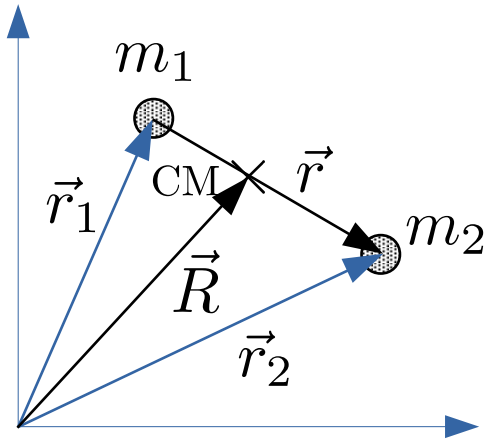


جلسه دوازدهم

مکانیک آماری

محمدرضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه قم
اسفند ۹۸

آنسامبل کانونیک



$$\vec{R} \neq 0$$

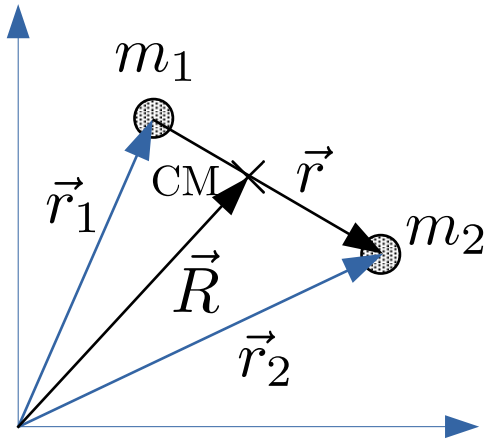
$$E = \underbrace{\frac{1}{2} M \dot{R}^2}_{\text{انتقالی}} + \underbrace{\frac{L^2}{2\mathbb{I}}}_{\text{چرخشی}} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \dot{\rho}^2 + \frac{1}{2} k \rho^2}_{\text{نوسانی}}$$

$$Z = Z_{\text{trans}} Z_{\text{rot}} Z_{\text{vib}}$$

$$Z = \left(\frac{V}{\lambda_{\text{th}}^3} \right) \left(\frac{2\mathbb{I}}{\beta \hbar^2} \right) \left(\frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right)$$

$$U = \frac{3}{2} k_B T + k_B T + \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right)$$

آنسامبل کانونیک



$$\vec{R} \neq 0$$

$$E = \underbrace{\frac{1}{2} M \dot{R}^2}_{\text{انتقالی}} + \underbrace{\frac{L^2}{2\mathbb{I}}}_{\text{چرخشی}} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \dot{\rho}^2 + \frac{1}{2} k \rho^2}_{\text{نوسانی}}$$

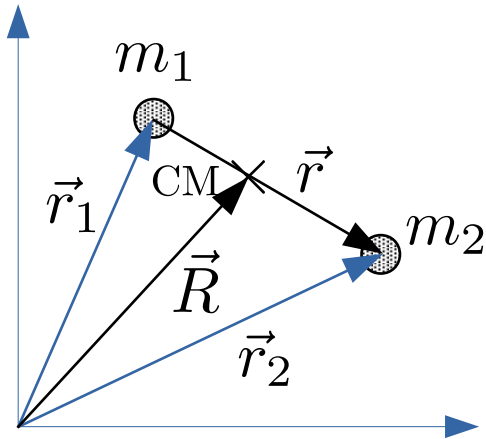
$$Z = Z_{\text{trans}} Z_{\text{rot}} Z_{\text{vib}}$$

$$Z = \left(\frac{V}{\lambda_{\text{th}}^3} \right) \left(\frac{2\mathbb{I}}{\beta \hbar^2} \right) \left(\frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right)$$

$$U = \frac{3}{2} k_B T + k_B T + \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right)$$

در دماهای بالا $U \simeq \frac{3}{2} k_B T + k_B T + \frac{1}{2} \hbar \omega + k_B T \simeq \frac{7}{2} k_B T + \frac{1}{2} \hbar \omega$

آنسامبل کانونیک



$$\vec{R} \neq 0$$

$$E = \underbrace{\frac{1}{2} M \dot{R}^2}_{\text{انتقالی}} + \underbrace{\frac{L^2}{2\mathbb{I}}}_{\text{چرخشی}} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \dot{\rho}^2 + \frac{1}{2} k \rho^2}_{\text{نوسانی}}$$

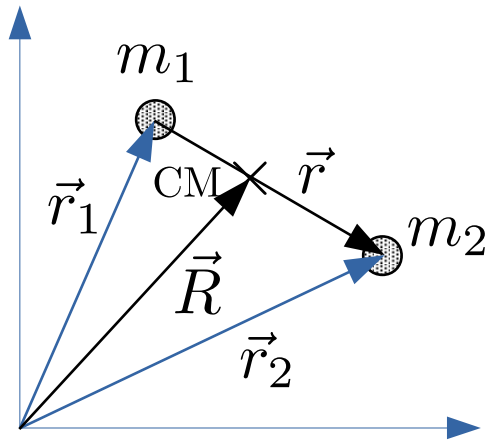
$$Z = Z_{\text{trans}} Z_{\text{rot}} Z_{\text{vib}}$$

$$Z = \left(\frac{V}{\lambda_{\text{th}}^3} \right) \left(\frac{2\mathbb{I}}{\beta \hbar^2} \right) \left(\frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right)$$

$$C_V = \frac{3}{2} k_B + k_B + k_B (\beta \hbar \omega)^2 \frac{e^{-\beta \hbar \omega}}{(1 - e^{-\beta \hbar \omega})^2}$$

$$\text{در دماهای بالا} \quad C_V \simeq \frac{3}{2} k_B + k_B + k_B \simeq \frac{7}{2} k_B$$

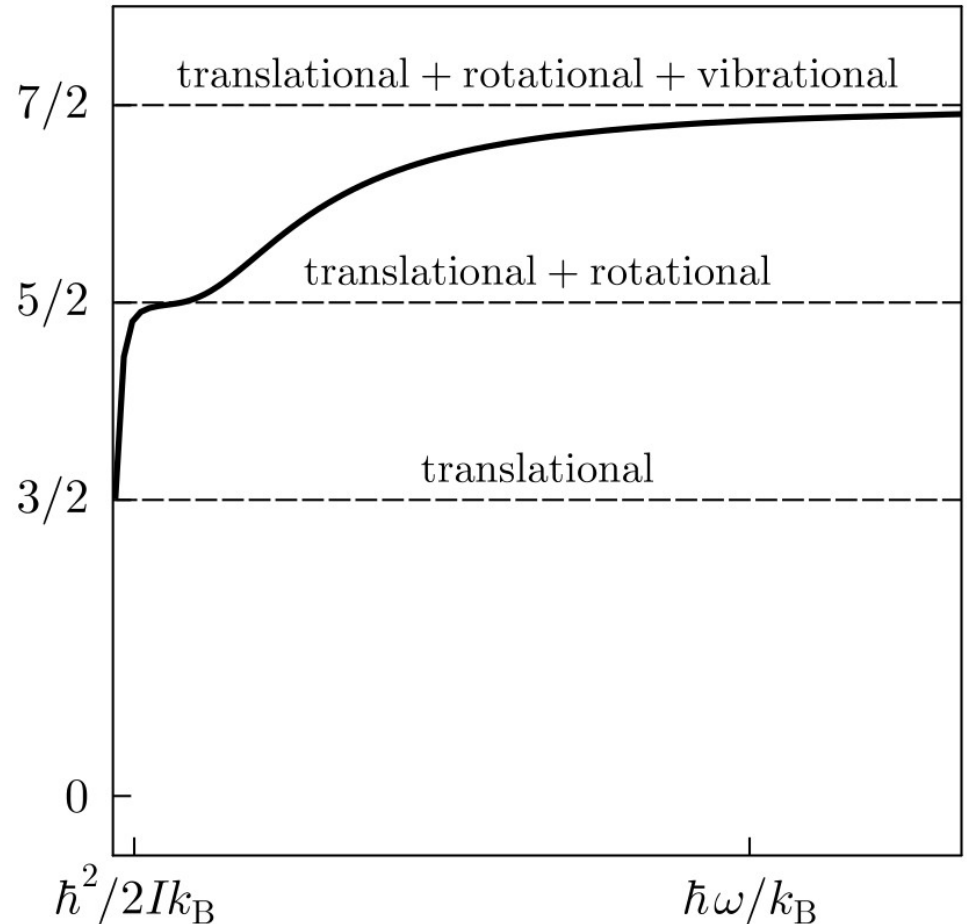
آنسامبل کانونیک



$$E = \underbrace{\frac{1}{2} M \dot{R}^2}_{\text{انتقالی}} + \underbrace{\frac{L^2}{2I}}_{\text{چرخشی}} + \underbrace{\frac{1}{2} \mu \dot{\rho}^2 + \frac{1}{2} k \rho^2}_{\text{نوسانی}}$$

نتایج بدست آمده با اصل همپاری
در دماهای بالا هم ارز است.

C_V / R



T

آنسامبل کانونیک

یک اتم در بلور دو تراز انرژی بصورت

$$\epsilon_2 = \Delta \quad \text{—————} \quad g_2$$

$$\epsilon_1 = 0 \quad \text{—————} \quad g_1$$

که در آن g_1 و g_2 تبگهگنی
ترازهای انرژی اند.

$$Z = \sum_k g_k e^{-\beta \epsilon_k}$$

$$Z = g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}$$

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln(g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta})$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V$$

$$S = k_B \ln(g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}) + k_B T \left(\frac{-1}{k_B T^2} \right) \frac{-\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}$$

$$S = k_B \ln(g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}) + \left(\frac{1}{T} \right) \frac{\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}$$

آنسامبل کانونیک

یک اتم در بلور دو تراز انرژی بصورت

$$\epsilon_2 = \Delta \quad \text{————} \quad g_2$$

$$\epsilon_1 = 0 \quad \text{————} \quad g_1$$

$$Z = \sum_k g_k e^{-\beta \epsilon_k}$$

$$Z = g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}$$

که در آن g_1 و g_2 تبگهگنی ترازهای انرژی اند.

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln(g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta})$$

$$S = k_B \ln(g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}) + \left(\frac{1}{T}\right) \frac{\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}$$

$$\xrightarrow{\times T} \quad ST = k_B T \ln(g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}) + \frac{\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}$$

$$ST = -F + \frac{\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}, \quad ST = -F + U \Rightarrow U = \frac{\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}$$

آنسامبل کانونیک

یک اتم در بلور دو تراز انرژی بصورت

$$\epsilon_2 = \Delta \quad \text{—————} \quad g_2$$

$$\epsilon_1 = 0 \quad \text{—————} \quad g_1$$

که در آن g_1 و g_2 تبگهگنی
ترازهای انرژی اند.

$$Z = \sum_k g_k e^{-\beta \epsilon_k}$$

$$Z = g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}$$

$$U = \frac{\Delta g_2 e^{-\beta \Delta}}{g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta}}$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta}$$

$$C_V = \frac{g_1 g_2 \Delta^2 e^{-\beta \Delta}}{k_B T^2 (g_1 + g_2 e^{-\beta \Delta})^2}$$

آنسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = DOS(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon(k) - \epsilon)$$

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \epsilon\right), \quad g(\omega) = \sum_k \delta(ck - \omega)$$

$$\delta[f(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_0^i)}{|f'(x_0^i)|}, \quad f(x_0^i) = 0$$

گروه فیزیک

آنسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \epsilon\right),$$

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \sum_k \delta(k - k_0), \quad k_0 = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$$

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k : \quad g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \delta(k - k_0)$$

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \delta(k - k_0) 4\pi k^2 dk = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k_0^2$$

$$g_{3D}(\epsilon) = \frac{V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$$

طوره طر جمعیه سه بعد

آنسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \epsilon\right),$$

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \sum_k \delta(k - k_0), \quad k_0 = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$$

$$\sum_k \rightarrow \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2k : \quad g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2k \delta(k - k_0)$$

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \delta(k - k_0) 2\pi k dk = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{A}{(2\pi)^2} 2\pi k_0$$

$$g_{2D}(\epsilon) = \frac{A}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2}$$

طوره طر جمعیه طو پوند

انسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \epsilon\right),$$

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \sum_k \delta(k - k_0), \quad k_0 = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$$

$$\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk : \quad g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{L}{2\pi} \int dk \delta(k - k_0)$$

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \frac{L}{2\pi} \int_0^\infty \delta(k - k_0) dk = \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$$

$$g_{1D}(\epsilon) = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$$

طوره طور جمعیه پیک پوند

آنسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g_{3D}(\epsilon) = \frac{V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$$

$$Z = \int_0^{\infty} g(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$Z = \int_0^{\infty} g_{3D}(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = \frac{V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta^{3/2}}$$

$$Z = \frac{V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta^{3/2}} = \frac{V}{\lambda_{th}^3}, \quad \lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2m\pi k_B T}}$$

فردہ فرد جمعہ سہ پوند

آنسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g_{2D}(\epsilon) = \frac{A m}{2\pi \hbar^2}$$

$$Z = \int_0^{\infty} g(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$Z = \int_0^{\infty} g_{2D}(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = \frac{A m}{2\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = \frac{1}{\beta}$$

$$Z = \frac{A m}{2\pi \hbar^2} \frac{1}{\beta} = \frac{A}{\lambda_{th}^2}, \quad \lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2m\pi k_B T}}$$

فردہ فرد چھپہ فو پوند

آنسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g_{1D}(\epsilon) = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$$

$$Z = \int_0^{\infty} g(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$Z = \int_0^{\infty} g_{1D}(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = 2\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$Z = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} 2\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{L}{\lambda_{th}}, \quad \lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2m\pi k_B T}}$$

فردہ فرد جمعہ یک بعد

انسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = DOS(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon(k) - \epsilon)$$

$$\epsilon(k) = 2t \cos ka, \quad -\pi/a \leq k \leq \pi/a$$

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - 2t \cos ka),$$

$$\delta[f(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_0^i)}{|f'(x_0^i)|}, \quad f(x_0^i) = 0$$

$$f(k) = 2t \cos ka - \epsilon$$

انسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta(2t \cos ka - \epsilon),$$

$$\epsilon - 2t \cos k_0 a = 0 \Rightarrow \cos k_0 a = \frac{\epsilon}{2t}$$

$$\sum_k \rightarrow \frac{a}{2\pi} \int dk : \quad g(\epsilon) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{\delta(k - k_0)}{|f'(k_0)|}$$

$$f'(k_0) = 2ta \sin k_0 a$$

$$g(\epsilon) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{\delta(k - k_0)}{|2ta \sin k_0 a|}$$

انسامبل کانونیک

چگالی حالتها (Density of States)

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta(2t \cos ka - \epsilon),$$

$$\epsilon - 2t \cos k_0 a = 0 \Rightarrow \cos k_0 a = \frac{\epsilon}{2t}$$

$$g(\epsilon) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{\delta(k - k_0)}{|2ta \sin k_0 a|}$$

$$\sin k_0 a = \frac{\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}}{2t}$$

$$g(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}}$$