

FYSA241, kevät 2012

Tuomas Lappi

`tuomas.v.v.lappi@jyu.fi`

Huone: FL249. Ei kiinteitä vastaanottoaikoja.

kl 2012

1. Johdanto

Ajat, paikat

- ▶ Luennot: 20h ma, ke klo 10.15, FYS1,, 9.1.-22.2
- ▶ Demot: 10h, ke 8.15 (YN121), 12.15 (FYS5) ja 14.15 (FYS2)
- ▶ **Useita luentoja ja demoja jää välistä, tarkista aikataulu korpista** — kaikki kuitenkin näinä aikoina, paikassa poikkeus 15.2. (YlistöKem 4)
 - ▶ Laskuharjoitustehtävät jaetaan viim. keskiviikon luennolla
 - ▶ **Palautus:** ti klo 12 aulan laatikkoon
- ▶ Opettajat:
 - ▶ Tuomas Lappi, luennot osa A 9.1.-22.2. Huone FL249 (kopiokoneen vieressä)
 - ▶ Näillä näkymin: Juha Merikoski, osa B alkaen 12.3.
 - ▶ Harjoitukset: Riku Tuovinen, YN340

Kurssin arvostelu:

- ▶ Normaali vaihtoehto
 - ▶ Loppukoe 9.3. 48 pistettä
 - ▶ Harjoitukset: 12 pistettä
 - ▶ Laboratoriotyöt: 12 pistettä
- ▶ 1. tentti 23.3.: 60p tai 48p + 12p: parempi lasketaan.
- ▶ Myöhemmät tentit max. 60 pistettä.

Max 72 pistettä.

Materiaali

“Virallinen” kurssimateriaali

- ▶ Kirja: Bowley & Sanchez, Introductory Statistical Mechanics.
- ▶ Nämä kalvot ja mahd. käsinkirjoitetut luentomuistiinpanot:
<http://users.jyu.fi/~tulappi/fysa241kl12/>
kopioidut jaetaan luennolla, ylim. kappaleet laskuharjoitustehtävien lokerossa.

Kalvoilla teksti on hyvin suppea, ja muun kirjallisuuden lukeminen on tärkeää.
Muita kirjoja:

- ▶ F. Mandl: Statistical Physics, Wiley ([entinen kurssikirja](#))
- ▶ J. Arponen & J. Honkonen: Statistinen fysiikka, Limes ([laajempi](#))

Muuta materiaalia ([Luennot luultavasti seuraavat näitä aika läheltä](#))

- ▶ J. Merikosken luentomuistiinpanot <http://users.jyu.fi/~merikosk/Statistinen-fysiikka-2002-JM.pdf>
- ▶ J. Timosen muistiinpanot edellisten vuosien kursseilta.

Sisältöä I

BS=Bowley, Sanchez, M=Mandl

1. Johdanto (BS 1,3; M 1)

- ▶ Historiaa: termodynamiikka ja statistinen fysiikka
- ▶ Terminologiaa: mikro ja makro
- ▶ Todennäköisyyslaskennan kertausta

2. Termodynamiikan perusteet (BS 1,2; M 2,4,5)

- ▶ Tasapainon lajit
- ▶ Termodynaamiset muuttujat
- ▶ Vastefunktiot
- ▶ 1. pääsääntö: energian säilyminen
- ▶ 2. pääsääntö: entropia
- ▶ Sovelluksia: klassinen ideaalikaasu — Carnot'n kone — entropian muutos — kaasujen sekoittuminen

3. Statistinen mekaniikka (BS 4,5; M 2,3,4)

- ▶ Mikrokanoninen ensemble
- ▶ Kanoninen ensemble (lämpökylpy)
- ▶ Sovelluksia: kidevirheet — paramagneettinen kide — adiabaattinen jäähdytys — kaasujen sekoittuminen

4. Termodynaamiset potentiaalit (BS 5; M 4)

- ▶ Legendren muunnos

Sisältöä II

- ▶ Sisäenergia, entalpia, vapaa energia, Gibbsin potentiaali
- ▶ Maxwellin relaatiot
- ▶ Sovelluksia: maksimaalinen työ — paramagneetti — kokoonpuristuvuus ja lämpökapasiteetti
- ▶ Laboratoriotyö: termodynaaminen tutkimus

5. Faasitransitiot (BS 11,12; M 8)

- ▶ Faasidiagrammi,
- ▶ Tasapainoehdot
- ▶ Clausius-Clapeyron
- ▶ Sovelluksia: vesi — ferromagneetti
- ▶ Laboratoriotyö: höyry — Isingin malli

Motivaatio

Luonnon peruslait kuvaavat vuorovaikutuksia hiukkasten välillä.

Käytännön tilanteissa yleensä suuri määrä hiukkasia,

Esim 1 mooli = $N_A \approx 6 \times 10^{23}$ hiukkasta

- ▶ Liian monimutkainen, ei voida seurata kaikkien liikeyhtälöitä, voimia jne.
 - ▶ Järjestelmän osien keskinäinen vuorovaikutus
 - ▶ Vuorovaikutus ulkopuolisen maailman kanssa
- ▶ Joudutaan **keskiarvoistamaan** hiukkasjoukon ominaisuuksia
⇒ **statistinen** fysiikka
- ▶ Käytännön kannalta tärkeät suureet ovat **makroskooppisia, termodynaamisia** muuttujia: lämpötila T , paine P ...

Kurssin aihemaailmaa

Kiinteä aine tiheää, järjestäytynyt kiderakenne. Esim. magnetismi, kidevirheet, hilavärähtelyt, johtavuuselektronit . . .

Fluidi Virtaava aine.

Neste Epäjärjestynyt, tiheä. Mikroskooppinen teoria erityisen vaikea!

Kaasu Epäjärjestynyt, harva. Kokoonpuristuvuus, lämpeneminen tärkeitä sovelluksissa.

Muita Mustan kappaleen säteily (= fotonikaasu), alkeishiukkasaine, suprajohtavuus, plasma, polymeerit, lasit . . .

Termodynamiikka ja statistinen fysiikka

Tällä kurssilla rinnakkain kaksi erilaista lähestymistapaa.

Termodynamiikka “TD”

(Termo $\sim$ lämpö, dynamiikka $\sim$ liikeoppi)

Luonnon kuvaus makroskooppisilla suureilla, joiden välillä empiiriset:

- ▶ **Postulaatit**: termodynamiikan **pääsäännöt** 0 – 3. (“TD0” ... “TD3”) — Kaikille aineille yhteisiä
- ▶ Aineelle/systeemille ominainen **tilanyhtälö** (Esim. kaasulle $P = P(T, V, N)$)
- ▶ Perinteiset sovellukset: olomuodon muutokset, lämpövoimakoneet ($\ni$ lähes kaikki energian tuotto ja käyttö!)

Statistinen fysiikka, tai perinteisesti stat. mekaniikka “SM”

- ▶ Termodynamiikan johtaminen mikroskooppisesta kuvauksesta tilastollisena keskiarvona
- ▶ Sovellukset perinteistä TD:aa laajempia, voivat olla perinteisen fysiikan ulkopuolella (biologia, talous, yhteiskunta)

Historiaa

1800-luvun alku Kuinka rakennetaan mahdollisimman tehokas höyryveturi?

⇒ Klassinen TD, mystinen entropian käsite Clausius, Kelvin

1800-luvun loppupuoli Voidaanko termodynamiikka ja entropia selittää mikroskooppisten ominaisuuksien avulla?

⇒ klassinen SM Boltzmann

(Muista: "atomi" oli vielä spekulatiivinen teoreettinen rakenne, ei todellisuutta!)

1900-luku Klassinen SM on epäkonsistentti, miten se voidaan korjata?

Kvanttimekaniikka ⇒ oikea mikroskooppinen teoria

⇒ oikea, toimiva, ristiriidaton SM.

Nyt Laaja kirjo tutkimuskohteita: epätasapainoimiöt, kompleksiset systeemit, sovellukset perinteisen fysiikan ulkopuolelle, laskennallinen fysiikka, biologiset systeemit . . .

Systeemi

StaFy:n tarkastelukohteena on aina **järjestelmä = systeemi** eli kasa ainetta, jossa on suuri (10^n) määrä atomeja sekä **ympäristö** eli muu maailmankaikkeus.

Avoin järjestelmä voi vaihtaa ainetta ja lämpöä ympäristön kanssa
(Esim. kuutiometri ilmaa keskellä huonetta)

Suljettu järjestelmä voi vaihtaa lämpöä, mutta ei ainetta, ympäristön kanssa (Esim. suljettu pullo vettä pöydällä)

Eristetty järjestelmä ei vaihda ainetta eikä lämpöä (Termospullo)

Yhtä makrotilaa vastaa monta mikrotilaa

Mikrotila täydellinen atomaarisen tason kuvaus. (Esim A: kaasu: $3N$ koordinaattia, $3N$ liikemäärää. B: Kestomagneetti: N spinin suunnat.)

Makrotila termodynaamisten suureiden määrittelemä (Esim $p, V, N, T, E, \mathcal{M}, \dots$) tila

TD **Tasapaino**tilassa systeemin makrotila ei muutu spontaanisti.

(Spontaani = ilman ulkopuolista vaikutusta.)

(Hydrodynamiikassa **lokaali** TD tasapaino)

Esimerkkejä mikrotiloista

Hiukkanen laatikossa

Vapaita kvanttimekaanisia hiukkasia laatikossa $\Rightarrow$ Schrödingerin yhtälö

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}) = \varepsilon\psi(\mathbf{x}), \quad \text{“laatikkoa” kuvaa potentiaali}$$

$$U(x, y, z) = 0, \text{ kun } 0 < x < L, \quad 0 < y < L, \quad 0 < z < L \\ \infty \text{ muuten} \quad (\Rightarrow \psi(\mathbf{x}) = 0 \text{ tässä alueessa) }$$

$$\text{Ratkaisu: } \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \mathbf{k} = \frac{\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}$$

Harmoninen oskillaattori

$$\text{Yksiulotteinen Schrödinger} \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\text{Ratkaisuna energiatilat } E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \omega^2 = k/m, \quad n = 0, 1, \dots$$

Esimerkkejä mikroiloista

Magneettinen dipoli

- ▶ Tiedetään/muistetaan, että esim. elektroneilla on magneettinen momentti μ ,
- ▶ Ulkoisessa magneettikentässä dipolin energia on $-\mu \cdot \mathbf{B}$.
- ▶ Kvanttimekaniikassa magneettisen momentin $\mathbf{B}$:n suuntainen komponentti riippuu hiukkasen **spinistä**. Se ei voi olla mikä tahansa, vaan voi saada vain kaksi arvoa $\pm\mu$.
- ▶ Nyt hiukkasella on kaksi mahdollista energiatilaa $\uparrow$ ja $\downarrow$.

$$E_{\uparrow} = -\mu B$$

$$E_{\downarrow} = \mu B$$

Kvanttimekaniikassa tilat voidaan laskea

Diskreetit makrotilat (mahdolliset kokonaisenergiat), äärellinen (≥ 1) määrä mikroiloja vastaa yhtä makrotilaa.

Monen hiukkasen tilat

Oletetaan nyt N hiukkasta / värähtelijää / spiniä.

Jos nämä **eivät vuorovaikuta** keskenään, voidaan mikrotila kuvata antamalla kaikkien hiukkasten / värähtelijöiden / spinien tilat.

Esim. 8 spinin systeemi, mahdollisia mikrotiloja

$$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \quad E = -8\mu B$$

$$\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \quad E = -2\mu B$$

$$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \quad E = -2\mu B$$

Yhteensä 2^8 tilaa, vain 9 mahdollista kokonaisenergian arvoa.

Esim. N hiukkasta laatikossa

- ▶ Kvanttimekaanisesti: energiatasot diskreettejä $k_x \sim n_x/L \Rightarrow L \rightarrow \infty \Rightarrow$ energiatasot tiheässä isossa laatikossa.
- ▶ Klassisesti $\mathbf{k}$ jatkuva, eikä mikrotiloja voida laskea

Todennäköisyys

Klassinen määritelmä

Satunnaiskoe, N mahdollista tulosta, kaikki yhtä todennäköisiä

$$\text{Todennäköisyys } p_i = \frac{1}{N}, \quad i = 1, \dots, N$$

Tilastollinen määritelmä

Satunnaiskoe, N mahdollista tulosta $i = 1 \dots N$.

Toistetaan koe $M \gg N$ kertaa, saadaan tulos i n_i kertaa:

$$\text{Todennäköisyys } p_i = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{n_i}{M}, \quad i = 1, \dots, N \quad \left(\sum_{i=1}^N n_i = M \right)$$

- ▶ Normitusehto $\sum_i p_i = 1$
- ▶ $0 \leq p_i \leq 1$ kaikille tuloksille i
- ▶ Poissulkevat tapatumat $P(i \text{ tai } j) = p_i + p_j$
- ▶ 2 riippumatonta satunnaiskoetta: $P(i \text{ kokeessa 1 ja } j \text{ kokeessa 2}) = p_i p_j$

Jakauma, odotusarvo ja keskihajonta

Jakauma

Kaikkien tulosten todennäköisyydet p_i , $i = 1 \dots N$ ovat todennäköisyys**jakauma**.

Jakauman tunnuslukuja

Jos jokaiseen satunnaiskokeen lopputulokseen i liittyy joku mitattava suure x_i , voidaan laskea jakauman tunnuslukuja, esim.

Odotusarvo $\langle x \rangle = \sum_i p_i x_i$ (Usein merkitään $\bar{x} \equiv \langle x \rangle$)

Varianssi $(\Delta x)^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \sum_i p_i (x_i - \langle x \rangle)^2$

- ▶ Sama kuin “neliöllinen keskipoikkeama”
- ▶ Eri merkintöjä, esim. $(\Delta x)^2 \equiv \sigma^2(x)$
- ▶ Varianssin neliöjuuri on **keskihajonta** $\Delta x \equiv \sigma(x)$
- ▶ Huom $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

(Tod. taululle., tämä on analyyttisesti usein helpoin tapa laskea.)

Kolikon heitto

Yksi heitto

- ▶ Kaksi lopputulosta, $p(\text{klaava} \equiv +) = p(\text{kruuna} \equiv -) = \frac{1}{2}$
- ▶ Määritellään suure $x \equiv$ klaavojen lukumäärä
 $\implies x_- = 0, x_+ = 1$
- ▶ Odotusarvo $\langle x \rangle = p_- \cdot x_- + p_+ \cdot x_+ = \frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 1 = \frac{1}{2}$.
- ▶ Varianssi $\sigma^2(x) = \sum_i p_i (x_i - \langle x \rangle)^2 = \frac{1}{2}(0 - \frac{1}{2})^2 + \frac{1}{2}(1 - \frac{1}{2})^2 = \frac{1}{4}$
- ▶ Suhteellinen keskihajonta $\sigma(x)/\langle x \rangle = 1$

Kaksi heittoa

- ▶ Neljä lopputulosta: $++$, $+-$, $-+$, $--$, kaikkien $p = \frac{1}{4}$
- ▶ Klaavojen lukumäärät $x_{++} = 2$, $x_{+-} = x_{-+} = 1$, $x_{--} = 0$.
- ▶ Odotusarvo $\langle x \rangle = p_{++} \cdot 2 + p_{+-} \cdot 1 + p_{-+} \cdot 1 + p_{--} \cdot 0 = 1$
- ▶ Varianssi $\sigma^2(x) = \frac{1}{2}$,
- ▶ Suhteellinen keskihajonta $\sigma(x)/\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$

Kertoma

Laskettaessa todennäköisyyksiä suurilla toistojen määrillä tarvitaan lähes aina “kertoma”-notaatiota:

Kertoma $n! \equiv n \cdot (n - 1) \cdot \dots \cdot 1$

- ▶ n erilaista oliota voidaan järjestää riviin $n!$ tavalla
- ▶ N oliosta voidaan valita n :n olion **järjestetty** osajoukko $\frac{N!}{(N-n)!}$ tavalla
- ▶ N oliosta voidaan valita n :n olion **järjestämätön** osajoukko

$$\frac{N!}{n!(N-n)!} \equiv \binom{N}{n} \text{ tavalla}$$

Matemaattinen taustatieto: Eulerin Γ -funktio

Notaatiota $n!$ käytetään yleensä vain kokonaisluvuilla n . Kertomafunktio voidaan kuitenkin jatkaa (lähes) kaikkialle kompleksitasoon esim. integraaliesityksen avulla, jolloin yleensä puhutaan Eulerin Γ -funktioista:

$$\Gamma(n + 1) \equiv n! \quad (n \in \mathbb{N}).$$

N kolikon heitto

N kolikon heittoa

- ▶ 2 lopputulosta/heitto, yhteensä 2^N lopputulosta, jokaisen $p = 1/2^N$
- ▶ Kuinka monessa näistä on n klaavaa?
 - ▶ Ensimmäinen klaava joku N :stä heitosta, toinen joku muista $N - 1$:stä ... n :s klaava joku $N - n + 1$:stä $\Rightarrow N \cdot \dots \cdot (N - n + 1) = N!/(N - n)!$ tapaa.
 - ▶ n klaavaa eivät oikeasti ole numeroituja $\Rightarrow$ laskettiin $n(n - 1) \cdot \dots \cdot 1 = n!$ kertaa sama tapaus

Lopputulos $\frac{N!}{n!(N-n)!} \equiv \binom{N}{n}$ tapaa saada n klaavaa.

Tarkistus: $\sum_{n=0}^N \binom{N}{n} = (1 + 1)^N = 2^N$

- ▶ Todennäköisyys saada n klaavaa on $p_n = \frac{1}{2^N} \binom{N}{n}$

Yksi tulkinta:

- ▶ $\frac{1}{2^N} = p^n \cdot (1 - p)^{N-n}$: todennäköisyys saada n klaavaa (klaavan tod. näk. $p = 1/2$) ja $N - n$ kruunaa (kruunan tod. näk. $1 - p = 1/2$)
- ▶ $\binom{N}{n}$ tapaa valita, mitkä n heittoa antavat klaavan.

Stirlingin kaava

Statistisessa fysiikassa N on aina hyvin suuri. Käytämme jatkuvasti **Stirlingin approksimaatiota** kertomafunktiolle:

Stirling

$$\ln N! \approx N \ln N - N$$

Yksinkertainen perustelu

$$\begin{aligned}\ln N! &= \ln 1 + \ln 2 + \dots + \ln N \\ &\approx \int_1^N dx \ln x \\ &= \int_1^N (x \ln x - x) \\ &= N \ln N - N + 1 \\ &\approx N \ln N - N\end{aligned}$$