פיסיקה תרמית - תרגול 4

• התפלגות בולצמן (פקטור בולצמן)
• פונקציית החלוקה

(I) התפלגות בולצמן

נדון במערכת המורכבת מחלקיק יחיד היכול להמצא במספר רמות אנרגיה (יש הרבה דוגמאות קוונטיות למערכות כאלו).
נשאל מה היחס בין ההסתברות למצוא את החלקיק במצב עם אנרגיה ε_1 לעומת המצב עם אנרגיה ε_2. נניח ונאמר כי מדובר במערכת המצומדת לאמבט חום בטמפ' יסודית τ (טמפ' "אמיתית" $\frac{\tau}{k_B}=T$). בפרט, נדרוש שימור אנרגיה כללית.
זאת אומרת שאם E_R זו האנרגיה של מאגר החום (בשפה המקצועית, לעיתים אומרים "אמבט חום" $R\equiv$Reservoir) ו- E_S זו האנרגיה של המערכת הנקודה ($S\equiv$system), כלומר החלקיק, אז מתקיים $\boxed{E_0=E_R+E_S=const}$.
כעת, נסתמך על כך שהיחס בין ההסתברויות להימצא בכל אחת מהאנרגיות הוא היחס בין מספר המצבים המיקרוסקופיים של מאגר החום, שההנחה היא כאן שכולם שווי הסתברות. כלומר:

$$\boxed{\frac{P_S(\varepsilon_2)}{P_S(\varepsilon_1)}}=\frac{g_R(E_0-\varepsilon_2)}{g_R(E_0-\varepsilon_1)}=\frac{e^{\ln(g_R(E_0-\varepsilon_2))}}{e^{\ln(g_R(E_0-\varepsilon_1))}}=\boxed{\frac{e^{\sigma_R(E_0-\varepsilon_2)}}{e^{\sigma_R(E_0-\varepsilon_1)}}}$$

כאשר g_R היא פונקציית הכפליות של אמבט החום, ו- σ_R זו האנטרופיה (היסודית) של אמבט החום.

מאגר החום זו מערכת מאוד גדולה. לכן, ההסתברות להיות במצב עם אנרגיה שונה מ- E_0 היא קטנה. בעצם מניחים ש- $E_R \gg E_S$, כי אחרת אין משמעות להצמיד

את המערכת למאגר החום מלכתחילה. !

לכן, נוכל לפתח את σ_R סביב E_0 עד סדר ראשון ב-ε.

$$\frac{P_s(\varepsilon_2)}{P_s(\varepsilon_1)} = \frac{e^{\sigma_R(E_0-\varepsilon_2)}}{e^{\sigma_R(E_0-\varepsilon_1)}} = e^{\sigma_R(E_0-\varepsilon_2)-\sigma_R(E_0-\varepsilon_1)} \cong$$

$$\cong e^{\left(\sigma_R(E_0)-\varepsilon_2\cdot\frac{\partial\sigma_R}{\partial E_R}\Big|_{E_R=E_0}\right)-\left(\sigma_R(E_0)-\varepsilon_1\cdot\frac{\partial\sigma_R}{\partial E_R}\Big|_{E_R=E_0}\right)}$$

נשתמש בעובדה שמתקיים $\frac{\partial\sigma}{\partial U}=\frac{1}{\tau}$ ונקבל:

$$\boxed{\frac{P_s(\varepsilon_2)}{P_s(\varepsilon_1)} \cong e^{-\frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{\tau}}}$$

מכאן, ההסתברות להיות במצב עם אנרגיה ε מקיימת:

$$\boxed{P_s(\varepsilon) \propto e^{-\varepsilon/\tau} = e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}}$$

__דוגמא:__ תחנת חלל מורכבת מגליל ברדיוס R_0 המסתובב סביב ציר במהירות זוויתית כזו כך שהתאוצה בשפת תחנת החלל היא כמו בכדור הארץ, קרי g. נתון שבתחנת החלל טמפרטורה אחידה T. מהו היחס בין צפיפות האוויר בציר הגליל לבין הצפיפות בשפה?

__פתרון:__ נדון בחלקיק יחיד. האנרגיה הפוטנציאלית שלו הנובעת מסיבוב תחנת החלל הינו: $\varepsilon = -\frac{1}{2}m\omega^2R^2$

(כך שהכוח הצנטריפוגלי מקיים: $\vec{F}_{cent.} = -\vec{\nabla}\varepsilon = m\omega^2R\hat{R}$).

היחס בין הסיכויים למצוא את החלקיק ברדיוסים שונים:

$$\boxed{\frac{P(R_2)}{P(R_1)}} = e^{-\frac{\varepsilon(R_2)-\varepsilon(R_1)}{KT}} = \boxed{e^{+\frac{m\omega^2}{2KT}(R_2^2-R_1^2)}}$$

בפרט, זה ברור שצפיפות החלקיקים ברדיוס מסויים תהיה פרופורציונית להסתברות למצוא חלקיק בודד באותו הרדיוס. לכן,

$$\frac{n_{(R_2)}}{n_{(R_1)}} = \exp\left[+\frac{m\omega^2}{2k_BT}\left(R_2^2-R_1^2\right)\right]$$

כאשר m זו המסה של חלקיק אוויר בודד.

נציב $R_2=0$, $R_1=R_0$ (שפת הגליל) ונקבל:

$$\boxed{\frac{n_{(R=0)}}{n_{(R=R_0)}}} = \exp\left[-\frac{m\omega^2 R_0}{2k_BT}\right] \underset{\text{מהנתון}}{=} \boxed{e^{-\frac{mg}{2kT}}}$$

II פונקציית החלוקה

נרצה כעת למצוא בדיוק את ההסתברות להימצא במצב עם אנרגיה ε. קבוע הנרמול של פקטור בולצמן צריך להיות כזה שסך ההסתברות תהיה אחד:

$$\boxed{P(s) = \frac{e^{-\varepsilon_s/\tau}}{\sum_{s'} e^{-\varepsilon_{s'}/\tau}}}$$

כאשר הסכימה היא על כל המצבים המיקרוסקופיים האפשריים.

לקבוע הנרמול יש משמעות בפני עצמו. קוראים לו "פונקציית החלוקה" ומסמנים אותו:

$$\boxed{Z = \sum_s e^{-\varepsilon_s/\tau}}$$

במקום לכתוב את Z בתור סכום על כל המיקרו-מצבים, ניתן לכתוב אותה בתור סכום על כל המאקרו-מצבים עם אנרגיות שונות E.

אבל, אז צריכים לקחת בחשבון שלמאקרו-מצב עם אנרגיה E יש סה"כ $g_{(E)}$ מיקרומצבים שתואמים לו (כלומר, יש ניוון בפקטור $g_{(E)}$). לכן:

$$\boxed{Z = \sum_E g_{(E)} e^{-E/\tau}}$$

אם במקרה, לכל המיקרו-מצבים יש אנרגיה שונה, כלומר לכל ערך אפשרי של E מתקיים $g(E)=1$, אז נקבל

$$\boxed{Z=\sum_E e^{-E/\tau}}$$

סה"כ ההסתברות להיות עם אנרגיה E (במאקרו-מצב עם אנרגיה E) היא:

$$\boxed{P(E)=\frac{g(E)e^{-E/k_BT}}{Z}}$$

חשיבות של פונקצ"ית החלוקה נובעת מכך שהיא מאפשרת לחשב את כל הגדלים התרמודינמיים המאקרוסקופיים של המערכת.

לדוגמא: נחשב את האנרגיה הממוצעת:

$$\langle U\rangle=\frac{1}{Z}\sum_E E\cdot g(E)\cdot e^{-E/\tau}=\tau^2\cdot\frac{1}{Z}\sum_E g(E)\cdot\frac{E}{\tau^2}e^{-E/\tau}=$$

$$=\tau^2\cdot\frac{1}{Z}\cdot\frac{\partial}{\partial\tau}\sum_E g(E)e^{-E/\tau}=\tau^2\cdot\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\tau}=$$

$$=\boxed{\tau^2\frac{\partial\ln(Z)}{\partial\tau}=\langle U\rangle}$$

דוגמא: ריץ'-רץ', מודל לפעולה ל-DNA

לריץ'-רץ' יש N חיבורים והוא מצומד למאגר חום בטמפרטורה τ. כל חיבור יכול להיות פתוח או סגור. האנרגיה של מצב פתוח היא ε והאנרגיה של מצב סגור היא 0. הריץ'-רץ' נפתח מלמעלה למטה. ניתן לפתוח חיבור אך ורק אם כל החיבורים שמעליו כבר פתוחים.

(א) מהי פונקצ"ית החלוקה?

(ב) כמה חיבורים פתוחים נראה בממוצע?

6) הוכיחו שמספר החיבורים הפתוחים הממוצע לא תלוי במספר החיבורים הכולל, עבור המקרה בו הטמפ' נמוכה מאוד יחסית לאנרגיה הדרושה לפתיחת כל חיבור:

$\tau \ll \varepsilon$.

פתרון:

~~[illegible]~~

למערכת זו יש בדיוק $N+1$ מצבים אפשריים. אם n זה מספר החיבורים הפתוחים, אז המצבים האפשריים הם $n = 0, 1, 2, 3, \dots, N$. האנרגיה של כל מצב היא $n \cdot \varepsilon$.

לכן:

$$\boxed{Z =} \sum_{n=0}^{N} e^{-\frac{n\varepsilon}{\tau}} = \sum_{n=0}^{N} \left(e^{-\varepsilon/\tau}\right)^n = \boxed{\frac{1 - e^{-\frac{\varepsilon}{\tau}(N+1)}}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}}}$$

אם $\langle U \rangle$ זו האנרגיה הממוצעת, אז:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \langle U \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \tau^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial \tau} = \cancel{\ldots}$$

$$= \frac{\tau^2}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\ln\left(1 - e^{-\frac{(N+1)\varepsilon}{\tau}}\right) - \ln\left(1 - e^{-\varepsilon/\tau}\right) \right] =$$

$$= \frac{\tau^2}{\varepsilon} \cdot \left[\frac{-\frac{(N+1)\varepsilon}{\tau^2} e^{-\frac{(N+1)\varepsilon}{\tau}}}{1 - e^{-(N+1)\varepsilon/\tau}} - \frac{-\frac{\varepsilon}{\tau^2} e^{-\varepsilon/\tau}}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}} \right]$$

$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{e^{-\varepsilon/\tau}}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}} - \frac{(N+1) e^{-(N+1)\varepsilon/\tau}}{1 - e^{-(N+1)\varepsilon/\tau}}}$$

עבור $\tau \ll \varepsilon$: $\Leftarrow e^{-\varepsilon/\tau} \ll 1$

$$\langle n \rangle \simeq e^{-\varepsilon/\tau} - (N+1) \cdot e^{-(N+1)\varepsilon/\tau} \simeq e^{-\varepsilon/\tau} \simeq 0$$

כלומר בממוצע, לא נראה אפילו חיבור אחד פתוח, כי הטמפ' לא מספיקה לפתוח אפילו חיבור אחד.