

5. soru

mikrokanonik sistem için çözdüğümüz örneği kanonik dağılım için çözelim.

N atandan oluşan bir kristal gözününe alalım. Kristaldeki her atom $E_1 = E_2 = 0$ ve $E_3 = E_4 = E_5 = E$ olmak üzere 5 tane mümkün durumda olmaktadır. Kanonik toplulukta kristalin enerjisini hesaplayalım.

1 atom için bölünüm fonksiyonunu yazalım.

$$Z_1 = \sum_{i=1}^5 g_i e^{-E_i/k_B T} = 2 e^{-0/k_B T} + 3 e^{-E/k_B T} = 2 + 3 e^{-E/k_B T}$$

N atom için, sistemin bölünüm fonksiyonu;

$$Z = (Z_1)^N = [2 + 3 e^{-E/k_B T}]^N$$

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T N \ln(2 + 3 e^{-E/k_B T})$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_N \quad \text{ve} \quad E = F + TS \quad \text{denklemlerinden yararlanarak}$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = -\left\{ -k_B N \ln(2 + 3 e^{-E/k_B T}) - k_B T N \left[\frac{-3 \left(\frac{E}{k_B T^2}\right) e^{-E/k_B T}}{2 + 3 e^{-E/k_B T}} \right] \right\}$$

$$S = k_B N \ln(2 + 3 e^{-E/k_B T}) + \frac{3 N E}{T} \left[\frac{e^{-E/k_B T}}{2 + 3 e^{-E/k_B T}} \right]$$

$$E = F + TS$$

$$E = -k_B T N \ln(2 + 3e^{-\frac{E}{k_B T}}) + k_B T N \ln(2 + 3e^{-\frac{E}{k_B T}}) + \frac{3NE e^{-\frac{E}{k_B T}}}{2 + 3e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$

$$E = \frac{3NE e^{-\frac{E}{k_B T}}}{2 + 3e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$

//

Soru

İki atomlu lineer bir molekülün yüksek sıcaklıklarda dönme hareketine ait bölünüm fonksiyonu

$$Z = \frac{2Ik_B T}{h^2}$$

ile verilmektedir. Burada

I eylemsizlik momenti ve T sıcaklıktır. Buna göre molekülün sabit hacimdeki ortalama enerjisini hesaplayınız. Soruyu enerjinin bölünüm teorisi ile karşılaştırınız.

Çözüm

$$Z = \frac{2Ik_B T}{h^2}$$

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln \left(\frac{2Ik_B T}{h^2} \right)$$

$$C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_v \quad \text{ve} \quad S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_v$$

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T} = - \left\{ -k_B \ln \left(\frac{2Ik_B T}{h^2} \right) - k_B T \cdot \left(\frac{\frac{2Ik_B}{h^2}}{\frac{2Ik_B T}{h^2}} \right) \right\}$$

$$S = k_B \ln \left(\frac{2Ik_B T}{h^2} \right) + k_B \quad \text{bulunur.}$$

$$C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right) = T \left[k_B \frac{\frac{2Ik_B}{h^2}}{\frac{2Ik_B T}{h^2}} \right] = k_B //$$

enerji bölünüm teorisi ; $E = \frac{f}{2} k_B T \Rightarrow C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{f}{2} k_B$ olmalıdır.

iki atomlu lineer bir molekülün dönme hareketinden dolayı $f=2$

$$C_v = \frac{2}{2} k_B = k_B // \quad \text{aynı sonuç bulunmuştur.} \quad \left[\begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \quad f=2 \\ \downarrow \quad \quad \quad \uparrow \\ \omega \quad \quad \quad \omega \end{array} \right]$$

(Bekir Karagün)

4-3

$$Z_N = \left(\frac{V - Nb}{\lambda^3} \right)^N e^{\beta a N^2 / V}$$

Boomer Hesaplayalım;

$$P = - \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_T ; \quad F = -k_B T \ln Z$$

$$\ln Z = N \ln \left(\frac{V - Nb}{\lambda^3} \right) + \frac{\beta a N^2}{V} \quad (\beta = 1/k_B T)$$

$$F = -k_B T N \ln \left(\frac{V - Nb}{\lambda^3} \right) - \frac{a N^2}{V}$$

$$P = - \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_T = k_B T N \left[\frac{\cancel{\lambda^3} / \cancel{\lambda^3}}{\left(\frac{V - Nb}{\cancel{\lambda^3}} \right)} \right] - a \frac{N^2}{V^2}$$

$$P = k_B T N \left(\frac{1}{V - Nb} \right) - \frac{a N^2}{V^2}$$

Düzenlerirse;

$$\left(P + a \frac{N^2}{V^2} \right) (V - Nb) = k_B T N = RT \quad \left(\begin{array}{l} \text{van der Waals} \\ \text{denklemini} \end{array} \right)$$

(1)

(Bekir Karagöz)

4-4

Her açık bağ 0 enerjiye her kapalı bağ ϵ enerjiye sahiptir. Toplam N tane bağ var. Her bağ ancak solundaki tüm bağlar açaksa açılabilir.

- a)
- | | | |
|-------------------|-----------------------------|---------------------------------------|
| N tane kapalı | $e^{-\beta N \epsilon}$ | $; N \epsilon$ enerji |
| $N-1$ tane kapalı | $e^{-\beta (N-1) \epsilon}$ | $; (N-1) \epsilon$ enerji |
| $N-2$ tane kapalı | $e^{-\beta (N-2) \epsilon}$ | $; (N-2) \epsilon$ enerjiye sahiptir. |

Bölgüm fonksiyonu

$$e^{-\beta \epsilon} + e^{-\beta (N-1) \epsilon} + e^{-\beta (N-2) \epsilon} + \dots + e^{-\beta \epsilon} + 1 = \sum_{n=0}^N e^{-\beta n \epsilon} = Z$$

öbörö yazılır.

Seri toplamından

$$1 + x + x^2 + x^3 + \dots + x^N = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x} \quad \text{olabilir. (Bilgi)}$$

Buradan

$$Z = \frac{1 - e^{-(N+1)\beta \epsilon}}{1 - e^{-\beta \epsilon}} \quad \text{olabilir}$$

b) Ortalama Değer Hesaplayalım

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^N n e^{-\beta n \epsilon}}{\sum_{n=0}^N e^{-\beta n \epsilon}}$$

$$\lambda = \epsilon / k_B T \text{ diyelim.}$$

$$\langle n \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \lambda} Z = -\frac{\partial}{\partial \lambda} \ln Z \quad \text{şeklinde yazabiliriz.}$$

$$\lambda = \frac{\epsilon}{k_B T} \text{ ise değişken dönüşümü yaparak}$$

(2)

4-4

$$\langle n \rangle = \frac{k_B T^2}{\varepsilon} \frac{\partial \ln z}{\partial T}$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial T} = - \frac{\varepsilon \partial T}{k_B T^2}$$

gösterilir.

$$\frac{\partial \ln z}{\partial T} \equiv \text{hesaplanır ve}$$

$$\langle n \rangle \approx e^{-\varepsilon/k_B T} \quad (k_B T \ll \varepsilon) \text{ değeri gösterilir.}$$

(4-5) (Bekir Kaçkın)

Soru

a) aşağı yönde enerji sıfır, yukarı yönde enerji $(+mga)$

Tek bir zincirin bölünüm fonksiyonu

$$z_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \epsilon_n} = 1 + e^{-\beta mga}$$

N tane var. Sistemin bölünüm fonksiyonu

$$Z = (z_1)^N = (1 + e^{-\beta mga})^N$$

b) 1a enerji;

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad ; \quad \ln Z = N \ln(1 + e^{-\beta mga})$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[N \ln(1 + e^{-\beta mga}) \right]$$

$$E = \frac{N mga}{1 + e^{-\beta mga}}$$

Zincirin uzunluğu $L = (N-n)a$; n yukarı yönelenlerin sayısı.
 $E = n(mga)$

$$N = n + \frac{L}{a} = \frac{na + L}{a}$$

yukarıdaki enerji ifadesine yerleştirelim.

$$E = \frac{\left(\frac{na+L}{a}\right) mga}{1 + e^{-\beta mga}} \Rightarrow \frac{Lmg}{1 + e^{-\beta mga}} + \frac{\overbrace{n mga}^E}{1 + e^{-\beta mga}} = E$$

Düzenleyelim.

$$\frac{Lmg}{1+e^{-\beta m g}} = E - \frac{E}{1+e^{-\beta m g}} \Rightarrow \frac{Lmg}{1+e^{-\beta m g}} = \frac{E + E e^{-\beta m g} - E}{1+e^{-\beta m g}}$$

$$E = \frac{Lmg}{e^{-\beta m g}} = Lmg e^{\beta m g}$$

bulun

Kurveti hesaplayalım.

$$dE = dQ - dW \quad dW = -F dL$$

$$dE = dQ + F dL \quad \text{veya} \quad dE = T dS + F dL \quad \text{yazılır.}$$

$$F = \left(\frac{dE}{dL} \right)_S$$

F değeri bulalım;

$$\frac{dE}{dL} = mg e^{\beta m g}$$

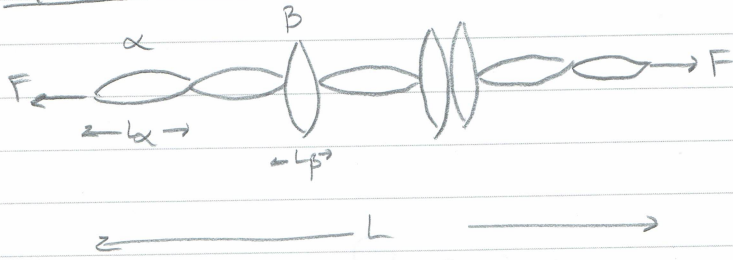
yüksek sıcaklıklardan $k_B T \gg m g$

$$e^x \approx 1 + x + \dots$$

$$F = mg \left[1 + \frac{m g}{k_B T} \right]$$

hook yasan $F \propto T$ olmaktadır.

4-6 (Beton Kavgın)



$$L_{\alpha} = a$$

$$L_{\beta} = b$$

$$E_{\alpha} = E_{\beta} = E \quad \text{her iki durumda enerji aynı durumda } E.$$

uzunluklar L_{α} , L_{β} olsun. F gerilme kuvveti uygulandığı zaman bir molekülün α durumundaki enerjisi

$$E_{\alpha} = E_{\alpha} - FL_{\alpha} = E - FL_{\alpha}$$

$$\beta \text{ durumunda enerjisi } E_{\beta} = E_{\beta} - FL_{\beta} = E - FL_{\beta}$$

F kuvveti altında zincirin molekülleri kanonik dağılım gösteriyorsa, tek bir molekülün bölünüm fonksiyonu:

$$Z_1 = \sum_{i=1}^2 e^{-\beta E_i} = e^{-\beta(E-FL_{\alpha})} + e^{-\beta(E-FL_{\beta})}$$

N molekül için:

$$Z = (Z_1)^N = \left[e^{-\beta(E-FL_{\alpha})} + e^{-\beta(E-FL_{\beta})} \right]^N$$

zincirin ortalama uzunluğu;

$$\langle L \rangle = \frac{1}{Z} \sum_r L_r e^{-\beta(E-FL_r)}$$

$$\text{Burada; } \sum_r L_r e^{-\beta(E-FL_r)} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial F} \left[\sum_r e^{-\beta(E-FL_r)} \right]$$

$$= -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial Z}{\partial F} \right) \text{ yazılabilir.}$$

Buadan

$$\langle L \rangle = \frac{1}{\beta z} \left(\frac{\partial z}{\partial F} \right)$$

$$\frac{\partial z}{\partial F} = N \left\{ p_L e^{\beta(E - FL_L)} + p_B e^{\beta(E - FL_B)} \right\} z^{N-1/N}$$

olabilir. Buadan yukarıda belirtmiş

$$\langle L \rangle = N \left[\frac{L_L e^{\beta(E - FL_L)} + L_B e^{\beta(E - FL_B)}}{e^{\beta(E - FL_L)} + e^{\beta(E - FL_B)}} \right]$$

$L_L = a$; $L_B = b$ belirtelim

$$\langle L \rangle = N \left[\frac{a e^{\beta(E - Fa)} + b e^{\beta(E - Fb)}}{e^{\beta(E - Fa)} + e^{\beta(E - Fb)}} \right] // \text{ olabilir.}$$

Not: Bu problemin daha uzun çözümünü, İstatistik Fizik, Feri Araydın (Hacettepe Üniversitesi yayımları) ve Statistical Mechanics: An Advanced course with Problems and Solutions, Ryogo Kubo kitaplarında bulabilirsiniz.