Elementy fizyki statystycznej

Ćwiczenia nr 8. Rozkład kanoniczny

1. Wyznacz średnią energię u, energię swobodną f oraz entropię s pojedynczego kwantowego oscylatora harmonicznego. Przyjmij, że oscylator jest w równowadze termodynamicznej z wielkim zbiornikiem ciepła o temperaturze T.

   Wskazówki:

   i. Dozwolone poziomy energetyczne kwantowego oscylatora harmonicznego są opisane wzorem: $\varepsilon_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega$, dla $n = 0, 1, 2, \ldots$.

   ii. Suma nieskończonego szeregu geometrycznego jest równa $\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}$, dla $|q| < 1$.

   Odpowiedź:

$$\begin{aligned}
u &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right)\hbar\omega, \\
f &= \frac{1}{2}\hbar\omega + kT\ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}), \\
s &= k\left(\frac{\beta\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} - \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega})\right).
\end{aligned}$$

2. **Model ciała stałego Einsteina, 1907**: Wyznacz średnią energię układu $3N$ niezależnych i rozróżnialnych jednowymiarowych, kwantowych oscylatorów harmonicznych. Ile wynosi pojemność cieplna badanego układu w granicy niskich i wysokich temperatur?

   Wskazówki:

   i. Skorzystaj z rozwiązania poprzedniego zadania.

   ii. Pojemność cieplną można wyznaczyć jako pochodną: $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$, gdzie U jest średnią energią badanego układu.

   Odpowiedź:

$$\begin{aligned}
U &= 3N\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1}\right)\hbar\omega, \\
C_V &= 3N\frac{(\hbar\omega)^2}{kT^2}\frac{e^{\hbar\omega/(kT)}}{(e^{\hbar\omega/(kT)} - 1)^2}, \\
\lim_{T\to 0^+} C_V &= 3N\frac{(\hbar\omega)^2}{kT^2}e^{-\hbar\omega/(kT)}, \\
\lim_{T\to\infty} C_V &= 3Nk.
\end{aligned}$$

3. **Model ciała stałego Debye'a, 1912**: Wyznacz energię wewnętrzną U i pojemność cieplną C_V układu $3N$ niezależnych i rozróżnialnych jednowymiarowych oscylatorów kwantowych. Przyjmij, że liczba oscylatorów o zadanej częstości jest równa: $g(\omega) = \xi\omega^2$ dla $0 < \omega < \omega_0$ oraz $g(\omega) = 0$ dla $\omega > \omega_0$, gdzie $\xi = 9N/\omega_0^3$.

   Przedyskutuj, w jaki sposób C_V zależy od temperatury dla $T \geq 0$ i dla $T \to \infty$. Załóż, że suma statystyczna pojedynczego oscylatora o znanej częstości jest równa: $Z_1(x) = (e^x + e^{-x})^{-1}$, gdzie $x = \beta\hbar\omega/2$.

   Wskazówki:

   i. Należy skorzystać z miltiplikatywności sumy statystycznej.

   ii. Model Debye'a zakłada, że w sieci krystalicznej propagują się fale tak jak w innych ośrodkach. Jednak istnienie obcięcia dla pewnej częstości ω_0 związane jest z tym, że fale o długościach porównywalnych i mniejszych niż długość stałej sieci nie mogą się propagować w ciele stałym.

   Odpowiedź: Dla $T \to 0^+$: $C_V \sim T^3$, zaś dla $T \to \infty$: $C_V = 3Nk$. Porównaj wyniki z rozwiązaniem zad. 2.

4. Wyznacz energię wewnętrzną i pojemność cieplną układu N rozróżnialnych, nieoddziałujących oscylatorów harmonicznych. Załóż, że energia pojedynczego oscylatora jest równa

$$\varepsilon_i = \frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2, \tag{1}$$

   gdzie (x_i, p_i) oznaczają odpowiednio położenie i pęd oscylatora, m jego masę, natomiast ω częstość. Przyjmij, ze temperatura T badanego układu jest znana.

   Wskazówka: Ponieważ rozważane oscylatory są jednowymiarowe, dlatego objętość elementarnej komórki w przestrzeni fazowej badanego układu jest równa h^N, nie zaś h^{3N}.

   Odpowiedź: $\langle E \rangle = NkT$, $C_V = Nk$.