Domácí úkol č. 2

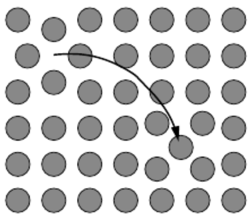
Zadáno: 15.3.2019 **Odevzdat do: 28.3.2019**

Frenkelovy defekty (50%)

V iontových krystalech (ZnS, AgCl, AgBr, NaCl,...) může dojít při konečné teplotě vlivem tepelných vibrací k přemístění menšího atomů z mřížkového bodu do intersticiální polohy. Vzniká tak tzv. Frenkelův defekt.

Uvažujme dokonalý krystal tvořený N atomy. Přemístíme-li n z nich ($1 \ll n \ll N$) do intersticiálních poloh, získáme n Frenkelových defektů. Předpokládejme, že počet dostupných intersticiálních poloh N' je řádově stejný jako počet atomů a že energie potřebná ke vzniku jednoho defektu je ε. Pomocí mikrokanonického popisu ukažte, že v rovnovážném stavu při teplotě T (za předpokladu $\varepsilon \gg k_B T$) platí

$$\frac{n^2}{(N-n)(N'-n)} = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right).$$



Rozložení rychlostí v ideálním plynu (50%)

Na základě mikrokanonického popisu ideálního plynu uzavřeného v nádobě o objemu $V = L^3$

1. ukažte, že v termodynamické limitě $N \to \infty$ je pravděpodobnost, že x-ová (nebo jiná) komponenta rychlosti libovolně vybrané částice má velikost v intervalu $(v_x, v_x + dv_x)$, popsána *Maxwellovým rozdělením*

   $$w(v_x)dv_x = K \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right) dv_x,$$

   kde K je vhodná konstanta (určete);

2. najděte pravděpodobnostní rozdělení pro absolutní hodnotu rychlosti $v = |\mathbf{v}|$ částic plynu;

3. vypočtěte střední hodnoty $\langle \mathbf{v} \rangle$, $\langle v \rangle$ a $\sqrt{\langle \mathbf{v^2} \rangle}$.

Návod: Viz úloha řešená v minulém semestru, případně mikrokanonický popis soustavy klasických neiteragujících oscilátorů, který si ukážeme příští týden. Pokud se omezíme na objem fázového prostoru odpovídající přesné hodnotě E vnitřní energie plynu, potom pro pravděpodobnost obsazení mikrostavu definovaného hybnostmi $\mathbf{p}_i$ a polohami $\mathbf{q}_i$ jednotlivých částic ($i = 1, \ldots, N$) platí

$$w(\{\mathbf{q_i}, \mathbf{p_i}\}) \propto \delta(|\mathbf{p}_1|^2 + |\mathbf{p}_2|^2 + \cdots + |\mathbf{p}_N|^2 - 2mE) \quad \text{pro} \quad |\mathbf{q_i}| \leq \frac{L}{2},$$

kde L je délka hrany nádoby, m je hmotnost částice plynu. Odpovídající fázový povrch $\Sigma(E)$ je úměrný povrchu $3N$-dimenzionální sféry o poloměru $\sqrt{2mE}$. Pravděpodobnost, že například první komponenta hybnosti první částice má velikost v intervalu $(p_x, p_x + dp_x)$, je potom rovna podílu povrchů $(3N - 1)$-dimenzionální sféry o poloměru $\sqrt{2mE - p_x^2}$ a $3N$-dimenzionální sféry o poloměru $\sqrt{2mE}$. Odůvodněte!