pre potenciál (4) a pre potenciál (5). Pre koeficient B_3 sa dá ukázať

$$B_3(T) = -\frac{1}{3V} \int f_{12} f_{13} f_{23} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \ . \tag{6}$$

Príklad 11 (Viriálny Mayerov vzťah)**.** Nájdite viriálový rozvoj rozdielu tepelných kapacít $C_p - C_V$.