Kjörgas

Óvíxlverkandi gas í rúmmáli $V = L^3$

Eitt atóm í kassa (fjölgum síðar)

Lýst með jöfnu Schrödingers

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi = \varepsilon\psi$$

sístæð ástönd

Veljum kassann í fyrsta teningi kartíska hnitakerfisins

$$[0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]\ , \quad L_i = L$$

Krefjumst jaðarskilyrða

$\psi(x,y,z) = 0$ á jaðrinum

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}\psi(x,y,z) = \varepsilon\psi(x,y$$

Athugum lausn á forminu

$$\psi(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$$

Innsetning í jöfnu Schrödingers gefur þá

(2)

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}\psi = -\frac{2M\mathcal{E}}{\hbar^2}\psi$$

$$YZX'' + XZY'' + XYZ'' + \frac{2M\mathcal{E}}{\hbar^2}XYZ = 0$$

eða

$$\frac{X''}{X}+\frac{Y''}{Y}+\frac{Z''}{Z}+\frac{2M\mathcal{E}}{\hbar^2}=0$$

gildir fyrir öll hnit (x,y,z) → hljóta að vera fastar

$$\left.\begin{aligned} X'' + k_x^2 X &= 0\\ Y'' + k_y^2 Y &= 0\\ Z'' + k_z^2 Z &= 0\end{aligned}\right\}$$

setjum

$$\rightarrow -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 + \frac{2M\mathcal{E}}{\hbar^2} = 0$$

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2M}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$$

lausn $\underline{X}'' + k_x^2 \underline{X} = 0$ sem uppfyllir $\underline{X}(0), \underline{X}(L) = 0$

er $\sin(k_x x)$ og $k_x = \frac{n_x \pi}{L}$ því þá er

$$\sin(k_x L) = \sin(n_x \pi) = 0$$

ef $n_x = 0, 1, 2, \dots$

en $n_x = 0$ gefur ekki normanlega lausn $\rightarrow$ $n_x = (1, 2, 3, \dots)$

Lausn er því

$$\psi(x,y,z) = A \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

A er normunarfasti og eigingildin

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \underbrace{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}_{\text{skammtatölur ástandsins}}$$

Kórsumman fyrir eitt atóm er

$$Z_1 = \sum_{n_x n_y n_z} \exp\left\{ - \overbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ML^2\tau}}^{\alpha^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)\right\}$$

Gerum ráð fyrir stóru kerfi $\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ML^2} \ll \tau \right)$ með þétt róf

$$\rightarrow \quad Z_1 = \int_0^\infty dn_x\, dn_y\, dn_z \exp\left[-\alpha^2\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)\right]$$

$$= \left[\int_0^\infty dn_x \exp\left(-\alpha^2 n_x^2\right)\right]^3 = \left(\frac{1}{\alpha}\right)^3 \left[\int_0^\infty dx\, e^{-x^2}\right]^3$$

$$= \frac{\pi^{3/2}}{8\alpha^3} = \frac{V}{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{M\tau}\right)^{3/2}} = n_Q V = \frac{n_Q}{n}$$

$n = \frac{1}{V}$

$n = \frac{1}{V}$ þéttleiki atóma

$$n_Q = \left(\frac{M\tau}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$ skammta þéttleikinn

Munum þó að við notuðum skammta fræði hér, en eitt atóm

litill þéttleiki

Ef $\frac{n}{n_Q} \ll 1$ þá er gasið sígilt

er þéttleikinn þegar eitt atóm er á tening með de Broglie bylgjulengd

Kjörgas er skilgreint sem gas óvíxlverkandi ~~sígildra~~ atóma með sígildan þéttleika

Meðal orkan

$$U = \frac{\sum_n \varepsilon_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{\tau}}}{Z_1} = \tau^2 \left(\frac{\partial \ln Z_1}{\partial \tau} \right)$$

Við höfðum

$$Z_1 = \frac{V}{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{M\tau}\right)^{3/2}} \rightarrow \ln Z_1 = + \frac{3}{2} \ln \tau + \text{liðir óháðir } \tau$$

$$\rightarrow \boxed{U = \tau^2 \left(\frac{\partial \ln Z_1}{\partial \tau} \right) = \frac{3}{2}\tau = \frac{3}{2} k_B T} \quad \text{ef } \tau = k_B T$$

Hvers vegna aðeins eitt atóm, lítill þéttleiki með $\frac{n}{n_Q} \ll 1$?

$n_Q = \left(\frac{M\tau}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$ verður lítið þegar $\tau \rightarrow 0$

Fjöleindafræði!

N atóm gass

Ef við þekktum atómin í sundur

$$Z_N = Z_1(1) \cdot Z_1(2) \cdot \dots \cdot Z_1(N)$$

því kórsumman inniheldur allar mögulegar uppraðanir

Fjöleinda skammtafræði

↳ öll atóm einnar gastegundar eru eins!

því koma fyrir margar uppraðanir sem eru endurtekning

Seinna munum við nýta niðurstöður fjöleindafræði til að leiða út eiginleika skammtagasa — 6. kafli þangað til notum við fyrir kjörgas $(n \ll n_Q)$

$$\boxed{Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^{\,N} = \frac{1}{N!} (n_Q V)^N}$$

of taldar endurtekningar teknar út!

<u>Kjörgas:</u>

$$\boxed{U = \tau^2 \left(\frac{\partial \ln Z_N}{\partial \tau} \right) = \frac{3}{2} N \tau = \frac{3}{2} N k_B T}$$

Frjálsa orka Helmholtz

$$F = -\tau \ln Z_N$$

$$= -\tau \ln Z_1^N + \tau \ln N!$$

$$\approx -\tau N \ln\left\{\left(\frac{M\tau}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} V\right\} + \tau N \ln N - \tau N$$

og þrýstingurinn

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_\tau = -p$$

$$\rightarrow p = \tau N / V$$

eða $\boxed{pV = \tau N}$

$$n_Q = \left(\frac{M\tau}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

ástandsjafna kjörgass

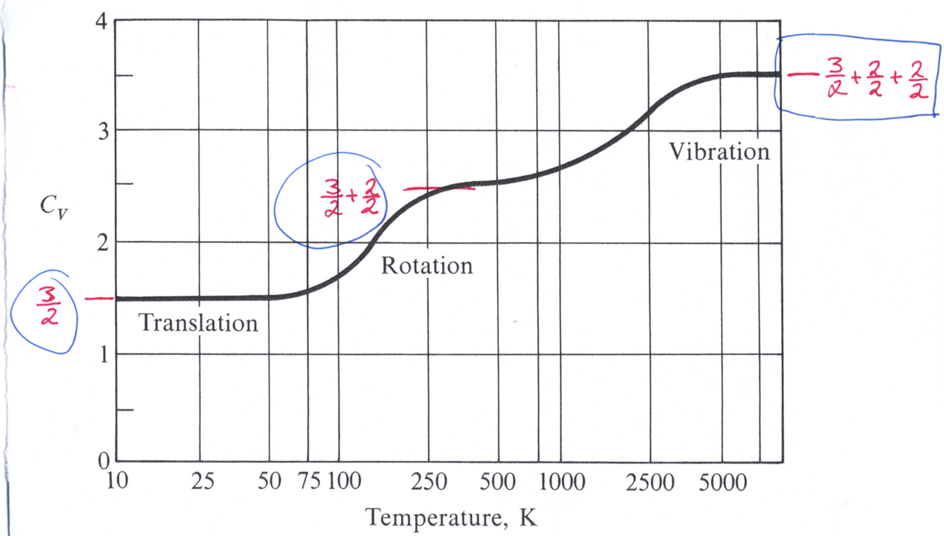
$$\boxed{\sigma = -\left(\frac{\partial F}{\partial \tau}\right)_V = N\left[\ln\left(\frac{n_Q}{n}\right) + \frac{5}{2}\right]}$$

Sackur-Tetrode, Kjörgas

Jafnskipting orku

tvíatóma sameind Kjörgas H_2

Equipartition



Hver frelsisgráða gefur $\frac{1}{2}$