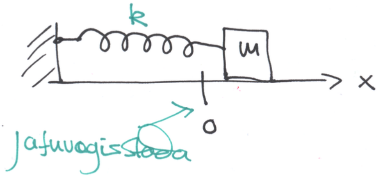
Jafnskipting orku

sígild safneðlisfræði við nógu hátt T þ.a $k_B T \gg \hbar\omega$
þ.s. $\hbar\omega$ er bilið milli orkustig (skjálla vegna skammtafræði)

skoðum t.d. massa í gormi



$$E = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} k x^2 = E_{kin} + E_{pot}$$

Hreintóna sveifill ef ekkert viðnám er og gormurinn skv. lögmáli Hooks

Gerum ráð fyrir að m víxlverki við varmageymi með T (fast)
Hve mikil er meðal orkan á frelsisgráðu

Hér eru tvær stærðir, E_{kin} og E_{pot}

Athugum frelsisgráðu með

$$E = \alpha x^2$$

Sígilt kerfi -> Boltzmanns-dreifing. líkindin á útslagi x eru

$$P(x) = \frac{e^{-\beta\alpha x^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\beta\alpha x^2}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

og meðal orkan er því

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x)\, E(x)$$

$$= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\beta\alpha x^2} \alpha x^2}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\beta\alpha x^2}}$$

$$\langle E \rangle = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{\alpha\beta}}}{2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha\beta^3}}} = \frac{1}{2\beta}$$

$$= \frac{1}{2} k_B T$$

$$\boxed{\text{meðal orka frelsisgráðu með fleygboginn orkuferil er } \tfrac{1}{2} k_B T \text{ óháð krappa fleygbogans, } \alpha \text{ hér}}$$

vissulega þarf að gilda

$k_B T \gg \hbar\omega$ þ.s.

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ eða $\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{2m}}$

Fyrir kerfi með n óháðar frelsisgráður með fleygboga orkuferla

$$E = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i^2$$

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i^2 \right) \exp\left\{ -\beta \sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j^2 \right\}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \exp\left\{ -\beta \sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j^2 \right\}}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx_i \, \alpha_i x_i^2 \exp\left\{ -\beta \alpha_i x_i^2 \right\}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_i \exp\left\{ -\beta \alpha_i x_i^2 \right\}} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \langle x_i^2 \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} k_B T = \frac{n}{2} k_B T$$

Jafndreifing orku

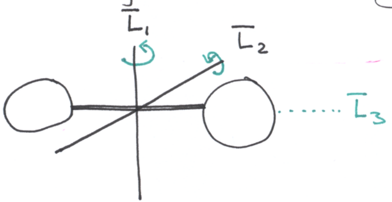
Ef orka sígilds kerfis er summa n fleygboga sveiflu-hátta og kerfið er tengt varmageymi með T þá er meðalorka kerfisins $n \cdot \frac{1}{2} k_B T$

Við herbergishita er $k_B T \sim 25\,\text{meV}$ ákaflega lítil orka, en ef kerfið er nógu lítið (smár massi) þá geta sveiflurnar verið miklar (t.d. létt atóm í sameind)

Þrívítt einatóma gas (kjörgas)

$$E = \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2} m v_i^2 \quad \rightarrow \langle E \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

Snúningur tvíatóma gass



þrír höfuðásar

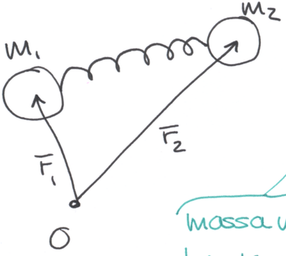
$$E = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}mv_z^2 + \frac{L_1^2}{2I_1} + \frac{L_2^2}{2I_2} + \cancel{\frac{L_3^2}{2I_3}}$$

en $I_3 \ll I_1, I_2$ — hverfitregður

↳ er snúningur um I_3 ekki virkjaður fyrir venjulegt T

$$\langle E \rangle = 5 \cdot \frac{1}{2} k_B T = \frac{5}{2} k_B T$$

Titringshættir í tvíatóma gasi



$$E = \frac{1}{2}M\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right) + \overbrace{\frac{L_1^2}{2I_1} + \frac{L_2^2}{2I_2}}^{\text{snúningur}}$$

$$+ \underbrace{\frac{1}{2}\mu\left(\dot{\bar r}_1-\dot{\bar r}_2\right)^2}_{\text{innbyrðis hreyfiorka}} + \underbrace{\frac{1}{2}k\left\{|\bar r_1-\bar r_2|-l_0\right\}^2}_{\text{fjaðurorka}}$$

massamiðja hreyfiorka

jafnvægis lengd

Innbyrðis hreyfiorka

$$\mu = \frac{m_1 m_1}{m_1+m_2}$$

skertur massi

$$\langle E\rangle = 7\cdot\frac{1}{2}k_BT$$

$$= \frac{7}{2}k_BT$$

því gildir að fyrir tvíatóma sigilt kjörgas

C_v á mól er $\frac{7}{2}R$ — ekki einungis gas

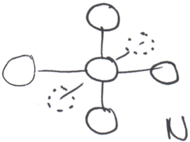
fyrir sigilt kjörgas með f- frelsisgráður

$$C_v \text{ á mól er } \frac{f}{2}R$$

$$C_p \text{ á mól er } \left(\frac{f}{2}+1\right)R$$

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} = \frac{\left(\frac{f}{2}+1\right)R}{\frac{f}{2}R} = 1 + \frac{2}{f}$$

Teningskristallur



N-atóm

6 næstu grannar
hvert tengi

hvert tengi tengir 2 atóm

$\rightarrow$ 3N tengi

hvert hefur hreyfiorku
+ fjaðurorku $\rightarrow 2f$

$$\rightarrow \langle E \rangle = 3N \cdot \overset{f}{2} \cdot \tfrac{1}{2} k_B T = 3N k_B T$$

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3N k_B \qquad R = N_A k_B$$

→ fyrir eitt mól af kristalli: $C = 3 N_A k_B = 3R$

Varnaglar

Sígilt kerfi: $k_B T \gg \hbar\omega$ þ.s. róf $\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})$

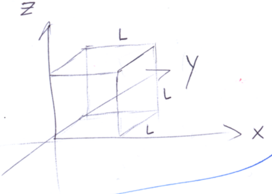
$k_B T$ má samt ekki verða svo hátt að mistóna sveiflur örvist

Safneðlisfræði kjörgass

Þurfum að kanna ástönd kjörgass til að geta summað yfir þau í kórsummunni

Engin víxlverkun atómanna eða sameindanna

Hugsum tening $L \times L \times L$, harðir veggir



$$\psi(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)$$

k_x k_y k_z eru skammtatölur sem ákvarða ástandið

Bylgjufallið er 0 á öllum jöðrunum

$$\rightarrow \sin(k_i L) = 0, \quad i = x, y, z$$

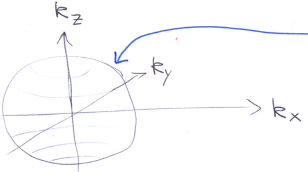
$$\rightarrow k_i = \frac{n_i \pi}{L} \qquad n \in \mathbb{N}$$

Orka ástandanna er

$$E(k_x,k_y,k_z) = E(n_x,n_y,n_z) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

þar sem $\hbar k_i$ má líta á sem skriðþunga

Óháðar eindir við lágt T munu sitja í lægstu ástöndunum í jafnvægi $\longrightarrow$ mikilvægt ~~að~~ þekkja skriðþungarúmið (k_x,k_y,k_z)



hver kúluskel í skriðþunga rúminu er við fasta orku því geisli hennar er $\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2} \sim k$

því vaknar spurning: hve mörg ástönd eru á bilinu $(k, k+dk)$

$k_i = \frac{n_i\pi}{L}$ L er stórsæ stærð, fjöldi atóma er hár $\rightarrow$ punktar í skriðþungarúminu liggja mjög þétt þéttleikann má skoða í skriðþungarúminu m.t.t. k eða m.t.t. orku E (notum fyrst k)

Ástandsþéttleiki

$$g(k)dk = \frac{\text{rúmmál kúluskeljar á bili } (k, k+dk)}{\text{rúmmál um hvern } k\text{-punkt}}$$

$$= \frac{\frac{1}{8} \times 4\pi k^2 dk}{(\pi/L)^3} = \frac{V k^2 dk}{2\pi^2} \qquad V = L^3$$

notum bara hér

$n \in \mathbb{N}$

k_i eru jákvæð

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(k)$$

Einnar eindar kórsumma

$$Z_1 = \int_0^\infty e^{-\beta E(k)} g(k)\, dk$$

eigum eftir að ráða mögulega sætni ástanda, eins atui, ...

$$Z_1 = \int_0^\infty e^{-\beta\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \frac{Vk^2 dk}{2\pi^2} = \frac{V}{\hbar^3}\left(\frac{mk_BT}{2\pi}\right)^{3/2} = V n_Q$$

þar sem n_Q er skammtaþéttleikinn $n_Q = \frac{1}{\hbar^3}\left(\frac{mk_BT}{2\pi}\right)^{3/2}$

því má skilgreina varmabylgjulengd

$$\lambda_{th} = n_Q^{-1/3} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

og því $\boxed{Z_1 = \frac{V}{\lambda_{th}^3}}$ í réttu hlutfalli við V

og $\sim T^{3/2}$