

Fizyka Statystyczna A

semestr zimowy 2017-18

Krzysztof Byczuk

Institut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki, UW
byczuk@fuw.edu.pl
www.fuw.edu.pl/byczuk
18-01-2018

Ćwiczenia: prof. J. Pawełczyk, dr hab. P. Jakubczyk,
mgr K. Chabuda, mgr S. Sołtan, mgr D. Zdulski

Warunki zaliczenia

1. Obecność i aktywność na ćwiczeniach - 10p.
2. Kolokwium 27/11/2017, 9:00-13:00 (sala 1.02, 1.40) - 30p.
3. Kolokwium dodatkowe (dla osób mających usprawiedliwioną nieobecność na pierwszym kolokwium) 04/12/17, 9:00-13:00 (sala 2.03) - 30p.
4. Egzamin pisemny 05/02/2018, 9:00-13:00 (sala 0.06) - 30p. (wyniki z aktywności, kolokwium i egzaminu pisemnego normujemy do 100)
5. Egzamin ustny 07-09/02/2018, 9:00-15:00 (sala 5.12), możliwość poprawy oceny w pierwszym terminie
6. Egzamin pisemny poprawkowy 19/02/2018, 9:00-13:00 (sala 0.06) (wynik z tej części normujemy do 100)
7. Egzamin ustny poprawkowy 21-22/02/2018, 9:00-14:00 (sala 5.12), możliwość poprawy oceny w drugim terminie

Wypadkowa ocena z tej części:

- 5+ za 99-100p.,
- 5 za 90-98p.,
- 4+ za 81-89p.,
- 4 za 72-80p.,
- 3+ za 62-71.,
- 3 za 50-61p.,
- 2 za 0-49p.

1 Tydzień I, 2-8/10/2017

1.1 Wykład

I. Zasady fizyki statystycznej; Zespół mikrokanoniczny: &1. *Wprowadzenie zasad fizyki statystycznej* - cel badań, układy wielu cząstek, ogromna liczba cząstek w układzie, definicja ilości materii w układzie SI 2018, liczba Avogadro $N_A = 6,022140857 \cdot 10^{23} \text{mol}^{-1}$, dyskretne poziomy energii w układach kwantowych, wykładniczo mała odległość między poziomami energii w układach wielu cząstek $\Delta E \sim e^{-N}$, jakiegokolwiek oddziaływania z otoczeniem powodują przejścia między bliskimi poziomami energii, fluktuacje energii całkowitej w czasie, opis mikroskopowy klasyczny (położenia i pędy N -cząstek zależne od czasu) i kwantowy (funkcja falowa od czasu i N zmiennych), trudności w analizie takiego mikroskopowego opisu, opis makroskopowy lub termodynamiczny za pomocą małej liczby parametrów (ciśnienie, objętość, temperatura, etc.), zadanie fizyki statystycznej to znajdowanie związku między opisem mikroskopowym i makroskopowym, definicja mikrostanu (opis mikroskopowy) i makrostanu (opis termodynamiczny), przykład: układ $N = 3$ spinów $1/2$, mikrostan i makrostan. &2. *Podstawowy postulat fizyki statystycznej* - postulat: wszystkie dostępne mikrostan, realizujące dany makrostan są jednakowo prawdopodobne dla układów w równowadze termodynamicznej, intuicyjne uzasadnienie tego postulatu, koncepcja zespołu statystycznego jako wielu kopii tego samego układu, usrednianie po zespole statystycznym. &3. *Obliczanie prawdopodobieństw różnych makrostanów* - p_i prawdopodobieństwo makrostanu, które odpowiada zmiennej (losowej) y_i , $p_i = \Omega_i/\Omega$, gdzie Ω_i liczba mikrostanów realizująca dany makrostan, $\Omega = \sum_i \Omega_i$ liczba wszystkich mikrostanów, średnia $\langle y \rangle$ i wyższe momenty $\langle y^n \rangle$,

1.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Całki gaussowskie* - Obliczyć całkę $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx$ obliczając jej kwadrat i przechodząc do biegunowego układu współrzędnych. Różniczkując po parametrze α obliczyć całkę $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx$.

2. *Funkcja gamma* - Uogólnione całki gaussowskie postaci $I_m = 2 \int_0^{+\infty} x^m e^{-x^2} dx$, z $m > -1$, zapisać w postaci funkcji gamma $\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} y^{z-1} e^{-y} dy$. Pokazać związek rekurencyjny $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$. Obliczyć $\Gamma(1/2)$, $\Gamma(l+1/2)$, $\Gamma(1)$, i $\Gamma(l+1)$, dla $l = 1, 2, 3, \dots$

3. *Kula w n-wymiarach* - Obliczyć objętość i powierzchnię n -wymiarowej kuli o promieniu r . Wynik wyrazić za pomocą funkcji gamma (uogólnionej silni).

4. *Przybliżenie Stirlinga* - Pokazać, że dla $n \gg 1$ zachodzi $n! \approx \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n+1/12n+O(1/n^2)}$. Zapisać to przybliżenie dla $\ln n!$. Omówić rolę wyrazów wiodących i poprawek $1/n$ oraz porównać z asymptotycznym zachowaniem funkcji gamma.

5. *Rachunek prawdopodobieństwa* - Rzucamy dwiema szesciennymi kostkami do gry. Ile wynosi prawdopodobieństwo, że suma wyrzuconych oczek wynosi szesć. Ile wynosi średnia z sumy wyrzuconych oczek i wariancja. Podać rozkład prawdopodobieństwa. (Na przykładzie

tym przypomniemy: przestrzeń probabilistyczną, definicję częstościową prawdopodobieństwa, definicję aksjomatyczną, oraz interpretację prawdopodobieństwa, zmienną losową, rozkład prawdopodobieństwa zmiennej losowej, momenty zmiennej losowej, rozkłady prawdopodobieństwa wielu zmiennych losowych, rozkład prawdopodobieństwa od sumy zmiennych losowych, i inne podstawowe koncepcje rachunku prawdopodobieństwa).

1.3 Zadania domowe

(Powtórka ze szkoły)

1. Ile wynosi prawdopodobieństwo wyrzucenia łącznie sześciu lub mniej punktów za pomocą trzech uczciwych kostek do gry?

2. Rzucamy pięcioma uczciwymi kostkami. Ile wynosi prawdopodobieństwo wyrzucenia 6-tki: a) tylko jedna kostka, b) przynajmniej jedna kostka, c) tylko dwiema kostkami?

3. Wybieramy przypadkowo liczbę między 0 i 1. Ile wynosi prawdopodobieństwo, że dokładnie 5 spośród pierwszych dziesięciu cyfr po przecinku będzie ze zbioru cyfr mniejszych od 5?

4. Oblicz gęstość sześćofluorku wolframu (WF_6) w temperaturze 300K i pod ciśnieniem 1000 hPa. Masy atomowe wolframu 183,84u i fluoru 19u. Gdzie ten gaz znajduje zastosowanie?

2 Tydzień II, 9-15/10/2017

2.1 Wykład

Obliczanie prawdopodobieństw w fizyce statystycznej na podstawie postulatu równych prawdopodobieństw a priori, definicje średniej, momentów, wariancji, rozkładów prawdopodobieństwa dla zmiennych losowych dyskretnych i ciągłych, normalizacja $d_{3N} X d_{3N} P / h^{3N} N!$, definicja zespolu mikrokanonicznego, definicja liczby stanów $\Omega(U, V, N)$ dla układu o energii U , objętości V i liczbie cząstek N , definicja całkowitej liczby stanów $\Gamma(U, V, N)$ o energiach od 0 do U , związek pomiędzy Ω i Γ , definicja gęstości stanów $\rho(U, V, N)$, $\Omega(U) = \Gamma(U + \delta U) - \Gamma(U) = d\Gamma(U)/dU \delta U = \rho(U) \delta U$. &4. *Podukłady w równowadze termodynamicznej* - definicja oddziałujących termicznie podukładów, liczba stanów układu, maksymalizacja prawdopodobieństwa, definicja entropii $S(U, V, N) = k_B \ln \Omega(U, V, N)$, warunek równowagi - maksimum prawdopodobieństwa, definicja temperatury $1/T = (\partial k_B \ln \Omega(U, V, N) / \partial U)_{V, N} = (\partial S(U, V, N) / \partial U)_{V, N}$, stała Boltzmanna $k_B = 1,38064852 \times 10^{-23} \text{ J/K}$, prawo wzrostu entropii i dążenie układu do stanu najbardziej prawdopodobnego, zerowa i druga zasada termodynamiki jako postulaty opisujące najbardziej prawdopodobne zachowanie się układu makroskopowego, typowe procesy zwiększające entropię (dodanie energii, dodanie cząstek, zmiana objętości, rozpad cząstek, związanie się cząstek, etc.), przykład: klasyczny gaz doskonały -

wyznaczenie Ω , Γ , T oraz $U = 3/2nRT$. Wzory: objętość kuli n -wymiarowej $V_N(R) = R^n \pi^{n/2} / \Gamma(n/2 + 1)$, pole powierzchni kuli n -wymiarowej $S_n(R) = dV_n(R)/dR = R^{n-1} n \pi^{n/2} / \Gamma(n/2 + 1)$, gdzie $\Gamma(\alpha + 1) = \alpha \Gamma(\alpha) = \alpha!$, wzór Stirlinga $n! \approx n^n e^{-n}$.

2.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Gaz w pudle z dziurawą przegrodą* - Rozpatrujemy N kulek, które mogą być albo w prawej albo w lewej części pudła. Dla $N = 4$ wypisać wszystkie mikrostanu. Jeśli makrostan określony jest całkowitą liczbą kul w jednej z części, znaleźć jakie są możliwe makrostany, podać liczbę mikrostanów realizujących dany makrostan, znaleźć liczbę wszystkich mikrostanów i podać prawdopodobieństwo wystąpienia każdego makrostanu. Znaleźć możliwe makrostany i ich wagi dla $N = 10$. Jakie makrostany są najbardziej prawdopodobne? Jeśli przyjmujemy, że układ zmienia swój mikrostan co sekundę to jak długo należy oczekiwać, że wszystkie kulki będą w lewej połowie dla $N = 10, 40, 10^{23}$?

2. *Model - układ dwupoziomowy* - Wprowadzić N -cząsteczkowy model dwupoziomowy, podać jego interpretację (spiny 1/2, polaryzacja światła i fotony, poziomy w atomie), pokazać przykłady mikrostanów i makrostanów dla małych $N = 2, 3, 4$ i odpowiednie zmienne je opisujące (całkowita liczba cząstek N i "magnetyzacja" $M = N_+ - N_-$, gdzie N_i jest liczbą cząstek w danym stanie), wyznaczyć liczbę mikrostanów dla zadanego makrostanu dla dowolnych N i M ($\Omega(N, M) = N! / ((N + M)/2)! ((N - M)/2)!$), wyznaczyć całkowitą liczbę stanów $\Omega(N) = \sum_M \Omega(N, M)$, w granicy dużej liczby cząstek $N \gg 1$ pokazać, że liczba stanów $\Omega(N, M) = \Omega(N, 0) e^{-M^2/2N}$ jest rozkładem Gaussa, wyznaczyć $\Omega(N, 0) \approx \sqrt{2/\pi N} 2^N$ i oszacować jej wartość dla $N = 100$. Wyciągnąć wnioski o najbardziej prawdopodobnych makrostanach.

3. *Rozkład cząsteczek gazu w naczyniu* - Zbadać model składający się z N identycznych i rozróżnialnych cząsteczek obsadzających k komórek (model dyskretnej przestrzeni, np. kratki na płaszczyźnie). Mikrostanu są określone przez sposób rozkładu cząstek, makrostany przez podanie n_i liczby cząstek w danej komórce. Wyprowadzić wzór na liczbę mikrostanów realizujących dany makrostan $\Omega(n_1, n_2, \dots, n_k) = N! / n_1! n_2! \dots n_k!$. Przy ustalonej $N = \sum_i n_i$ pokazać, że najbardziej prawdopodobny rozkład cząsteczek w komórkach odpowiada rozkładowi równomiernemu z $n_i = N/k$ dla każdego i .

4. *Typowy czas przejścia do nowego mikrostanu* - a) Klasycznie - Średnia droga swobodna (długość drogi między zderzeniami) w jednym molu H_2 w ciśnieniu atmosferycznym i temperaturze 300K wynosi $l = 2,7 \cdot 10^{-7} \text{ m}$, a średnia prędkość cząsteczek wynosi $v = 500 \text{ m/s}$. Oszacować liczbę zderzeń w czasie 1s. Liczba ta odpowiada jak często układ przechodzi z jednego do drugiego mikrostanu.

Odp. tempo zderzeń (collision rate) $1/\tau = v/l = 2 \cdot 10^9 \text{ 1/s}$, w molu mamy $6,02 \cdot 10^{23}$ cząsteczek więc znajdujemy liczbę zderzeń $12 \cdot 10^{32}$ na sekundę.

b) Kwantowo - Rozpatrujemy dwa spiny $s = 1/2$ w stanie $|+ - \rangle$ i włączamy bardzo słabe oddziaływanie

Heisenberga $H' = JS_1^+ S_2^- + h.c.$, $J = 0,00014\text{eV}$. Oszacować czas po którym układ przejdzie do $|-\rangle$. Później rozpatrujemy układ $N = 10^{23}$ spinów w makro stanie z $S_{tot} = 0$. Oszacować co jaki czas układ przechodzi z jednego mikrostanu do drugiego mikrostanu realizujące makrostan $S_{tot} = 0$.

2.3 Zadania domowe

1. Powietrze w pokoju o wymiarach $3\text{m} \times 3\text{m} \times 3\text{m}$ znajduje się w warunkach normalnych (ciśnienie atmosferyczne, $T=300\text{K}$). Oszacować prawdopodobieństwa, że w dowolnej chwili w objętości a) 1cm^3 , b) 1Å^3 (angstrom) gdziekolwiek w pokoju nie ma powietrza w wyniku statystycznej fluktuacji.

odp. Prawdopodobieństwo $p \sim \exp(-N(v/V))$, gdzie N -liczba cząstek, V -objętość pokoju, v -objętość badanego obszaru.

2. N prętów o długości a jest połączonych koniec jednego z początkiem następnego, a pierwszy i N ty są zaczepione o równoległe ściany odległe o l , gdzie $l < Na$. Znaleźć liczbę Ω możliwych mikrostanów. Oszacować $\ln \Omega$ w granicy dużych N . Wsk. pręty są nieskonczenie cienkie i ustawione równoległe do siebie, jeśli N_{\pm} jest liczbą prętów skierowanych w prawo / w lewo to musi zachodzić $l = |N_+ - N_-|a$, liczbę kombinacji znajdziemy tak samo jak w przypadku spinów.

3 Tydzień III, 16-22/10/2017

3.1 Wykład

II. Zespół kanoniczny: &1. *Definicja zespołu kanonicznego* - układ izolowany (wrunki zespołu mikrokanonicznego) z wyodrębnionym podukładem S , między podukładem S i pozostałą częścią R (rezewuar) może być wymieniana energia, układ R jest dużo większy od S , ale S też jest makroskopowe. &2. *Rozkład Boltzmann* - wyprowadzenie wzoru na gęstość prawdopodobieństwa znalezienia układu S w stanie o energii ϵ , $p(\epsilon) = e^{-\beta\epsilon}/Z$, $\beta = 1/k_B T$. &3. *Suma statystyczna* - określenie czynnika normalizacyjnego Z , jest to suma statystyczna lub funkcja podziału (partition function), wyprowadzenie wzoru na energię wewnętrzną $U(T, V, N) = k_B T^2 (\partial \ln Z(T, V, N) / \partial T)_{V, N}$, wzoru na wariancję energii $\sigma_U^2 = k_B T^2 C_V$, gdzie ciepło właściwe (pojemność cieplna) $C_x = (\delta Q / dT)_x$. &4. *Ciśnienie* - mikroskopowe zdefiniowanie ciśnienia i wyprowadzenie wzoru $p = -(\partial U / \partial T)_{T, N}$ oraz na podstawie tego wzoru $p = T(\partial S / \partial V)_{U, N}$ znanego z zespołu mikrokanonicznego.

3.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Zespół mikrokanoniczny - warunki równowagi termodynamicznej podukładów* - Układ o ustalonej energii U , objętości V i liczbie cząstek N (zespół mikrokanoniczny) jest podzielony przegrodą pozwalającą na zmianę energii, objętości i liczby cząstek w podukładach, t.j. $U_i, V_i, N_i, i = 1, 2$, są zmiennymi losowymi ale $U_1 + U_2 = U, V_1 + V_2 = V$ i $N_1 + N_2 = N$

są ustalone. Niech $\Omega_i(U_i, V_i, N_i)$ są liczbą mikrostanów odpowiadających danemu makrostanowi. Wyznaczyć całkowitą liczbę mikrostanów dla danego makrostanu całego układu. Z zasady maksymalizacji prawdopodobieństwa znaleźć warunki równowagi termodynamicznej dla tych podukładów. Wsk. należy wprowadzić entropię $S = k_B \ln \Omega$ oraz temperaturę $1/T = (\partial S / \partial U)_{V, N}$, ciśnienie $p/T = (\partial S / \partial V)_{U, N}$ i potencjał chemiczny $-\mu/T = (\partial S / \partial N)_{U, V}$.

2. *Jednocząstkowa gęstość stanów* - Definiujemy jednocząstkową gęstość stanów (density of states, DOS) $\rho(\epsilon) = (1/V) \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$, gdzie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ jest relacją dyspersji, a \mathbf{k} jest d -wymiarowym wektorem falowym. W granicy termodynamicznej wyznaczyć DOS dla cząstki swobodnej z relacją dyspersji $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, gdzie \mathbf{k} jest skwantowane zgodnie z warunkami brzegowymi w d -wymiarowym hipersześcianie o objętości V . Przedyskutować przypadki $d = 1, 2$ i 3 . Wyznaczyć stosunek m/\hbar^2 dla argonu o masie molowej $M = 39,9 \text{ g/mol}$ i stałej Plancka $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$. Wsk. $\delta(f(x)) = \sum_{x_0} \delta(x - x_0) / |f'(x_0)|$, gdzie $f(x_0) = 0$.

3. *Liczba stanów dla klasycznego gazu doskonałego w zespole mikrokanonicznym* - Dla klasycznego gazu doskonałego w $d = 3$ wymiarach wyznaczyć funkcje $\Omega(U, V, N)$ i $\Gamma(U, V, N)$. Znaleźć ich rozwinięcie dla dużej liczby cząstek. Wsk. $\Gamma(U, V, N) = \int d_{3N} x d_{3N} p / (h^{3N} N!) \Theta(U - \sum_{i=1}^N p_i^2 / 2m)$, skorzystać ze wzoru Stirlinga $n! = n^n e^{-n}$.

4. *Termodynamika klasycznego gazu doskonałego w zespole mikrokanonicznego* - Korzystając z wyników poprzedniego zadania znaleźć temperaturę, ciśnienie i potencjał chemiczny klasycznego gazu doskonałego. Pokazać zastosowanie twierdzenia o ekwipartycji energii oraz równanie stanu gazu doskonałego.

5. *Współrzędne uogólnione i liczba stopni swobody* - Przypomnienie współrzędnych uogólnionych i liczby stopni swobody z przykładami (np. kilka zadań domowych).

(Zadania 5 można przenieść na następny tydzień jeśli będzie brakowało czasu.)

3.3 Zadania domowe

1. *Jednocząstkowa gęstość stanów* - Definiujemy jednocząstkową gęstość stanów (density of states, DOS) $\rho(\epsilon) = (1/V) \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})$, gdzie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ jest relacją dyspersji, a \mathbf{k} jest d -wymiarowym wektorem falowym. W granicy termodynamicznej wyznaczyć DOS dla cząstki z relacją dyspersji $\epsilon_{\mathbf{k}} = c\hbar k$, gdzie \mathbf{k} jest skwantowane zgodnie z warunkami brzegowymi w d -wymiarowym hipersześcianie o objętości V , a c jest stałą o wymiarze prędkości. Przedyskutować przypadki $d = 1, 2$ i 3 . Wsk. $\delta(f(x)) = \sum_{x_0} \delta(x - x_0) / |f'(x_0)|$, gdzie $f(x_0) = 0$.

2. Obliczyć liczbę stanów energetycznych $\Gamma(U)$ pojedynczej cząsteczki zamkniętej w trójwymiarowym pudle o równych długościach boków. Zbadać przypadki klasyczny i kwantowy. To samo powtórzyć dla oscylatora harmonicznego w trzech wymiarach.

3. Określ liczbę stopni swobody i podaj współrzędne

uogólnione dla: a) koralik na obwodzie nieruchomego koła; b) koralik na nieruchomej linii śrubowej o stałym skoku i promieniu; c) cząsteczka na powierzchni nieruchomego walca prostego; d) nożyce na nieruchomej płaszczyźnie; e) sztywne pręt w $d=3$; f) sztywne krzyż w $d=3$; g) prostoliniowa sprężyna w $d=3$; h) dowolne ciało sztywne z jednym punktem unieruchomionym; i) atom wodoru; j) atom litu; k) wahadło podwójne; l) klasyczny gaz złożony z 10^{23} cząstek punktowych.

4. Układ zawiera $N = 6$ cząstek. Niech całkowita energia jest stała i wynosi $U = 6E$. Podział energii układu między cząstki jest dowolny, jednak energia każdej cząstki jest skwantowana i może wynosić $0, E, 2E, 3E, 4E, 5E, 6E$. Znajdź prawdopodobieństwa różnych makrostanów oraz prawdopodobieństwa obsadzenia poszczególnych poziomów energetycznych (za Wroblewski i Zakrzewski, Wstęp do fizyki, str. 629-630).

5. Znajdź ruch cząstki w przestrzeni fazowej (x, p) dla a) oscylatora harmonicznego, b) swobodnego spadku, c) cząstki w nieskończonym pudle potencjału. W przestrzeni rzeczywistej ruch jest jednowymiarowy.

4 Tydzień IV, 22-28/10/2017

4.1 Wykład

&5. *Ciepło, praca i pierwsza zasada termodynamiki* - sformułowanie pierwszej zasady termodynamiki $dU = \delta W + \delta Q$, ciepło i praca, wyrażenia na pracę i ciepło w procesach odwracalnych, mikroskopowa interpretacja pracy $\delta W = \sum_s (-d\epsilon_s(V)/dV)p(\epsilon_s)dV = -pdV$ i ciepła $\delta Q = \sum_s \epsilon_s dp(\epsilon_s) = TdS$, model cząstek w nieskończonej studni i ilustracja wykonanej pracy i pobranego ciepła, definicja entropii wg. Gibbsa-Shannona $S = -k_B \sum_s p_s \ln p_s$, wyprowadzenie wzoru $TdS = \sum_s \epsilon_s dp_s$; &6. *Energia swobodna Helmholtza* - definicja energii swobodnej Helmholtza $F(T, V, N) = U - TS$, procesy izotermiczne i minimalizacja energii swobodnej, wyrażenia na ciśnienie i entropię za pomocą energii swobodnej, interpretacja energii swobodnej, dostępna praca w procesach izotermicznych, związek energii swobodnej z sumą statystyczną $F = -k_B \ln Z$; &7. *Gaz doskonały - przykład* - definicja modelu gazu doskonałego, suma statystyczna dla pojedynczego atomu, kwantowa koncentracja, długość fali termicznej de Broglie'a, energia wewnętrzna pojedynczego atomu, uogólnienie na przypadek N atomów, cząstki rozróżnialne i nierozróżnialne w sensie mikroskopowym (kwantowym) i operacyjnym (klasycznym), wzór na sumę statystyczną $Z = (V/\lambda_{dB}^3)^N/N!$, energia wewnętrzna $U = nRT$, równanie stanu Clapeyrona $pV = nRT$, stała gazowa,

4.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Spiny w polu magnetycznym w zespole mikrokanonicznym* Dla układu N spinów $1/2$ oddziałujących z zewnętrznym polem magnetycznym B w ramach zespole mikrokanonicznego znaleźć: entropię, energię wewnętrzną, temperaturę, magnetyzację, podatność magnetyczną, ciepło właściwe, oraz przedyskutować wy-

niki. Omówić problem ujemnych temperatur (wrócimy też do tego też później omawiając rozkład Boltzmana dla spinów).

2. *Klasyczny gaz doskonały w zespole kanonicznym* Wyprowadzić wzór na sumę statystyczną dla klasycznego gazu doskonałego. Przedstawić dwa podejścia (od strony kwantowej, cząstki w pudle, i od strony klasycznej, przestrzeń fazowa) i je porównać. Zwrócić uwagę na czynnik h . Czynnik $N!$ wyraża nierozróżnialność cząstek w sensie operacyjnym (do statystyk kwantowych dojdziemy później).

3. *Termodynamika klasycznego gazu doskonałego w zespole kanonicznym* W ramach zespole kanonicznego wyprowadzić wzory na: energię wewnętrzną, entropię, energię swobodną, ciśnienie dla klasycznego gazu doskonałego. Ze wzoru Sackura-Tetrode na entropię $S(T, V, N)$ poprzez zamianę zmiennych $T \rightarrow U$ znaleźć wzór na $S(U, V, N)$ z zespole mikrokanonicznego.

4.3 Zadania domowe

1. Rozważyć zbiór N oscylatorów harmonicznym o częstościach ω_0 . Energia układu wynosi U (zespole mikrokanoniczny). Znajdź $\Omega(U, N)$, entropię $S(U, N)$ i temperaturę układu $T(U, N)$. Zastanowić się w jaki sposób zdefiniować granicę termodynamiczną dla tego układu (nie mamy objętości V).

2. 10g miedzi o temperaturze 350K jest w kontakcie z taka sama próbka miedzi o temperaturze 290K. Jaka jest końcowa temperatura układu po dojsciu całego układu do stanu rownowagi i ile energii w formie ciepła przepłynęło z jednej próbki do drugiej? Ile wynosi całkowita zmiana entropii i o ile wzrosła (czy wzrosła (?), zastanowić się dlaczego) całkowita liczba dostępnych mikrostanów całego układu? Przyjąć ciepło właściwe miedzi równe $0,389\text{J/gK}$ dla rozważanych temperatur.

3. Dla układu spinów wyprowadziliśmy wzór na liczbę dostępnych mikrostanów $\Omega(N, M)$ dla zadanej liczby spinów N i liczby spinów skierowanych do góry M . Rozważmy teraz układ składający się z dwóch podukładów spinowych w kontakcie termicznym. Zadana jest całkowita liczba spinów N_1 i N_2 w każdym podukładzie oraz całkowita liczba spinów w górę $M = M_1 + M_2$. Cały układ jest opisywany warunkami zespole mikrokanonicznego. Znajdź jakie warunki spełnia M_1 i M_2 w stanie rownowagi termodynamicznej. Rozpatrujemy granicę dużej liczby cząstek. Należy zbadać nie tylko warunek ekstremum ale też warunek maksimum odpowiedniej funkcji prawdopodobieństwa Ω . Wyznaczyć entropię tego stanu oraz porównać z entropią stanów z bliskim, lecz różnym M_1 i M_2 . Przyjąć, że $N_1 \approx N_2 \approx 10^{22}$ oraz np. $M_1 = M_1^{\text{opt}} + 10^{12}$, gdzie M_1^{opt} odpowiada wartości dającej maksimum prawdopodobieństwa.

5 Tydzień V, 29/10-4/11/2017

5.1 Wykład

1 listopada 2017 wykładu nie ma (dzień Wszystkich Świętych)

5.2 Zadania na ćwiczenia

... dokończyć zaległości, można omówić jakiś problem z zadań domowych lub poświęcić trochę czasu na pytania studentów (konsultacje) - pozwoli to grupie środowowej na szybsze nadrobienie materiału, a w pozostałych grupach na pogłębienie wiedzy.

1. *Spiny w danej temperaturze i polu magnetycznym w zespole kanonicznym* - dla modelu N spinów Isinga w polu magnetycznym B i w ustalonej temperaturze T znaleźć energię wewnętrzną, namagnesowanie i magnetyzację, energię swobodną, entropię, podać interpretację wag Boltzmannowskich w tym problemie. Porównać rozwiązanie tego problemu w zespole kanonicznym z rozwiązaniem w zespole mikrokanonicznym aby wykazać równoważność tych zespołów. Omówić problem ujemnych temperatur i spełniania drugiej zasady termodynamiki w układach z $T < 0$.

2. *Praca mikroskopowo i makroskopowo w zespole kanonicznym* - Zakładając, że energia i -tego mikrostanu $\epsilon_i(X)$ zmienia się ze zmianą parametru kontrolnego X wprowadzić mikroskopową 'siłę' $F_i = -d\epsilon_i/dX$ oraz mikroskopową 'pracę' $\delta W_i = F_i dX$. Wyprowadzić wzór na pracę makroskopową (termodynamiczną) uśredniając pracę mikroskopową w zespole kanonicznym, t.j. $\delta W = (1/\beta)(\partial \ln Z / \partial X) dX$. zilustrować ten wynik dla: a) gazu w pudle gdzie zmienia się objętość ($\delta W = -pdV$), b) spinów w polu magnetycznym gdzie zmienia się pole B ($\delta W = MdB$).

3. *Praca, ciepło, entropia i formy zupełne* - Przypomnieć I i II zasadę termodynamiki ($dU + \delta W = \delta Q$, $\delta Q = TdS$), gdzie δW jest pracą wykonaną przez układ, i rozróżnić funkcje stanu i ich różniczki dU od wielkości nie będącymi funkcjami stanu δW i δQ . Co to oznacza fizycznie? Korzystając ze wzoru na pracę $\delta W = (1/\beta)(\partial \ln Z / \partial X) dX$ oraz na energię wewnętrzną $U = -(\partial \ln Z / \partial \beta)$ pokazać, że wielkość $dU + \delta W$ nie jest różniczką zupełną. Dalej, mnożąc to wyrażenie przez β , t.j. $\beta(dU + \delta W)$, pokazać, że jest to różniczka zupełna (co to jest?), a czynnikiem całkującym (co to jest?) jest entropia $S/k_B = \ln Z - \beta(\partial \ln Z / \partial \beta)$. Na koniec pokazać, że jest to ta sama entropia termodynamiczna, którą otrzymujemy z energii swobodnej $S = -(\partial F / \partial T)_{X,N}$.

5.3 Zadania domowe

1. Z rozkładu Boltzmanna $P(\epsilon) = e^{-\beta\epsilon} / Z(T, V, N)$ wyznaczyć energię wewnętrzną $U(T, V, N) = \langle \epsilon \rangle$, jej dyspersję $\sigma(U)^2 = \langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2 = k_B T^2 C_V$. Przypomnieć definicję pojemności cieplnej $C_x = (\delta Q / dT)_x$, przy stałym x i korzystając z I zasady termodynamiki znaleźć wzór na $C_V = (\partial U / \partial T)_{V,N}$.

2. Udowodnić dla mieszaniny klasycznych gazów doskonałych w zespole kanonicznym prawo Daltona mówiące, że ciśnienie mieszaniny gazów jest sumą ciśnień

parcjalnych. Wsk. wyznaczyć sumę statystyczną dla mieszaniny klasycznych gazów doskonałych i skorzystać z mikroskopowej definicji ciśnień jak na wykładzie dla gazu jednoskładnikowego.

3. Układ może być w stanach o energiach $0, \epsilon, \epsilon, \epsilon, 2\epsilon$. Znaleźć energię wewnętrzną tego układu i ciepło właściwe w temperaturze T .

4. Suma statystyczna spełnia zależność $\ln Z = aT^\alpha V$, a i α są dodatnimi stałymi. Znaleźć ciepło właściwe tego układu.

6 Tydzień VI, 5-11/11/2017

6.1 Wykład

wzór Sackuraj-Tetrode na entropię gazu doskonałego, porównanie wzorów na energię wewnętrzną, swobodną i entropię z i bez czynnika $N!$, omówienie paradoksu Gibbsa, entropia mieszania; &8. *Rozkład Maxwella prędkości* - wyprowadzenie w zespole kanonicznym rozkładu prawdopodobieństwa dla prędkości cząstek w gazie doskonałym, rozkład Maxwella, $P(v) = 4\pi(m/2\pi k_B T)^{3/2} v^2 \exp(-mv^2/2k_B T)$, wielkości charakteryzujące rozkład Maxwella: prędkość typowa $v_{\text{typ}} = \sqrt{2k_B T/m}$, prędkość średnia $\langle v \rangle = \sqrt{8k_B T/\pi m}$, średnia prędkość kwadratowa $\langle v^2 \rangle = 3k_B T/m$, różne postacie rozkładu Maxwella $P(v_x, v_y, v_z)$ i $P(E)$.

III. Rozkład Plancka - zastosowania: &1. *Rozkład (funkcja) Plancka* - analiza statystyczna pojedynczego modu drgającego, kwantowanie energii, suma statystyczna, średnia liczba wzbudzeń modu, funkcja Plancka,

6.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Klasyczny gaz doskonały cząsteczek dwuatomowych; suma statystyczna* - Gaz idealny składa się z N dwuatomowych cząsteczek. Masy atomów są m_1 i m_2 . Dla pojedynczej cząsteczki wyrazić jej energię we współrzędnych środka masy i względnych. Znaleźć wyrażenie na sumę statystyczną całego układu i zidentyfikować poszczególne wkłady. Dla wkładu translacyjnego skorzystać z wcześniejszych wyników. Dla wkładu od rotacji i drgań dokonać separacji zmiennych i obliczyć przez odpowiednie całkowanie wkłady od ruchu rotacyjnego $z_1^{\text{rot}} = 2Ik_B T/\hbar^2$, $I = mr^2$ jest momentem bezwładności, i od ruchu wibracyjnego $z_1^{\text{vib}} = k_B T/\hbar\omega_0$. Wsk. potencjał oddziaływania pomiędzy atomami w cząsteczce przybliżyć $V(r) = V(r_0) + (1/2)m\omega_0^2 \xi^2$.

2. *Klasyczny gaz doskonały cząsteczek dwuatomowych; termodynamika* - Dla klasycznego gazu doskonałego cząsteczek dwuatomowych wyznaczyć i przedyskutować: a) energię wewnętrzną, b) ciepło właściwe przy stałej objętości, c) energię swobodną Helmholtza, d) ciśnienie i równanie stanu, e) entropię.

3. *Klasyczny gaz doskonały dipoli w polu elektrycznym* - Dla klasycznego gazu doskonałego dipoli o momencie d w polu elektrycznym \mathcal{E} wyznaczyć i omówić: a) sumę statystyczną, b) energię swobodną, c) polaryzację na jednostkę objętości. Wsk. dipol traktujemy

jak sztywny rotator klasyczny, a energia oddziaływania dipola z polem elektrycznym wynosi $V = -\mathcal{E}d \cos \theta$.

6.3 Zadania domowe

1. Z fundamentalnej relacji dla energii swobodnej Helmholtza $dF = -SdT - pdV$ wyprowadzić odpowiednie relacje Maxwella.

2. W fizyce ciała stałego przemieszczenie się atomu z węzła sieci krystalicznej do obszaru międzywęzłowego nazywamy defektem Frenkla. Zakładając, że energia potrzebna na powstanie defektu Frenkla wynosi w i że w kryształach mamy N atomów, które mogą przemieścić się do D możliwych pozycji międzywęzłowych, znaleźć średnią liczbę defektów w temperaturze T . Odp. $\langle n \rangle \approx \sqrt{ND} \exp(-\beta w/2)$ gdy $n \ll N, D$. Wsk. Wyznaczyć na ile sposobów można wybrać n atomów z sieci i n miejsc z dostępnych D oraz zminimalizować energię swobodną.

3. W fizyce ciała stałego przemieszczenie się atomu z węzła sieci krystalicznej do próżni nazywamy defektem Schottky'ego. Zakładając, że energia potrzebna na powstanie defektu Schottky'ego wynosi w i że w kryształach mamy N atomów znaleźć średnią liczbę defektów w temperaturze T . Odp. $\langle n \rangle \approx N \exp(-\beta w/2)$ gdy $n \ll N$. Wsk. Wyznaczyć na ile sposobów można wybrać n atomów z sieci oraz zminimalizować energię swobodną.

4. Pokazać w zespole kanonicznym, że względne fluktuacje energii wewnętrznej $\sigma(U)/U$ są odwrotnie proporcjonalne do \sqrt{N} , gdzie N jest liczbą cząstek. Kiedy więc zespoły kanoniczny i mikrokanoniczny są równoważne? Wsk. $U = \langle \epsilon \rangle$, $\sigma(U)^2 = \langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2$.

5. Dla paramagnetyka w zespole kanonicznym znaleźć związek pomiędzy fluktuacją magnetyzacji a podatnością magnetyczną.

7 Tydzień VI, 12-18/11/2017

7.1 Wykład

energia wewnętrzna, ciepło właściwe, granice wysokich i niskich temperatur; &2. *Promieniowanie ciała doskonale czarnego* - opis wnęki rezonansowej w równowadze termicznej, równania Maxwella i ich rozwiązania dla sześciennej wnęki, polaryzacja i stopnie swobody, wyznaczenie energii wewnętrznej dla promieniowania elektromagnetycznego, ciepło właściwe, stała Stefana-Boltzmana, entropia, energia swobodna, ciśnienie, równanie stanu, definicja gęstości widmowej, prawo rozkładu Plancka, granica podczerwona i ultrafioletowa, prawo Wiena i Rayleigha-Jeansa, katastrofa w nadfiolecie i problemy fizyki klasycznej, średnia liczba wzbudzeń we wnęcie, promieniowanie z otworu we wnęcie, prawo Stefana-Boltzmana, emisja i absorpcja, prawo Kirchhoffa;

7.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Rozkład Maxwella; charakterystyka* - Znaleźć prędkość typową (najbardziej prawdopodobną), prędkość

średnią, średnią prędkość kwadratową i dyspersję dla rozkładu Maxwella. Oszacować te wielkości dla cząstek tlenu w warunkach normalnych.

2. *Rozkład Maxwella; równanie stanu gazu doskonałego* - W ramach teorii molekularnego chaosu, gdzie zakładamy, że cząstki poruszają się z przypadkowymi prędkościami opisanymi rozkładem Maxwella, wyprowadzić wzór na ciśnienie takiego gazu i sprawdzić równanie stanu dla gazu doskonałego.

3. *Wzór barometryczny* - Znaleźć wzór opisujący zmianę ciśnienia gazu doskonałego z wysokością, zakładając, że temperatura jest stała.

7.3 Zadania domowe

1. Kula o promieniu R porusza się z prędkością u w silnie rozrzedzonym gazie doskonałym o temperaturze T i gęstości n . Zakładając, że zderzenia cząstek gazu z kulą są całkowicie sprężyste, obliczyć siłę oporu doznawaną przez kulę przy jej ruchu. Oszacować wynik dla powietrza w warunkach normalnych i dla typowej piłki futbołowej.

2. W naczyniu zawierającym gaz doskonały zrobiono niewielki, okrągły otwór o przekroju S . Znaleźć liczbę cząstek na jednostkę czasu, padających na okrągły dysk o promieniu R , znajdujący się w odległości h od szczeliny. Płaszczyzna dysku jest równoległa do płaszczyzny otworu, a środki przekroju dysku i otworu leżą na jednej prostej, prostopadłej do płaszczyzny przekroju. Przyjąć, że cząsteczki gazu podlegają Maxwellowskiemu rozkładowi prędkości, i że otwór jest na tyle mały, że ucieczka cząstek nie zaburza stanu równowagi termodynamicznej w naczyniu.

3. Rozrzedzony gaz doskonały znajduje się w naczyniu pod ciśnieniem p . Znaleźć szybkość wypływu gazu do próżni przez niewielki otwór o przekroju S przy założeniu Maxwellowskiego rozkładu prędkości cząstek gazu. Otwór jest na tyle mały, że ucieczka cząstek nie zaburza stanu równowagi termodynamicznej w naczyniu.

4. Dwa naczynia, w których podtrzymuje się temperatury i ciśnienia odpowiednio p_1, T_1, p_2 i T_2 , połączone są ze sobą krótką rurką o polu przekroju S . Obliczyć masę gazu, przepływającą w jednostce czasu z jednego naczynia do drugiego, jeśli masa cząstek gazu wynosi m , oraz $p_1 = 2p_2$ i $T_1 = 2T_2$.

5. Znaleźć liczbę atomów, gubionych w jednostce czasu przez atmosferę planety o promieniu R i masie M . Masa atomu jest równa m , a temperaturę atmosfery T przyjmujemy jako stałą na różnych wysokościach.

8 Tydzień VII, 19-25/11/2017

8.1 Wykład

&3. *Ciepło właściwe ciał stałych, fonony* - model ciała stałego (kryształu), przybliżenie harmoniczne, mody normalne, rys historyczny na temat ciepła właściwego ciał stałych, teoria Einsteina ciepła właściwego kryształu - zalety i wady, teoria Debye'a ciepła właściwego kryształów, mod Goldstone'a (akustyczny), liniowa

relacja dyspersji, temperatura i częstość Debye'a, wyznaczenie ciepła właściwego, fonony, kwaziczastki.

8.2 Zadania na ćwiczenia

Proszę o dokończenie zadań z poprzednich ćwiczeń lub zrobienie powtórzenia materiału do kolokwium. Można wykorzystywać zadania domowe w grupach, realizujących materiał na bieżąco.

Materiałem na kolokwium jest wszystko od początku semestru do rozkładu Maxwella włącznie.

8.3 Zadania domowe

1. Znaleźć dla gazu doskonałego umieszczonego w zewnętrznym polu sił $\Phi(x, y, z)$, prawdopodobieństwo tego, że współrzędne dowolnej cząsteczki gazu będą leżeć w przedziale $[x, x + dx]$, $[y, y + dy]$ i $[z, z + dz]$.

2. Znaleźć położenie środka ciężkości słupa gazu doskonałego w jednorodnym polu ciężkości o natężeniu g , przy masie cząsteczki gazu m i temperaturze T .

3. Mieszanie l doskonałych gazów, o różnych masach atomowych m_1, \dots, m_l , zamknięto w walcu o promieniu R i wysokości h w polu grawitacyjnym Ziemi. Znaleźć środek ciężkości tego układu.

9 Tydzień VIII, 26/11-2/12/2017

9.1 Wykład

IV. Zespół kanoniczny: &1. *Potencjał chemiczny* - układy wymieniające energię i cząstki, warunki równowagi termodynamicznej, temperatura, potencjał chemiczny $\mu = (\partial F(T, V, N)/\partial N)_{T, V}$ - analogie i różnice, kierunek przeływu materii, potencjał chemiczny dla układów wieloskładnikowych i wielofazowych, przykład: potencjał chemiczny dla klasycznego gazu doskonałego, dyskusja wyniku i rola czynnika $N!$, wewnętrzny potencjał chemiczny a zewnętrzny potencjał elektryczny, magnetyczny czy grawitacyjny, analogie, potencjał elektrochemiczny. &2. *Potencjał chemiczny a entropia - związki termodynamiczne* - wyprowadzenie związku $\mu/T = -(\partial S/\partial N)_{U, V}$, podanie innych związków termodynamicznych, pierwsza zasada termodynamiki w układzie otwartym.

9.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Oscylator kwantowy; rozkład Plancka* - Dla pojedynczego kwantowego oscylatora harmonicznego znaleźć wzory na sumę statystyczną, średnią liczbę obsadzeń, energię wewnętrzną, ciepło właściwe, energię swobodną, entropię, i w każdym przypadku przedyskutować granice wysokich i niskich temperatur.

2. *Promieniowanie elektromagnetyczne we wnęce rezonansowej* - Promieniowanie elektromagnetyczne jest uwięzione w metalowym sześciacie o bokach długości L i o temperaturze T . Wyznaczyć sumę statystyczną, gęstość stanów, średnią liczbę obsadzeń, energię wewnętrzną, ciepło właściwe, energię swobodną, entropię,

ciśnienie, równanie stanu, i w każdym przypadku przedyskutować granice wysokich i niskich temperatur.

3. *Kwantowa teoria ciepła właściwego doskonałego gazu dwuatomowego* - Przyjmując, że stopnie swobody ruchu w cząsteczce dwuatomowej można rozseparować (patrz zadanie domowe 4) możemy zapisać sumę statystyczną w postaci $Z = Z_{trans}Z_{vib}Z_{rot}Z_{electr}$, gdzie poszczególne wkłady opisują odpowiednio translacyjne, oscylacyjne, rotacyjne i elektronowe stopnie swobody. Znaleźć wkład do ciepła właściwego od oscylacyjnych i rotacyjnych stopni swobody oraz przedyskutować granice nisko i wysoko-temperaturową. Omówić jakościowo typową zmianę ciepła właściwego takiego gazu w funkcji temperatury i podać charakterystyczne skale/energie dla wybranych molekuł.

9.3 Zadania domowe

1. Wyprowadzić wzór na średnią liczbę fotonów (kwantów wzbudzeń pola elektromagnetycznego) w zależności od temperatury. Oszacować liczbę fotonów na metr sześcienny we Wszechświecie w którym temperatura promieniowania tła mikrofalowego jest równa około 3K. Porównać tę liczbę z liczbą innych cząstek w tej objętości. Oszacować entropię Wszechświata przypadającą na a) jedną cząstkę, b) na jednostkę objętości.

2. Stała Słoneczna wynosi 1360 J/sm^2 i opisuje ilość na jednostkę powierzchni i jednostkę czasu docierającej do Ziemi energii ze Słońca. Odległość Ziemia-Słońce wynosi $d = 1,3 \cdot 10^{11} \text{ m}$, a promień Słońca wynosi $R_S = 7 \cdot 10^8 \text{ m}$. Wyznaczyć moc Słońca i jego temperaturę.

3. Znaleźć przybliżony wzór na położenie maksimum w rozkładzie Plancka. Jest to tak zwane prawo przesunięć Wiena i pozwala wyznaczyć na odległość temperaturę promieniującego ciała.

4. W ramach rozważań kwantowo mechanicznych uzasadnić, że energia własna molekuly dwuatomowej H_2^+ ma postać $E_{\mathbf{K}, J, \nu} = \hbar^2 \mathbf{K}^2 / 2m_s + \hbar \omega (\nu + 1/2) + \hbar^2 J(J+1)/2I + V_0$, gdzie m_s jest masą całkowitą, ω jest częstością własną drgań, I jest momentem bezwładności, V_0 jest energią potencjalną w położeniu równowagi. Liczby kwantowe: \mathbf{K} ciągły wektor falowy, $\nu = 0, 1, 2, \dots$, i $J = 0, 1, 2, \dots$. Zadanie wymaga zastosowania przybliżenia Borna-Oppenheimera i wnikliwego zbadania wkładu poszczególnych wyrazów i uwzględnienie tylko wyrazów dominujących. Pomijamy tutaj spiny jąder i elektronów.

10 Tydzień IX, 03-09/12/2017

10.1 Wykład

&3. *Duży zespół kanoniczny i rozkład Gibbsa* - definicja dużego zespołu kanonicznego, wyprowadzenie rozkładu Gibbsa, duża suma statystyczna $\Xi(T, V, \mu)$, średnia liczba cząstek, energia wewnętrzna i entropia w dużym zespole kanonicznym, aktywność. &4. *Duży potencjał termodynamiczny* - duży potencjał termodynamiczny $\Phi(T, V, \mu)$, definicje w termodynamice $\Phi = U - TS - \mu N$ i w fizyce statystycznej $\Phi = -k_B T \ln \Xi$, pokazanie ich równoważności dla

różniczki, ze związkow na $d\Phi$ pokazanie pierwszej zasady termodynamiki, Podsumowanie zespolow statystycznych w tabeli, sens transformacja Legendre'a, podsumowanie funkcji stanów używanych w termodynamice, ich zmienne niezależne i warunki kiedy i dlaczego je stosujemy, nazwy: $S(U, V, N)$ entropia, $U(S, V, N)$ energia wewnętrzna, $F(T, V, N)$ energia swobodna Helmholtza, $H(T, p, N)$ entalpia, $G(T, p, N)$ energia swobodna Gibbsa, $\Phi(T, V, \mu)$ wielki potencjal termodynamiczny.

10.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Ciepło właściwe kwazicząstek* - Wyznaczyć ciepło właściwe w niskich i wysokich temperaturach idealnego gazu kwazicząstek w d wymiarach przestrzennych o relacji dyspersji $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_0(k/k_0)^\alpha$, gdzie $\mathbf{k} = 2\pi/L[n_1, n_2, \dots, n_d]$, L to długość układu, n_i to liczby całkowite (periodyczne warunki brzegowe), $\alpha > 0$ jest stałą bezwymiarową, dodatnia stała ϵ_0 ma wymiar energii, a $k_0 > 0$ ma wymiar wektora falowego.

2. *Potencjał chemiczny dla idealnego gazu cząsteczek* - Wyznaczyć potencjał chemiczny dla idealnego gazu cząsteczek zakładając, że energia cząsteczki jest sumą energii kinetycznej, rotacyjnej, oscylacyjnej i elektro- nowej.

3. *Potencjał chemiczny w reakcjach chemicznych* - W reakcjach chemicznych cząsteczki mogą się rozpa- dać i tworzyć nowe, co jest opisywane wzorem reak- cji chemicznej $\sum_{i=1}^r b_i B_i \leftrightarrow \sum_{i=r+1}^M b_i B_i$, gdzie B_i jest symbolem cząsteczki, a b_i jest najmniejszą liczbą natu- ralną wynikającą z zasady zachowania liczby atomów. Oznaczmy $\nu_i = -b_i$ dla $i = 1, \dots, r$ oraz $\nu_i = b_i$ dla $i = r + 1, \dots, M$. Pokazać, że w stanie równo- wagi termodynamicznej dla reakcji przy stałym T i V (izotermiczno-izochorycznej) zachodzi $\sum_{i=1}^M \nu_i \mu_i = 0$, gdzie μ_i jest potencjałem chemicznym dla i -tej czą- steczki.

10.3 Zadania domowe

1. Rozwiązać klasyczny model jednowymiarowego krzysztálu z oddziaływaniami Hooka pomiędzy ato- mami i periodycznymi warunkami brzegowymi. Wyz- naczyć mody własne, relacje dyspersji i liczby falowe. Co się zmieni przy otwartych warunkach brzegowych. Wyznaczyć sumę statystyczną, energię wewnętrzną i ciepło właściwe. Wsk. przypomnieć sobie to samo za- danie w kursie z mechaniki klasycznej.

2. Skwantować model klasyczny z zadania pierwszego i wyznaczyć sumę statystyczną, energię wewnętrzną i ciepło właściwe w przybliżeniu Debeye'a. Zwrócić uwagę na granicę klasyczną sumy statystycznej (czyn- nik \hbar).

3. Rozwiązać modele klasyczny i kwantowy krysztálu jednowymiarowego (jak w zad. 1 i 2) i wyznaczyć ter- modynamikę układu zakładając, że komórka elemen- tarna krysztálu składa się z dwóch atomów o masach m_A i m_B . Ile jest i jak przybiegają relacje dyspersji (mody optyczne i akustyczne).

4. W modelu krysztálu z zad. 1 i 2 (jednoatomowy) wyznaczyć fluktuacje położenia $\langle x_i^2 \rangle$ wokół położenia równowagi. Czy wynik jest skończony? Czy krysztály w jednym wymiarze mogą istnieć? Uogólnić na przy- padek wielowymiarowy (trudne, dla chętnych). [Np. arXiv:physics/0609177, Spontaneous Symmetry Bre- aking in Quantum Mechanics, Jasper van Wezel, Je- roen van den Brink, Journal-ref: Am. J. Phys., 75, 635- 638 (2007).]

5. Podać jawną postać relacji z zadania 3 z ćwiczeń dla następujących reakcji:

- $2H_2 + O_2 \leftrightarrow 2H_2O$,
- $4NH_3 + 3O_2 \leftrightarrow 2N_2 + 6H_2O$,
- $2C_4H_{10} + 13O_2 \leftrightarrow 8CO_2 + 10H_2O$.

11 Tydzień X, 10-16/12/2017

11.1 Wykład

V. Doskonałe gazy kwantowe: &1. *Funkcja falowa układów wielu cząstek* - przypomnienie problemu jednej cząstki w pudle w $d=3$, periodyczne warunki brzegowe i warunki kwantyzacji wektora falowego, dwie iden- tyczne czastki w mechanice kwantowej zasada nieroz- różnialności cząstek, konsekwencje nierozróżnialności na gestość prawdopodobieństwa i na symetrię funkcji fa- lowych przy zamianie cząstek, ogólne zasady podziału na bozony i fermiony o symetrycznych funkcjach fa- lowych i antysymetrycznych, związek symetryczności funkcji falowej ze spinem cząstek, zasada Pauliego i obsadzenie stanów kwantowych w przypadku bozonów i fermionów.

11.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Prawo działania mas* - Wyprowadzić prawo działa- nia mas $\prod_{i=1}^M n_i^{\nu_i} = K(T)$ (Guldberg, Waage, 1867), gdzie $n_i = N_i/V$ jest gęstością i -tej cząstki w układzie, i znaleźć jawną postać stałej równowagowej $K(T)$. Wyp- isać to prawo dla reakcji $4NH_3 + 3O_2 \leftrightarrow 2N_2 + 6H_2O$ i uzupalnić je o trzy brakujące równania korzystając z zasady zachowania liczby atomów, przy założeniu, że ich ilość jest znana. Podać jawną postać stałej $K(T)$.

2. *Równowaga chemiczna a zmiana energii swobod- nej* - Pokazać, że dla reakcji chemicznej w równowa- dze zachodzi związek $\prod_{i=1}^M N_i^{\nu_i} = \exp(-\Delta F_0/k_B T) = K(T)V^{\sum_{i=1}^M \nu_i}$, gdzie ΔF_0 jest zmianą energii swobod- nej w reakcji.

3. *Klasyczny gaz doskonały w wielkim zespole kano- nicznym* - Rozwiązać klasyczny nierelatywistyczny gaz doskonały w trzech wymiarach w dużym zespole kano- nicznym i wyznaczyć wszystkie funkcji termodyna- miczne Φ , N , p , μ , S , U oraz równanie stanu. Używa- lismy $\alpha = \exp(\beta\mu)$ na aktywność.

11.3 Zadania domowe

1. Podać jawną postać prawa działania mas i stałej równowagowej $K(T)$ dla następujących reakcji:

- $2H_2 + O_2 \leftrightarrow 2H_2O$,
- $2C_4H_{10} + 13O_2 \leftrightarrow 8CO_2 + 10H_2O$.

2. Na wykładzie zdefiniowaliśmy temperaturę $1/T = (\partial S/\partial U)_{V,N}$, ciśnienie $p = -(\partial U/\partial V)_{S,N}$, i potencjał chemiczny $\mu = (\partial F/\partial N)_{T,V}$. Są one odpowiednio zadane jako pochodne różnych funkcji stanu $S(U, V, N)$, $U(S, V, N)$, i $F(T, V, N)$. Znaleźć pozostałe cztery wyrażenia na T , p , i μ korzystając z pozostałych reprezentacji (funkcji stanu). W reprezentacji $F(T, V, N)$ temperatura jest zmienna niezależną.

12 Tydzień XI, 17-23/12/2017

12.1 Wykład

&2. Funkcje Fermiego-Diraca i Bosego-Einsteina - wyprowadzenie wzoru na sumy statystyczne dla gazów doskonałych fermionów i bozonów, rednie obsadzenie danego stanu kwantowego, funkcja Fermiego-Diraca i funkcja Bosego-Einsteina. & 3. *Poprawki kwantowe do równania stanu gazu doskonałego* - Wyprowadzenie poprawek kwantowych dla bozonów i fermionów w równaniu stanu gazu doskonałego, funkcje polilogarytmiczne, rozwinięcie w wysokich temperaturach i małych gęstościach równania stanu, współczynniki wirialne. &4. Fermiony w stanie podstawowym $T = 0$ - wielkości opisujące stan podstawowy fermionów w $d = 3$, wektor Fermiego (F), pęd F, prędkość F, długość fali F, kula F, energia F, temperatura F, energia w stanie podstawowym, ciśnienie w stanie podstawowym, przykłady liczbowe.

12.2 Zadania na ćwiczenia

1. Klasyczny gaz doskonały w wielkim zespole kanonicznym Dla klasycznego gazu doskonałego w dużym zespole kanonicznym pokazać, że: a) $\bar{N} = -\beta\Phi(T, V, \mu)$, gdzie $\bar{N} = \langle N \rangle$ jest średnią liczbą cząstek, a $\Phi(T, V, \mu)$ jest wielkim potencjałem termodynamicznym; b) prawdopodobieństwo znalezienia dokładnie N cząstek wynosi $P(N) = e^{-\bar{N}}\bar{N}^N/N!$ (rozkład Poissona).

2. Klasyczny gaz doskonały w wielkim zespole kanonicznym Wyprowadzić związek pomiędzy gęstością cząstek przy powierzchni ziemi i gęstością cząstek na wysokości H korzystając jawnie z sumy statystycznej w wielkim zespole kanonicznym i tego, że w warunkach równowagi potencjał chemiczny na wysokości H jest równy potencjałowi przy powierzchni ziemi. Potencjał pola grawitacyjnego przyjmując w postaci $U = mgz$. Wyprowadzić (wypisać) wzór barometryczny dla ciśnienia. (W zadaniu tym koncentrujemy się na znalezieniu sumy statystycznej dla cząstek klasycznego gazu doskonałego w podłej sześciennym o bokach długości L w polu grawitacyjnym i będącym na wysokości H . Sam wzór barometryczny można znaleźć na wiele sposobów, np. *On the barometric formula*, M. N. Berberan-Santos, E. N. Bodunov i L. Pogliani, Am. J. Phys. **65**, 404 (1997).)

12.3 Zadania domowe

1. Znaleźć wariancję liczby cząstek $\sigma_N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$ w wielkim zespole kanonicznym i pokazać, że względna

fluktuacja liczby cząstek zachowuje się jak $\sigma_N/\langle N \rangle \sim 1/\sqrt{N}$.

2. Na powierzchni będącej w kontakcie z gazem doskonałym o temperaturze T i potencjale chemicznym μ zachodzi adsorbcja (wiązanie substancji gazowej na powierzchni stałej lub ciekłej). Obliczyć współczynnik pokrycia tej powierzchni k (t.j. stosunek średniej liczby zaadsorbowanych cząsteczek gazu do liczby dostępnych miejsc na powierzchni M). Znaleźć zależność od ciśnienia. Energia pojedynczej zaadsorbowanej molekuly wynosi $-\epsilon$ i dane miejsce może być zajęte przez co najwyżej jedną cząsteczkę.

3. W przypadku zatrucia się tlenkiem węgla cząsteczki CO zastępują cząsteczki O_2 zaadsorbowane na cząsteczkach hemoglobiny we krwi. Rozważmy model hemoglobiny gdzie M dostępnych miejsc może być obsadzone przez tlen lub tlenek węgla i odpowiednio dla O_2 energia wynosi $-\epsilon_A$, a dla CO energia wynosi $-\epsilon_B$. Koncentracje gazów są takie, że aktywności w 37C wynoszą $\alpha(O_2) = 10^{-5}$ i $\alpha(CO) = 10^{-7}$. a) W układzie w którym nie ma CO wyznaczyć ϵ_A zakładając, że 90% dostępnych miejsc jest zajęte przez O_2 . b) Teraz w układzie gdzie jest też CO wyznaczyć ϵ_B zakładając, że tylko 10% dostępnych stanów jest zajęta przez O_2 . Podać wyniki w eV i w J. (Pomijamy możliwe efekty spinowe)

4. Atomy wodoru są domieszkami w kryształach. Niech każdy atom wodoru może być w stanie podstawowym (jeden elektron o spinie σ na powłoce 1s i energii $-\Delta/2$), w stanie dodatnio zjonizowanym (brak elektronów, energia $-\delta/2$), ujemnie zjonizowanym (dwa elektrony na powłoce 1s o energii $\delta/2$), lub w stanie wzbudzonym (jeden elektron na powłoce o energii $\Delta/2$). Znaleźć: a) prawdopodobieństwo, że dana domieszka jest w stanie podstawowym, b) że dana domieszka jest dodatnio zjonizowana, oraz c) jakie muszą zachodzić warunki aby średnia liczba elektronów na domieszkach wynosiła jeden. Przyjąć temperaturę układu T .

13 Tydzień XII, 7-13/01/2018

13.1 Wykład

&5. *Fermiony w niskich temperaturach; ciepło właściwe* - średnia po zespole i jej zapisanie za pomocą gęstości stanów $\rho(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k)$, gęstość stanów w $d=3$, ciepło właściwe dla elektronów w eksperymencie, niskotemperaturowe rozwinięcie dla energii wewnętrznej i wyznaczenie ciepła właściwego fermionów, dyskusja i porównanie wyznaczonych mas efektywnych w doświadczeniach z ciekłym helem 3, metalami prostymi, ciężkimi fermionami; &6. *Kwaziczastki Landaua*¹ - koncepcja kwaziczastek Landaua, elementy teorii cieczy Fermiego Landaua, rozwinięcie energii jako funkcja (funkcjonal) $\delta n_{k\sigma} = n_{k\sigma} - n_{k\sigma}^0$ w niskich temperaturach, amplituda oddziaływania między kwaziczastkami, nieoddziałująca relacja dyspersji, znormalizowana relacja dyspersji, masa efektywna kwaziczastek, wybrane przewidywania doświadczalne w ramach teorii cieczy Fermiego;

¹Material nieobowiązkowy

13.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Rozkład FD i BE* - pokazać, że średnie obsadzenie k -tego stanu wynosi $\bar{n}_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \pm 1}$ odpowiednio dla fermionów (+) i bozonów (-).

2. *Rozwinięcie wysokotemperaturowe dla fermionów* - a) zapisać wielki potencjał termodynamiczny dla fermionów w postaci szeregu potęgowego (funkcji polilogarytmicznej) $f_q(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \alpha^n / n^q$ (odp. $\Phi(T, V, \mu) = -k_B T g(V/\lambda_{dB}) f_{5/2}(\alpha)$), b) znaleźć wyrażenie na średnią liczbę cząstek (odp. $\bar{N} = g(V/\lambda_{dB}) f_{3/2}(\alpha)$), c) znaleźć wyrażenie na ciśnienie ($p = k_B T (g/\lambda_{dB}^3) f_{5/2}(\alpha)$), d) energię wewnętrzną (odp. $U = (3/2) k_B T g(V/\lambda_{dB}^3) f_{5/2}(\alpha) = (3/2) pV$), e) entropię (odp. $S = (5/2) k_B g(V/\lambda_{dB}^3) f_{5/2}(\alpha) - (\mu/T) g(V/\lambda_{dB}) f_{3/2}(\alpha)$), e) znaleźć pierwszą poprawkę kwantową do aktywności klasycznej (odp. $z = z^{(0)}(1 + (1/2^{3/2})z^{(0)})$, $z^{(0)} = \bar{n} \lambda_{dB}^3 / g$), f) znaleźć pierwszą poprawkę kwantową do klasycznego równania stanu gazu doskonałego (odp. $pV = k_B T \bar{N}(1 + (1/2^{5/2})z^{(0)})$).

13.3 Zadania domowe

1. *Rozwinięcie wysokotemperaturowe dla bozonów* - a) zapisać wielki potencjał termodynamiczny dla bozonów w postaci szeregu potęgowego (funkcji polilogarytmicznej) $g_q(\alpha) = -\sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n / n^q$ dla $|\alpha| < 1$ (odp. $\Phi(T, V, \mu) = -k_B T g(V/\lambda_{dB}) g_{5/2}(\alpha)$), b) znaleźć wyrażenie na średnią liczbę cząstek (odp. $\bar{N} = g(V/\lambda_{dB}) g_{3/2}(\alpha)$), c) znaleźć wyrażenie na ciśnienie ($p = k_B T (g/\lambda_{dB}^3) g_{5/2}(\alpha)$), d) energię wewnętrzną (odp. $U = (3/2) k_B T g(V/\lambda_{dB}^3) g_{5/2}(\alpha) = (3/2) pV$), e) entropię (odp. $S = (5/2) k_B g(V/\lambda_{dB}^3) g_{5/2}(\alpha) - (\mu/T) g(V/\lambda_{dB}) g_{3/2}(\alpha)$), -e) znaleźć pierwszą poprawkę kwantową do aktywności klasycznej (odp. $z = z^{(0)}(1 + (1/2^{3/2})z^{(0)})$, $z^{(0)} = \bar{n} \lambda_{dB}^3 / g$), f) znaleźć pierwszą poprawkę kwantową do klasycznego równania stanu gazu doskonałego (odp. $pV = k_B T \bar{N}(1 - (1/2^{5/2})z^{(0)})$). Przypadek $\alpha \geq 1$ pominąć.

2. Znaleźć wielkości Fermiego, które wprowadziliśmy na wykładzie dla doskonałego gazu fermionów w $T = 0$: a) o parabolicznej relacji dyspersji w d wymiarach, b) o relacji dyspersji $\epsilon_k = \epsilon_0(k/k_0)^s$ w 3 wymiarach.

3. Stała struktury subtelnej wynosi $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$, a promień Bohra $a = \hbar^2/m_e^2$ odpowiada średniej odległości pomiędzy fermionami. Sprawdzić następujące oszacowania: a) $\epsilon_F \sim (1/137)^2 m_e c^2$, b) $p_F \sim (1/137) m_e c$, c) $v_F \sim (1/137) c$. Wsk. gęstość $n \sim 1/a^3$.

14 Tydzień XIII, 14-20/01/2018

14.1 Wykład

&7. *Kondensacja Bosego-Einsteina (BEC)* - zjawisko kondensacji BEC, potencjał chemiczny w niskich temperaturach, obsadzenie poziomów energetycznych w funkcji temperatury, gęstość bozonów w kondensacie i poza kondensatem, wyznaczenie temperatury krytycznej, wykładniki krytyczne dla liczby bozonów w kondensacie, interpretacja zjawiska BEC, własności bozonów w kondensacie, spójność kwantowa kondensatu,

makroskopowa funkcja falowa, analogia do lasera, obserwacja BEC w gazie zimnych atomów;

14.2 Zadania na ćwiczenia

1. *Rozwinięcie nisko-temperaturowe Sommerfelda dla fermionów* - Wyprowadzić rozwinięcie Sommerfelda dla całek z dowolnej funkcji $H(\epsilon)$ pomnożonej przez funkcję Fermiego-Diraca, tzn. w niskich temperaturach mamy $\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon H(\epsilon) f_{FD}(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon H(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 dH(\epsilon)/d\epsilon|_{\epsilon=\mu} + \frac{7}{360} \pi^4 (k_B T)^4 d^3 H(\epsilon)/d\epsilon^3|_{\epsilon=\mu} + \dots$

2. *Potencjał chemiczny w niskich temperaturach* - wyprowadzić wzór na poprawkę od skończonych temperatur do potencjału chemicznego dla nieoddziałujących fermionów, t.j. $\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (\rho'/\rho)|_{\epsilon=\epsilon_F}$, gdzie ρ jest gęstością stanów, a ϵ_F energią Fermiego.

14.3 Zadania domowe

1. Wyprowadzić wzór na potencjał chemiczny dla nieoddziałujących fermionów z dowolną gęstością stanów do czwartego rzędu ze względu na temperaturę.

2. Wyprowadzić wzory na: a) energię wewnętrzną, b) ciepłowności, c) entropię i d) energię swobodną dla nieoddziałujących fermionów z dowolną gęstością stanów do czwartego rzędu ze względu na temperaturę.

3. Znaleźć niskotemperaturowe poprawki do czwartego rzędu do ciśnienia nieoddziałujących fermionów w trzech wymiarach z paraboliczną relacją dyspersji.

4. *Paraamagnetyzm Pauliego* - Swobodne elektrony w trzech wymiarach znajdują się jednorodnym polu magnetycznym o indukcji B . Znaleźć magnetyzację i podatność magnetyczną tego układu w zerowej temperaturze. Elektrony oddziałują z polem zewnętrznym poprzez sprzężenie Zeemana.

5. Wyznaczyć pierwszą poprawkę od skończonych temperatur do podatności Pauliego z zadania 4.

15 Tydzień XIV, 21-27/01/2018

15.1 Wykład

&8. *Nadpłynność HeII*² - polecam film na www.alfredleitner.com, diagram fazowy ⁴He, ciepło właściwe, bezlepkowy przepływ, nieskończona przewodność cieplna, efekt termomechaniczny, efekt fontannowy, efekt mechanotermiczny, eksperyment Andronikashvilliego, model dwupłynowy Tiszy-Landaua, prędkość kondensatu i bezwirowy przepływ, kwazicząstki i nadpłynność, kryterium Landaua.

15.2 Zadania na ćwiczenia

1. *kondensacja Bosego-Einsteina* - w oparciu o wyniki zadania 2 z tygodnia XII omówić zjawisko kondensacji Bosego-Einsteina dla doskonałych bozonów w trzech wymiarach i wyznaczyć temperaturę kondensacji, gęstość cząstek w kondensacie, energię wewnętrzną i ciśnienie.

²Material nieobowiązkowy

15.3 Zadania domowe

1. Obliczyć wielką sumę statystyczną $\Xi(T, V, \mu)$ dla dwuwmiarowego gazu idealnych bozonów i wyznaczyć granicę $\lim_{V \rightarrow \infty} (1/A) \ln \Xi(T, V, \mu)$, gdzie $V = L^2$ jest powierzchnią układu. Znaleźć średnią liczbę cząstek w zależności od T i $\alpha = e^{\beta\mu}$. Pokazać, że nie zachodzi kondensacja Boseg-Einsteina w skończonych temperaturach.

2. Znaleźć ciepło właściwe dla doskonałych bozonów w trzech wymiarach. Pokazać, że w punkcie kondensacji T_{BEC} ma on nieciągłą pierwszą pochodną. Znaleźć wartość skoku pierwszej pochodnej. Wsk. $g_{3/2}(z) = 2,36\nu^{3/2} + 1,342 - 2,612\nu - 0,730\nu^2 + \dots$, gdzie $\nu = -\ln z$.

Literatura

- Ch. Kittel, H. Kroemer, Thermal Physics.
- K. Huang, Statistical mechanics.
- F. Schwabl, Statistical mechanics.
- R.H. Swendsen, An introduction to statistical mechanics and thermodynamics.
- F. Reif, Fizyka statystyczna.
- F. Mandl, Statistical physics.
- H.B. Callen, Thermodynamics.
- A. Fronczak, Zadania i problemy z rozwiązaniami z termodynamiki i fizyki statystycznej.