Termodynamika – Domácí úkol # 05

Domácí úkol odevzdejte do 14.12.2021

Ve všech příkladech uvažujte, že se fyzikální systémy nachází v kontaktu s tepelným rezervoárem o teplotě T.

1. **Zip**
   V zipu se nachází N zubů; každý zub se může nacházet ve stavu, kdy je zapnutý s nulovou energií, nebo odepnutý s energií ε. Zip se odepíná pouze z jedné strany (řekněme z leva) a n-tý zub se může odepnout pouze tehdy, jsou-li již odepnuty zuby $(1,2,\cdots,n-1)$. (Tento model se někdy používá pro molekuly DNA).

   (a) Najděte partiční funkci.

   (b) Spočtěte střední hodnotu počtu odepnutých zubů $\langle n\rangle$.

   Řešení: Celá soustava může nabývat energií $0,\varepsilon,2\varepsilon,\dots N\varepsilon$. Statistickou sumu pak můžeme napsat ve tvaru

$$Z=\sum_{n=0}^{N}\exp\left(-\frac{n\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)=\frac{1-\exp\left(-\frac{N\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}{1-\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)},\tag{1}$$

   protože se jedná o konečnou geometrickou řadu. Střední hodnotu počtu odepnutých zubů spočítáme snadno pomocí sumy

$$\langle n\rangle=\sum_{n=0}^{N}n\cdot w_n,\tag{2}$$

   která vyjde ve tvaru

$$\langle n\rangle=\frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}{1-\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}-\frac{(N+1)\exp\left(-\frac{(N+1)\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}{1-\exp\left(-\frac{(N+1)\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}.\tag{3}$$

2. **Řetízek**
   Uvažte jednorozměrný řetízek s články, který každý může být ve stavu s energií buď ε_1, nebo ε_2. Spočtěte partiční funkci Z_N a ukažte odsud, že

$$Z_N=Z_1^N.$$

   Za předpokladu, že ve stavu ε_1 má článek délku l_1 a ve stavu ε_2 má článek délku l_2 spočtěte střední délku řetízku $\langle L\rangle$.

   Řešení: Předpokládejme, že ve stavu 1 se nachází n článků, ve stavu 2 potom $N-n$ článků řetízku. Musíme ještě zjistit, kolik možných konfigurací může nabývat energie $E=n\varepsilon_1+(N-n)\varepsilon_2$. To je jednoduchá kombinatorika: nejprve z N článků musíme vybrat n do energiové hladiny 1 a zbylých $N-1$ do energiové hladiny 2, potom můžeme statistickou sumu napsat jako

$$Z=\sum_{n=0}^{N}\binom{N}{n}\exp\left(-\frac{n\varepsilon_1}{k_\mathrm{B}T}\right)\cdot\binom{N-n}{N-n}\exp\left(-\frac{(N-n)\varepsilon_2}{k_\mathrm{B}T}\right).\tag{4}$$

   jelikož je druhé kombinační číslo rovno jedné, dostáváme binomickou řadu, která je rovna

$$Z=\left[\exp\left(-\frac{n\varepsilon_1}{k_\mathrm{B}T}\right)+\exp\left(-\frac{n\varepsilon_2}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]^N.\tag{5}$$

   Tento výraz dokazuje, že partiční funkci pro N částic lze zapsat jako partiční funkci jedné částice umocněnou na N. Střední hodnotu délky můžeme spočítat přes střední hodnotu délky jednoho článku, který je roven

$$\langle L_1\rangle=\frac{l_1\exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_\mathrm{B}T}\right)+l_2\exp\left(-\frac{\varepsilon_2}{k_\mathrm{B}T}\right)}{\exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_\mathrm{B}T}\right)+\exp\left(-\frac{\varepsilon_2}{k_\mathrm{B}T}\right)},\tag{6}$$

pokud je článků N, tak potom se jednotlivé střední hodnoty sečtou

$$\langle L_1 \rangle = N \frac{l_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_\mathrm{B} T}\right) + l_2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_2}{k_\mathrm{B} T}\right)}{\exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_\mathrm{B} T}\right) + \exp\left(-\frac{\varepsilon_2}{k_\mathrm{B} T}\right)}. \tag{7}$$

3. **Atom vodíku**
   Energiové hladiny vodíku jsou dány:

$$E(n) = -R_\infty \frac{1}{n^2}, \tag{8}$$

   určete partiční funkci. Diskutujte výsledek.
   Řešení: Partiční funkce je rovna

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} 2n^2 \exp\left(\frac{R_\infty}{n^2 k_\mathrm{B} T}\right). \tag{9}$$

   Na první pohled je jasné, že argument exponenciály jde k nule, tj. samotná exponenciála konverguje k jedné, degenerace v nekonečnu diverguje, takže i celá suma diverguje. Toto je nefyzikální případ, v reálných případech je vodík prostorově omezen, takže nemůže mít nekonečně mnoho orbitalů, suma tedy je konečná a nediverguje.