

بسمه تعالی

امتحان میان‌ترم مکانیک آماری پیش‌رفته دانشگاه الزهراء - آذر ۱۳۸۲

استفاده از جزوه و هر کتاب دیگری غیر از کتاب Pathria ممنوع است.

۱- گازی شامل N اتم به جرم m در دمای T در پتانسیل

$$V(x, y, z) = \begin{cases} ax^2 + by^2 + mgz & z \geq 0 \\ \infty & z \leq 0 \end{cases}$$

قرار دارد.

الف - انرژی کلی گاز چه قدر است؟

ب - ظرفیت گرمایی گاز چه قدر است؟

حل- الف - در محاسبه‌ی انرژی کل ابتدا انرژی متوسط هر کدام از اتم‌ها را به دست می‌آوریم. برای محاسبه‌ی انرژی متوسط هر کدام از اتم‌ها لازم است متوسط

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + ax^2 + by^2 + mgz$$

را به دست آوریم. متوسط پنج جمله‌ی اول به سادگی از قضیه‌ی هم‌پارش به دست می‌آید و متوسط جمله‌ی آخر عبارت است از

$$\overline{mgz} = \frac{\int_0^\infty dz mgz e^{-\beta mgz}}{\int_0^\infty dz e^{-\beta mgz}} = kT$$

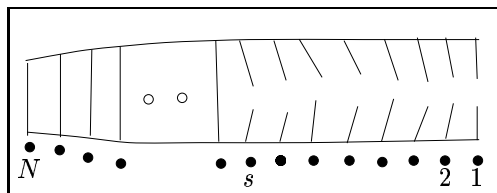
بنا بر این انرژی کل عبارت است از

$$U = N\overline{E} = N(kT + 5\frac{kT}{2}) = \frac{7NkT}{2}$$

ب -

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{7Nk}{2}$$

۲- یک ملکول DNA شامل دو رشته اتم است که مطابق شکل زیر با N اتصال به هم مربوط آند. دمای سیستم T است.



هر اتصال تنها وقتی بریده می شود که تمام اتصالاتی سمت راست آن بریده شده باشند. ملکول نشان داده شده در شکل در حالت s اتصال بریده است. برای بریدن هر اتصال انرژی ϵ لازم است. رابطه ای برای تعداد متوسط اتصالاتی که بریده نشده اند به دست آورید.

حل - به ازای هر اتصال بریده انرژی ϵ لازم است و حداکثر انرژی لازم $N\epsilon$ است. تابع پارش عبارت است از

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \epsilon} = \frac{1 - e^{-\beta(N+1)\epsilon}}{1 - e^{-\beta\epsilon}}$$

انرژی متوسط برابر است با

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_{n=0}^N n \epsilon e^{-\beta n \epsilon} = -\frac{\partial Q}{\partial \beta} \\ &= \epsilon \frac{(N+1)e^{-\beta(N+1)\epsilon} - Ne^{-\beta(N+2)\epsilon} - e^{-\beta\epsilon}}{(1 - e^{-\beta\epsilon})^2} \end{aligned} \quad (1)$$

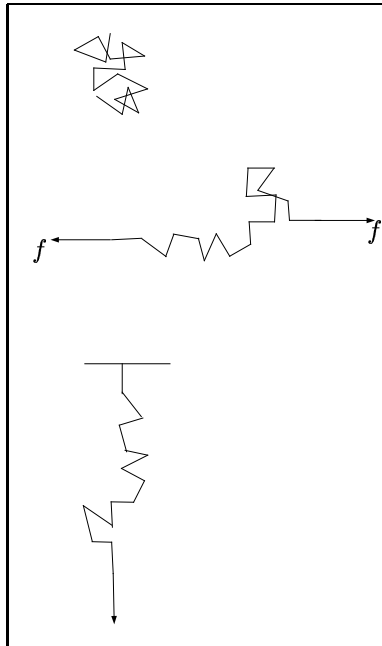
تعداد متوسط اتصالاتی بریده شده

$$\bar{s} = \frac{\bar{E}}{\epsilon} = \frac{(N+1)e^{-\beta(N+1)\epsilon} - Ne^{-\beta(N+2)\epsilon} - e^{-\beta\epsilon}}{(1 - e^{-\beta\epsilon})^2}$$

و تعداد متوسط اتصالاتی بریده نشده برابر است با

$$N - \bar{s} = N - \frac{\bar{E}}{\epsilon}$$

- ۳- الف - بردار \vec{A} با طولی ثابت در نظر بگیرید. زاویه‌ای که این بردار با محور x می‌سازد را θ می‌گیریم. فرض کنید θ کاملاً تصادفی باشد. احتمال آن که مولفه‌ی x بردار بین A_x و $A_x + dA_x$ باشد چقدر است؟
- یک زنجیره‌ی پلیمر شامل $N \gg 1$ قطعه است که طول هر کدام d است. هر قطعه آزادانه می‌تواند دوران کند. دمای سیستم T است.
- ب- متوسط طول پلیمر \bar{R} و متوسط مجذور طول پلیمر $\overline{R^2}$ را به دست آورید.
- ج- فرض کنید در زنجیره‌ی بخش قبل نیروی f به دو انتهای آن وارد می‌شود. متوسط مجذور طول پلیمر $\overline{R^2}$ را به دست آورید.
- د- انتروپی مربوط به بخش (ب) را به دست آورید.
- ه- زنجیره‌ی بخش (الف) را از یک سرش در یک میدان گرانشی ثابت آویزان کرده‌ایم. جرم هر قطعه از پلیمر m است. متوسط طول پلیمر \bar{R} بر حسب دما چیست؟



- حل - الف - در صورت مسئله آمده است که θ کاملاً تصادفی است، بنا بر این احتمال آن که زاویه‌ی \vec{A} با محور x بین θ و $\theta + d\theta$ باشد برابر است با

$$\rho(\theta)d\theta = \frac{1}{2\pi}d\theta.$$

- اما $A_x = A \cos \theta$ است و $dA_x = A \sin \theta d\theta$. احتمال آن که A_x بین A_x و $A_x + dA_x$ باشد، عبارت است از

$$\Gamma(A_x)dA_x = 2 \frac{1}{2\pi} \frac{dA_x}{|A \sin \theta|} = \frac{dA_x}{\pi |A \sin \theta|}.$$

علامت قدر مطلق برای آن است که احتمال باید مثبت باشد و ضریب 2 به خاطر آن است که هر مقدار A_x به ازای دو مقدار θ می‌تواند رخ دهد. مقدار متوسط A_x برابر است با

$$\overline{A_x} = \int_0^A A_x \Gamma(A_x) dA_x = \int_0^{2\pi} A \sin \theta \frac{d\theta}{\pi} = 0$$

برای برداری که در دو بعد است

$$\overline{A_x^2} = \frac{1}{2} A^2 = \frac{1}{2} A^2$$

ب- طول کلی پلیمر \vec{R} برابر است با

$$\vec{R} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \dots + \vec{r}_N.$$

و طول متوسط پلیمر \vec{R} ، با جمع طول متوسط همه‌ی قطعه‌ها برابر است.

$$\overline{\vec{R}} = \overline{\vec{r}_1} + \overline{\vec{r}_2} + \dots + \overline{\vec{r}_N} = N \overline{\vec{r}}.$$

اما با استفاده از نتیجه‌ی بخش (الف)

$$\overline{\vec{r}} = \hat{i} \bar{x} + \hat{j} \bar{y} + \hat{k} \bar{z} = 0.$$

بنا بر این

$$\overline{\vec{R}} = N \overline{\vec{r}} = 0$$

و

$$\overline{R^2} = N d^2.$$

ج- انرژی پتانسیل پلیمر برابر است با

$$V = -\vec{f} \cdot \vec{R} = -f(d \cos \theta_1 + d \cos \theta_2 + \dots + d \cos \theta_N).$$

تابع پارش برابر است با

$$\begin{aligned} Q_N &= \sum_{\{\theta_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta f d \cos \theta_i} = \prod_{i=1}^N \left[\sum_{\theta_i} e^{\beta f d \cos \theta_i} \right] \\ &= \left(\int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\phi \sin \theta d\theta e^{\beta f d \cos \theta} \right)^N \\ &= \left(4\pi \frac{\sinh(\beta f d)}{\beta f d} \right)^N, \end{aligned} \quad (2)$$

طول متوسط پلیمر \bar{R} از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$\begin{aligned}\bar{R} &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial f} \ln Q_N = N \langle d \cos \theta \rangle \\ &= Nd \left[\coth(\beta f d) - \frac{1}{\beta f d} \right] = NdL(\beta f d).\end{aligned}\quad (3)$$

متوسط مجذور طول پلیمر $\overline{R^2}$ نیز از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$\begin{aligned}\overline{R^2} &= \langle (d \cos \theta_1 + d \cos \theta_2 + \dots + d \cos \theta_N)^2 \rangle \\ &= N \langle d^2 \cos^2 \theta \rangle + 2 \frac{N(N-1)}{2} \langle d \cos \theta \rangle^2 \\ &= Nd^2 \left[1 - \frac{2 \coth(\beta f d)}{\beta f d} + \frac{2}{\beta^2 f^2 d^2} \right] \\ &\quad + N(N-1) d^2 \left[\coth(\beta f d) - \frac{1}{\beta f d} \right]^2 \\ &= Nd^2 \left[1 - \frac{2}{\beta f d} L(\beta f d) \right] + N(N-1) d^2 L^2(\beta f d)\end{aligned}\quad (4)$$

در دماهای خیلی کوچک و یا نیروی f بزرگ $kT \ll fd$

$$\begin{aligned}\bar{R} &= Nd \\ \overline{R^2} &= Nd^2,\end{aligned}\quad (5)$$

و برای دماهای خیلی بزرگ و یا نیروی f کوچک $kT \gg fd$

$$\begin{aligned}\bar{R} &= \frac{\beta N f d^2}{3} \\ \overline{R^2} &= \frac{N d^2}{3},\end{aligned}\quad (6)$$

در این محاسبات از بسط تابع لانژون که در کتاب Pathria هم بحث آن شده‌است، استفاده کرده‌ایم.

د- انرژی آزاد A عبارت است از

$$A = -kT \ln Q_N = -NkT \ln \left(4\pi \frac{\sinh(\beta f d)}{\beta f d} \right), \quad (7)$$

و انتروپی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$S = -\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_f = Nk \ln \left(4\pi \frac{\sinh(\beta f d)}{\beta f d} \right) - Nk\beta f d L(\beta f d). \quad (8)$$

ه- انرژی پتانسیل گرانشی پلیمر عبارت است از

$$V = -NmgZ_{cm}$$

اگر انتهای قطعه‌ی k ام را z_k بگیریم، مرکز جرم هر قطعه در $(z_{k-1} + z_k)/2$ است. از طرف دیگر $z_k = z_{k-1} + d \cos \theta_k/2$. پس مرکز جرم کل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$\begin{aligned}
 Z_{cm} &= \frac{1}{N} \left\{ \frac{0 + z_1}{2} + \frac{z_1 + z_2}{2} + \dots + \frac{z_{N-1} + z_N}{2} \right\} \\
 &= \frac{1}{N} \left\{ \frac{d}{2} \cos \theta_1 + \frac{d}{2} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{d}{2} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3) + \dots \right\} \\
 &= \frac{d}{2N} \{ N \cos \theta_1 + (N-1) \cos \theta_2 + \dots + \cos \theta_N \} \\
 &= \frac{d}{2N} \sum_{k=1}^N (N-k+1) \cos \theta_k. \tag{9}
 \end{aligned}$$

تابع پارش نیز عبارت است از

$$\begin{aligned}
 Q_N &= \prod_{k=1}^N \int_0^\pi 2\pi \sin \theta d\theta e^{\beta mgd(N-k+1) \cos \theta/2} \\
 &= \prod_{k=1}^N \frac{4\pi \sinh[\beta mgd(N-k+1)/2]}{\beta mgd(N-k+1)/2} \\
 &= (4\pi)^N e^{\sum_{k=1}^N \ln \left\{ \frac{\sinh[\beta mgd(N-k+1)/2]}{\beta mgd(N-k+1)/2} \right\}} \tag{10}
 \end{aligned}$$

انرژی آزاد عبارت است از

$$A = -kT \ln Q_N \approx -NkT \ln 4\pi - kT \int_0^N dX \ln \left\{ \frac{\sinh(\alpha X)}{\alpha X} \right\} \tag{11}$$

که در رابطه‌ی آخر جمع گسسته را به انتگرال تبدیل کرده‌ایم. تغییر متغیر $\alpha := \beta mgd/2$ نیز صورت گرفته است.

$$\begin{aligned}
 \bar{R} &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q_N}{\partial mg} \\
 &= d \int_0^N dX \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \left\{ \frac{\sinh(\alpha X)}{\alpha X} \right\} \\
 &= d \int_0^N dX \frac{\partial}{\partial X} \ln \left\{ \frac{\sinh(\alpha X)}{\alpha X} \right\} \\
 &= d \ln \left\{ \frac{\sinh(\alpha N)}{\alpha N} \right\} = d \ln \left\{ \frac{\sinh(\beta mgdN/2)}{\beta mgdN/2} \right\} \tag{12}
 \end{aligned}$$

۵- مسئله‌ی 3.25 کتاب Pathria را حل کنید.
 حل - تابع پارشی تک‌ذره‌ای عبارت است از

$$Q_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega + \beta x(n+1/2)^2 \hbar\omega}$$

با استفاده از تغییر متغیر پیش‌نهاد شده در صورت مسئله $u := \beta\hbar\omega$ و استفاده از تقریب $x \ll 1$ داریم،

$$\begin{aligned} Q_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} [1 + \beta x(n+1/2)^2 \hbar\omega + \dots] \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} S_k(u) (xu)^k, \end{aligned} \quad (13)$$

که

$$\begin{aligned} S_0(u) &:= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+1/2)u} = \frac{1}{2 \sinh(u/2)} \\ S_1(u) &:= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+1/2)u} (n+1/2)^2 \\ &= \frac{d^2}{du^2} S_0(u) = \frac{1}{2 \sinh(u/2)} [\coth^2(u/2) - 1/2] \end{aligned} \quad (14)$$

در اولین رتبه‌ی تقریب داریم،

$$\begin{aligned} \ln Q_1 &\approx \ln[S_0 + xuS_1] = \ln S_0 + \ln[1 + xuS_1/S_0] \\ &\approx \ln S_0 + xu(S_1/S_0) = -\ln[2 \sinh(u/2)] + (xu/2)[\coth^2(u/2) - 1/2] \\ &\approx -\ln[2 \sinh(u/2)] + x\left[\frac{2}{u} + \frac{u}{12} + \frac{u^3}{120} + \dots\right] \end{aligned} \quad (15)$$

انرژی سیستم عبارت است از

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Q_N) = -N \frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Q_1)$$

بخشی از جواب مربوط به نوسان‌گر هماهنگ است و بخش اضافی عبارت است از

$$\delta U \approx Nx\hbar\omega \left[\frac{2}{u^2} - \frac{1}{12} - \frac{u^2}{40} + \dots \right]$$

و ظرفیت گرمایی نیز دو بخش دارد که بخشی از جواب مربوط به نوسان‌گر هماهنگ است و بخش اضافی عبارت است از

$$\delta C \approx 4Nkx \left[\frac{1}{u} + \frac{u^3}{80} + \dots \right]$$