Statistinen fysiikka, osa A (FYSA241)

Tuomas Lappi
tuomas.v.v.lappi@jyu.fi

Huone: FL249. Ei kiinteitä vastaanottoaikoja.

kl 2013

0. Käytännön asioita

Ajat, paikat

Ajan tasalla olevat tiedot kurssin kotisivulta
`http://users.jyu.fi/~tulappi/fysa241kl13/`.

- Luennot: 20h ma, ke klo 10.15, FYS1, 7.1.-6.2
- Demot: 10h, ke 12.15 (FYS5) ja 14.15 (FYS5) ja 16.15 (FL140)
  - Laskuharjoitustehtävät jaetaan viim. keskiviikon luennolla
  - **Palautus:** ti klo 12 aulan laatikkoon
- Opettajat:
  - Tuomas Lappi, luennot osa A 7.1.-6.2. Huone FL249 (kopiokoneen vieressä)
  - Kimmo Tuominen, luennot osa B alkaen 11.3.
  - Harjoitukset: Ilkka Mäkinen
- Kurssin arvostelu:
  - Loppukoe 22.2. tai 23.3. tai myöhemmin 48 pistettä
  - Harjoitukset: 12 pistettä
  - Laboratoriotyöt: 12 pistettä

  Max 72 pistettä.

Materiaali

"Virallinen" kurssimateriaali

- Kirja: Bowley & Sanchez, Introductory Statistical Mechanics.
- Nämä kalvot ja kalvoja hieman laajempi luentomoniste: `http://users.jyu.fi/~tulappi/fysa241kl13/` Luentomonistetta jaetaan luennolla, ylim. kappaleet laskuharjoitustehtävien lokerossa.

Kalvojen ja monisteen 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

1. Johdanto (BS 1,2)
   - Historiaa: termodynamiikka ja statistinen fysiikka
   - Terminologiaa: mikro ja makro
   - Todennäköisyyslaskennan kertausta
2. Termodynamiikan perusteet (BS 1,2)
   - 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 3,4,5)
   - Mikrokanoninen ensemble
   - Kanoninen ensemble (lämpökylpy)
   - Sovelluksia: kidevirheet — paramagneettinen kide — adiabaattinen jäähdytys — kaasujen sekoittuminen
4. Termodynaamiset potentiaalit (BS 5)
   - 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)
   - Faasidiagrammi
   - Tasapainoehdot
   - Clausius-Clapeyron-yhtälö
   - Sovelluksia: vesi — ferromagneetti
   - Laboratoriotyö: höyry — Isingin malli

Statistinen fysiikka, osa A (FYSA241)

Tuomas Lappi
tuomas.v.v.lappi@jyu.fi

Huone: FL249. Ei kiinteitä vastaanottoaikoja.

kl 2013

1. Johdanto

Motivaatio

Luonnon peruslait kuvaavat vuorovaikutuksia hiukkasten välillä.
Käytännön tilanteissa yleensä suuri määrä hiukkasia,
Esim

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

- Liian monimutkainen, ei voida seurata kaikkien liikeyhtälöitä, voimia jne.
  - Järjestelmän osien keskinäinen vuorovaikutus
  - Vuorovaikutus ulkopuolisen maailman kanssa
- Joudutaan **keskiarvoistamaan** hiukkasjoukon ominaisuuksia $\Longrightarrow$ **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 sätely (= 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, tietojenkäsittely)

Historiaa

1800-luvun alku Kuinka rakennetaan mahdollisimman tehokas höyryveturi?
$\Longrightarrow$ Klassinen TD, mystinen entropian käsite Clausius, Kelvin

1800-luvun loppupuoli Voidaanko termodynamiikka ja entropia selittää mikroskooppisten ominaisuuksien avulla?
$\Longrightarrow$ klassinen SM Boltzmann

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

1900-luku Klassinen SM on epäkonsistentti, miten se voidaan korjata?
Kvanttimekaniikka $\Longrightarrow$ oikea mikroskooppinen teoria
$\Longrightarrow$ oikea, toimiva, ristiriidaton SM.

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

Terminologiaa

Tarkastelukohteena **järjestelmä = systeemi** = 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, vesilasi pöydällä)

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

Eristetty järjestelmä ei vaihda ainetta eikä lämpöä (Termospullo)

Makrotilat ja mikrotilat

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

Makrotila termodynaamisten suureiden määrittelemä tila

Tässä ”$3N$ liikemäärää” tarkoittaa, että jokaiselle N:stä hiukkasesta täytyy spesifioida kolme liikemäärän komponenttia p_x, p_y, p_z.
TD **Tasapaino**tilassa systeemin makrotila ei muutu spontaanisti.
(Spontaani = ilman ulkopuolista vaikutusta.) (Hydrodynamiikassa **lokaali** TD tasapaino)

Esimerkkejä mikrotiloista

Hiukkanen laatikossa

Vapaita kvanttimekaanisia hiukkasia laatikossa $\Longrightarrow$ Schrödingerin yhtälö

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

$$U(x,y,z) = \begin{cases} 0, \text{ kun } 0 < x < L, \quad 0 < y < L, \quad 0 < z < L \\ \infty \text{ muuten} \quad \left(\Longrightarrow \ \psi(\mathbf{x}) = 0 \text{ tässä alueessa}\right) \end{cases}$$

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

Harmoninen oskillaattori

Yksiulotteinen Schrödinger $\left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x} + \dfrac{1}{2}kx^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$

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

Lisää esimerkkejä mikrotiloista

Magneettinen dipoli

- Tiedetään/muistetaan, että esim. elektroneilla on magneettinen momentti $\boldsymbol{\mu}$,
- Ulkoisessa magneettikentässä dipolin energia on $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$.
- Kvanttimekaniikassa magneettisen momentin **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 $\downarrow$.

$$\begin{aligned} E_{\uparrow} &= -\mu B \\ E_{\downarrow} &= \mu B \end{aligned}$$

Kvanttimekaniikassa tilat voidaan laskea

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

Monen hiukkasen tilat

Oletetaan nyt N hiukkasta / värähtelijää / spiniä.

- Mikrotila voidaan kuvata antamalla kaikkien hiukkasten / värähtelijöiden / spinien tilat.
- **Jos** nämä **eivät vuorovaikuta** keskenään on tämä N hiukkasen systeemin energian ominaistila

Esim. 8 spinin systeemi, mahdollisia mikrotiloja

$$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \qquad E = -8\mu B$$
$$\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \qquad E = -2\mu B$$
$$\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \qquad E = -2\mu B$$

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

Todennäköisyys

Määritelmiä

- Klassinen: satunnaiskoe, N mahdollista tulosta, kaikki yhtä todennäköisiä

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

- Tilastollinen: satunnaiskoe, N mahdollista tulosta $i = 1 \ldots N$. Toistetaan koe $M \gg N$ kertaa, saadaan tulos i n_i kertaa:

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

Ominaisuuksia

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

Jakauma, odotusarvo ja keskihajonta

Jakauma

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

Satunnaismuuttuja, jakauman tunnuslukuja

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

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

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 $\left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2$

Kolikon heitto

Yksi heitto

- Kaksi lopputulosta, $p(\text{klaava} \equiv +) = p(\text{kruuna} \equiv -) = \frac{1}{2}$
- Määritellään **satunnaismuuttuja** $x \equiv$ klaavojen lukumäärä
  $\Longrightarrow x_-=0,\ x_+=1$
- Odotusarvo $\langle x \rangle = \frac{1}{2}$, varianssi $\sigma^2(x) = \frac{1}{4}$
- Suhteellinen keskihajonta $\sigma(x)/\langle x \rangle = 1$

Kaksi heittoa

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

Suhteellisesta keskihajonnasta nähdään, että suuremmalla heittojen määrällä tulos ”heilahtelee vähemmän” keskiarvon ympärillä.

Kertoma

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

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

- 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 $\frac{N!}{n!(N-n)!} \equiv \begin{pmatrix} N \\ n \end{pmatrix}$ tavalla

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

Stirling

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

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 $\Longrightarrow N \cdot \cdots \cdot (N-n+1) = N!/(N-n)!$ tapaa.
  - n klaavaa eivät oikeasti ole numeroituja $\Longrightarrow$ laskettiin $n(n-1) \cdot \cdots \cdot 1 = n!$ kertaa sama tapaus

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

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

- Todennäköisyys saada n klaavaa on $p_n = \frac{1}{2^N} \begin{pmatrix} N \\ n \end{pmatrix}$

  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. $1-p = 1/2$)
  - $\begin{pmatrix} N \\ n \end{pmatrix}$ tapaa valita, mitkä n heittoa antavat klaavan.