

Fisika Statistik



I Wayan Sudiarta

Program Studi Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Mataram
Agustus 21, 2012

Buat anakku Arvin dan Istriku Tami

Daftar Isi

Pengantar	v
Ucapan Terima Kasih	vii
1 Pendahuluan	1
2 Ringkasan Termodinamika	5
2.1 Turunan Parsial	5
2.2 Persamaan Termodinamika	6
3 Probabilitas	9
3.1 Fungsi distribusi	17
3.2 Nilai Ekspektasi atau Rata-Rata	22
3.3 Ketidakpastian atau uncertainty	24
4 Gerak Acak	29
4.1 Gerak Acak Dimensi Satu	30
5 Energi	39
5.1 Monoatom atau Satu Partikel	39
5.2 Diatomik	41
5.3 Energi dalam Kuantum	42
6 Jenis Sistem Equilibrium	43
7 Sistem Kanonik Kecil	45
8 Sistem Kanonik	53
9 Sistem Kanonik Besar	65
10 Fluktuasi	73
10.1 Sistem Tertutup	73
10.2 Sistem Terbuka	75
11 Aplikasi	79
11.1 Gas pada medan gravitasi	79
11.2 Distribusi Maxwell	80
11.3 Prinsip Ekuipartisi	83
11.4 Teorema Virial	85
11.5 Osilator Harmonik	85
11.6 Kapasitas Panas Untuk Gas	86

11.6.1 Gas Monoatomik	87
11.6.2 Gas diatomik	87
12 Statistik Sistem Kuantum	91
12.1 Distinguishable Partikel	92
12.2 Indistinguishable Partikel	92
12.3 degenerasi	99
12.4 Fermion	100
12.5 Boson	101
13 Zat Padat	107
13.1 Teori Einstein	107
13.2 Teori Debye	108
14 Sistem Dielektrik Sederhana	111
15 Sistem Paramagnetik	115
16 Pengenalan Mekanika Kuantum	121
16.1 Aplikasi	125
16.1.1 Partikel Pada Sumur Potensial Kotak 1D	125
16.1.2 Partikel di Sumur Potensial Kotak 3D	127
16.2 Osilator Harmonik	129
16.3 Rigid Rotator	130
17 Statistika Kuantum	133
17.1 Buku Referensi	137
A Konstanta dan Konversi Penting	139
B Integral Gaussian	141

Kata Pengantar

Penulisan kebanyakan buku-buku yang dipakai untuk kuliah biasa dimulai dari sebuah catatan kuliah. Begitu pula buku ini, diawali dengan catatan-catatan yang pendek mengenai apa saja yang akan diajarkan pada saat kuliah dan kemudian diperluas setelah satu semester berakhir. Banyak buku-buku tentang fisika dasar, mekanika statistik dan termodinamika telah membantu memperjelas konsep yang penting untuk fisika statistik. Khususnya, sebuah buku yang menjadi dasar awal catatan kuliah tersebut adalah buku "Equilibrium Statistical Mechanics" (dipersingkat dengan ESM) oleh E. Atlee Jackson. Buku ESM ini, walaupun tipis, mengandung konsep-konsep dasar fisika statistik. Buku ESM ini memiliki kekurangan di mana konsep sistem kanonik kecil (microcanonical) tidak dijelaskan. Walaupun demikian buku ESM telah memberikan motivasi untuk menulis buku ini. Oleh karena itu, banyak bagian dari buku ini agak mirip dengan buku ESM tersebut.

Fisika statistik merupakan suatu bidang ilmu yang mempelajari suatu sistem makroskopik dengan menggunakan model-model mikroskopik. Fisika statistik berawal dari pengetahuan tentang dinamika inti atom, atom atau molekul yang menjadi pembentuk suatu sistem, dan kemudian menggunakan informasi tentang probabilitas energi pada atom atau molekul. Walaupun kita tidak mengetahui secara detil tentang bagaimana molekul-molekul itu bergerak, yang terlihat seperti gerak acak, tetapi secara rata-rata memiliki suatu keteraturan. Ada keteraturan pada suatu yang tidak teratur. Inilah yang menarik dari fisika statistik.

Penulis dalam menulis buku ini berusaha menjelaskan secara rinci tentang konsep-konsep fisika statistik, yang dimulai dari konsep dasar atau asumsi dasar dan kemudian dilanjutkan dengan penurunan persamaan-persamaan. Penulis berusaha memberikan cara penurunan-penurunan persamaan-persamaan agar pembaca dapat langsung mengerti bahwa dari asumsi yang sederhana kita dapat menjelaskan banyak fenomena fisika.

Buku ini secara garis besar dapat dibagi menjadi tiga bagian: bagian (Bab I-VII) merupakan penjelasan konsep-konsep penting dalam fisika statistik, bagian II (Bab VII-XI) adalah bagian penerapan konsep-konsep fisika statistik dan bagian III (Bab XII-XIII) adalah pembahasan tentang statistika kuantum.

Secara singkat materi yang akan dibahas setiap babnya adalah sebagai berikut sebagai berikut:

- Bab II Probabilitas - teori kemungkinan sangat diperlukan dalam mempelajari fisika statistik, karena semua hal yang akan digunakan berbasis statistik atau peluang. Dengan mengetahui peluang, sifat-sifat statistik dapat diperoleh.
- Bab III tentang gerak acak atau random walks
- Bab IV Energi, disini kita akan membahas tentang konsep energi yang akan menjadi konsep dasar dalam menentukan sifat-sifat statistik dari suatu sistem.
- Bab V tentang konsep fisika statistik untuk sistem yang ekuilibrium.
- Bab VI Sistem mikrocanonical - kanonik kecil
- Bab VII Sistem canonical - kanonik
- Bab VIII Sistem grand canonical - kanonik besa

Pada setiap bab, contoh-contoh permasalahan dan soal-soal diberikan yang mendukung pemahaman konsep pada bab tersebut. Disamping itu pula, beberapa soal diselesaikan dengan menggunakan program komputer yang bertujuan agar dapat lebih memperjelas konsep yang diajarkan. Selain itu, diakhir setiap bab, kecuali bab I, diberikan ringkasan rumus atau konsep-konsep penting sehingga memperkuat pemahaman dan dapat dijadikan referensi sehingga konsep atau persamaan dapat cepat ditemukan jika diperlukan.

Ucapan Terima Kasih

Penulis bersyukur kepada Tuhan Yang Maha Esa atas energi dan peluang yang diberikan sehingga buku ini dapat diselesaikan. Terima kasih Tuhan atas kelimpahan semangat beserta keberuntungan yang tiada ternilai.

Penulisan buku ini tentunya tidak bisa dilakukan tanpa bantuan banyak pihak. Penulis berterima kasih kepada mahasiswa-mahasiswa yang mengikuti kuliah fisika statistik yang telah memberikan banyak pertanyaan, komentar dan saran yang membantu penyempurnaan buku ini. Terutama, saya terimakasih untuk Azmi yang telah mencatat sebagian materi diajarkan. Penulis mengucapkan terima kasih sebesar-besarnya kepada rekan-rekan dosen Fisika Fakultas MIPA Universitas Mataram yang meluangkan waktu untuk membanca buku ini dan juga memberikan masukan.

Penulis berhutang budi kepada editor yang dengan sabar membantu mengatasi kesulitan-kesulitan yang dialami selama penulisan buku sehingga buku ini bisa rampung.

Penulis berterima kasih kepada istri yang selalu memberi dorongan beserta kasih sayang sehingga penulis selalu semangat mengerjakan buku ini meskipun hal ini merupakan sebuah proses yang panjang. Penulis tidak kunjung puas dengan tawa dan ajakan bermain anak yang menjadi selingan waktu penghapus kejenuhan dalam penulisan buku ini.

Terima Kasih Semua.

Penulis

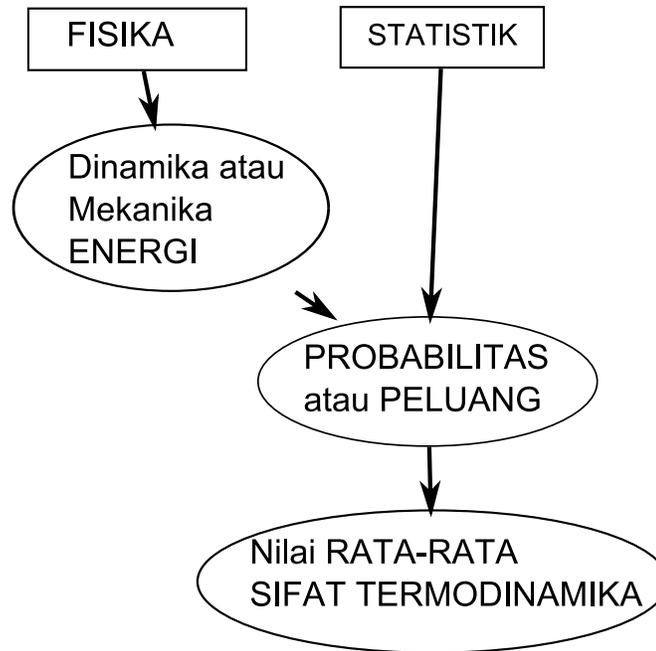
1

Pendahuluan

A journey of a thousand miles begins with a single step.
(Lao-tzu)

Mengapa kita belajar fisika statistik? Karena...? Jika kita perhatikan di alam semesta ini, materi atau benda makroskopik terdiri dari benda-benda mikroskopik seperti molekul, atom dan yang lebih kecil lagi, elektron. Sebagai contoh, satu mol air (atau sekitar 18 gram), terkandung sekitar 10^{23} molekul. Jumlah molekul ini sangatlah besar! Tidaklah mungkin mempelajari 18 gram air ini dengan mempelajari dinamika dan interaksi semua molekul dengan persamaan fisika, baik itu dengan persamaan Newton maupun persamaan Schrödinger. Meskipun kita mempunyai superkomputer, ini tidak akan mampu memproses informasi yang begitu banyaknya. Di samping itu pula kita tidak mengetahui kondisi awal molekul yaitu nilai awal posisi dan kecepatan. Jadi kita tidak bisa menyelesaikan persamaan dinamika molekul-molekul air. Selain itu, mengetahui seluruh dinamika molekul tersebut tidaklah begitu menarik untuk dipelajari. Kita lebih tertarik mengkaji nilai rata-rata dari sifat sistem atau secara statistik. Pada tingkat mikroskopik, setiap atom atau molekul terlihat bergerak dan berinteraksi dengan atom atau molekul lainnya secara acak atau random, tetapi pada tingkat makroskopik, jika kita melihat dengan cara rata-rata sistem mempunyai sifat-sifat yang tidak acak.

Dengan melihat nama "Fisika Statistik", kita dapat menyimpulkan bahwa ada dua komponen yang penting yaitu "fisika" yang berkaitan dengan dinamika atom atau molekul, pada khususnya dengan energi dan "statistik" yang berhubungan dengan konsep peluang atau probabilitas. Kita tidak mungkin bisa mengetahui dinamika atau energi satu molekul tertentu, yang kita bisa lakukan adalah mengetahui peluang atau probabilitas suatu molekul memiliki energi tertentu. Konsep penentuan probabilitas dari energi molekul-molekul yang mendasari



Gambar 1.1: Konsep fisika statistik

fisika statistik. Setelah mengetahui probabilitasnya, nilai rata-rata sistem merupakan nilai variabel-variabel termodinamika. Aliran konsep penting dalam fisika statistik ditunjukkan pada Gambar 1.1

Sebelum kita memulai, kita perlu mengingat kembali apa yang sudah kita pelajari tentang termodinamika. Sistem-sistem yang dipelajari dalam termodinamika adalah sistem yang berukuran besar atau makroskopik, dengan jumlah partikel lebih dari 10^{20} atom or molekul. Kita telah mengetahui bahwa sifat-sifat makro suatu sistem, seperti temperatur, dan tekanan, mempunyai hubungan satu dengan lainnya. Sebagai contoh untuk gas ideal, hubungan antara tekanan dan temperatur adalah $P = nRT/V$ untuk volume kontainer V , jumlah mol gas n dan konstanta gas ideal R . Termodinamika menghubungkan sifat-sifat makro suatu sistem dengan mempelajari sistem melalui experiment. Termodinamika tidak dapat menjelaskan mengapa hubungan atau persamaan penomenologi sifat-sifat sistem seperti demikian. Termodinamika tidak memberikan interpretasi dengan mengetahui dinamika molekul. Jadi termodinamika tidak dapat menjelaskan mengapa hubungan sifat-sifat termodinamika seperti demikian dan apa yang menyebabkan demikian.

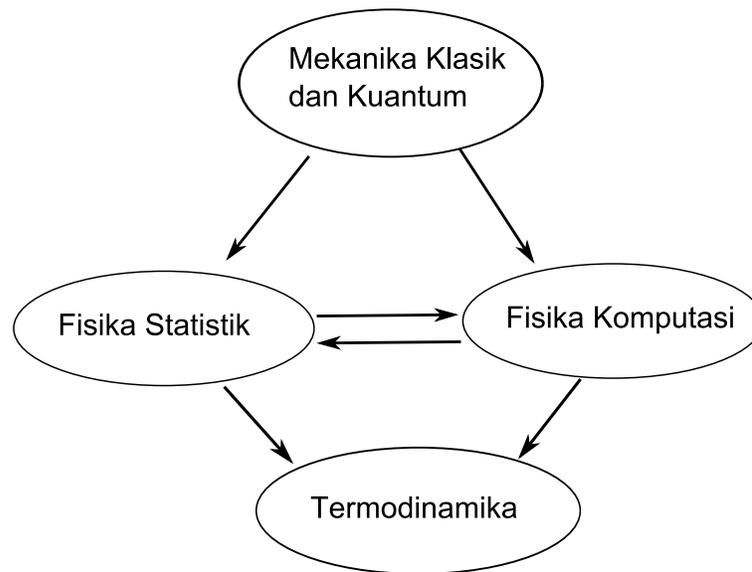
Penjelasan tentang "mengapa" ada hubungan antara sifat-sifat termodinamika suatu sistem akan dijelaskan dan diinterpretasikan oleh fisika statistik yang menyediakan teori atom atau molekul. Dengan kata lain, persamaan-persamaan termodinamika bisa diturunkan dari fisika statistik dengan mempertimbangkan dinamika mikroskopik.

Pertanyaan yang akan dijawab dalam fisika statistik adalah apakah bisa dengan mempertimbangkan molekul/atom diperoleh hubungan antara sifat-sifat fisis atau termodinamika?. Apakah kita bisa menjelaskan fenomena yang dipelajari pada termodinamika? Dengan kata lain apakah kita bisa menghubungkan fenomena mikroskopik (dinamikanya) dengan fenomena makroskopik?

Buku ini hanya membahas tentang sistem yang ekuilibrium. Fisika statistik untuk sistem yang non-ekuilibrium masih dalam tahap perkembangan dan penulis belum menemukan formulasi yang meyakinkan.

Mempelajari fisika statistik memerlukan pengetahuan tentang banyak konsep dasar di bidang mekanika klasik dan kuantum, bidang fisika komputasi dan termodinamika. Keterkaitan bidang ilmu fisika statistik dengan bidang fisika lainnya ditunjukkan pada Gambar 1.2. Pemahaman tentang bidang ilmu mekanika, baik itu untuk keadaan makro (klasik) maupun untuk keadaan mikro (kuantum) sangat menunjang dalam memahami fisika statistik secara mendalam. Fisika komputasi berguna untuk pemahaman konsep-konsep fisika statistik melalui pengamatan atau eksperimen menggunakan simulasi-simulasi komputer.

Untuk memperdalam pemahaman konsep fisika statistik, diberikan pula simulasi-simulasi yang mendukung penjelasan yang ada di buku ini. Disamping itu diberikan program dengan bahasa pemrograman C++ dan Java sehingga dapat dimodifikasi untuk simulasi yang berbeda.



Gambar 1.2: Keterkaitan fisika statistik dengan bidang fisika lainnya

2

Ringkasan Termodinamika

Sebelum kita mempelajari konsep-konsep fisika statistik, kita perlu membaca kembali konsep dan persamaan termodinamika. Hal ini berguna untuk mempermudah pemahaman buku ini. Bab ini merupakan ringkasan hal-hal penting yang perlu diketahui untuk mempelajari fisika statistik.

2.1 Turunan Parsial

Turunan parsial dari suatu variabel termodinamika terhadap variabel yang lain merupakan sebuah konsep matematis yang paling sering ditemukan di dalam termodinamika. Hal ini dimengerti karena termodinamika menghubungkan variabel termodinamika yang satu dengan yang lainnya.

Aturan turunan parsial yang sering digunakan adalah

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = 1 / \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z \quad (2.1)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z\right)_x = \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x\right)_z \quad (2.2)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1 \quad (2.3)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_w = \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z + \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_w \quad (2.4)$$

di mana variabel x , y dan z adalah variabel-variabel yang saling berhubungan.

2.2 Persamaan Termodinamika

Definisi energi

$$H = U + PV \quad (2.5)$$

$$F = U - TS \quad (2.6)$$

$$G = H - TS \quad (2.7)$$

Sifat-sifat materi

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (2.8)$$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (2.9)$$

$$\mu = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H \quad (2.10)$$

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (2.11)$$

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad (2.12)$$

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_S \quad (2.13)$$

Persamaan Dasar

$$dU = TdS - PdV \quad (2.14)$$

$$dF = -SdT - PdV \quad (2.15)$$

$$dH = TdS + VdP \quad (2.16)$$

$$dG = -SdT + VdP \quad (2.17)$$

Persamaan

$$dU = C_v dT + \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (2.18)$$

$$dS = \frac{C_v}{T} dT + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V dV \quad (2.19)$$

$$dH = C_v dT + \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \right] dP \quad (2.20)$$

$$dS = \frac{C_p}{T} dT - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP \quad (2.21)$$

Hubungan yang diturunkan

$$C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \quad (2.22)$$

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \quad (2.23)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P = -S \quad (2.24)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -S \quad (2.25)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_T = V \quad (2.26)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = -P \quad (2.27)$$

3

Probabilitas

Anyone who has never made a mistake has never tried anything new. (Albert Einstein)

Sebagian bab ini mengikuti buku E. Atlee Jackson.

Seperti dijelaskan pada bab sebelumnya bahwa salah satu bagian penting dalam fisika statistik adalah konsep "statistik". Istilah statistik berkaitan dengan topik probabilitas. Pemahaman tentang probabilitas sangatlah penting sebelum memahami fisika statistik secara menyeluruh, yang dimulai dari asumsi-asumsi dasar yang sederhana dan kemudian dikembangkan menjadi penjelasan atau interpretasi dan prediksi/perumusan. Oleh karena itu bab ini akan membahas secara singkat konsep-konsep probabilitas yang diperlukan dalam formulasi fisika statistik.

Konsep probabilitas berhubungan erat dengan kemungkinan terjadinya suatu kejadian dalam suatu eksperimen (atau juga pengamatan). Kita biasanya melakukan eksperimen tidak satu kali saja, melainkan banyak eksperimen sehingga tingkat kepercayaan kita terhadap hasil eksperimen mencapai tingkat yang diinginkan /cukup. Banyak eksperimen diperlukan karena pada suatu eksperimen, walaupun kondisi setiap eksperimen dijaga atau dibuat hampir sama, kita akan memperoleh hasil dengan kejadian yang berbeda-beda. Ini disebabkan karena ada faktor-faktor yang mempengaruhi eksperimen tersebut yang tidak bisa sepenuhnya dikontrol. Sebagai contoh pada eksperimen pelemparan koin, dadu dan pengambilan kartu. Tidaklah mungkin dengan cara sederhana kita dapat memastikan hasil yang kita dapatkan untuk eksperimen pelemparan koin selalu sama. Terkecuali kita melakukan latihan khusus sehingga kita trampil dalam melemparkan koin. Bagaimana kita melakukan eksperimen tidak merupakan hal yang penting, asalkan kondisi setiap eksperimen sama. Dari setiap eksperimen, hal yang paling penting adalah kita mendapatkan (atau melihat) hasilnya.

Supaya singkat, jelas dan konsisten, kita akan menyebut hasil-hasil eksperimen yang berbeda dan mutually eksklusif dengan "kejadian sederhana" (*simple events*) atau "kejadian" saja. Hasil setiap eksperimen selalu satu dan hanya satu kejadian. Tidak bisa dua atau lebih kejadian. Sebagai contoh pada eksperimen pelemparan dadu dengan angka $1 \cdots 6$, kita akan memperoleh hanya satu angka dari $1 \cdots 6$. Tidak mungkin kita mendapatkan dua angka atau lebih dalam satu eksperimen.

Untuk mempermudah penjelasan, kita akan memberi indeks untuk setiap kejadian, pada khususnya kita akan menggunakan simbol i . Sebagai contoh untuk eksperimen melempar koin, kita menggunakan $i =$ muka (m), belakang (b) (ada dua kejadian) dan untuk dadu $i = 1, 2, 3, \dots, 6$ (ada enam kejadian). Kita bisa mengartikan indeks i adalah jenis kejadian.

Jika kita melakukan eksperimen sebanyak N kali dan hasil untuk kejadian i adalah sebanyak n_i kejadian, kita bisa berharap kejadian i akan muncul secara garis besar dengan frekuensi yang sama. Untuk setiap kejadian i kita bisa mempertimbangkan sebuah ratio antara n_i dan N yaitu

$$F_i = \frac{n_i}{N} \quad (3.1)$$

Ratio F_i adalah seberapa bagian (atau fraksi) dari sejumlah N eksperimen yang menghasilkan kejadian i atau yang biasanya disebut dengan frekuensi dari kejadian i . Umpama kita melakukan dua kumpulan N eksperimen yang sama. Apakah dua kumpulan eksperimen akan menghasilkan nilai F_i yang sama? Tidak! Kita harus menyadari bahwa jika N eksperimen diulang kembali, kita tidak bisa berharap bahwa jumlah kejadian i yaitu n_i , yang sama akan dijumpai. Kemungkinan akan didapatkan jumlah kejadian yang berbeda yaitu m_i . Jadi $m_i \neq n_i$. Sebagai contoh jika kita melempar koin sebanyak 20 kali dan kita memperoleh bagian muka (m) sebanyak 12 kali maka $F_m = 12/20 = 0.6$. Jika kita lakukan sebanyak 100 kali kita mendapatkan bagian muka sebanyak 47 kali maka $F_m = 47/100 = 0.47$. Dan seterusnya. Jadi frekuensi kejadian tergantung dari sekumpulan eksperimen yang kita lakukan. Karena setiap kumpulan eksperimen menghasilkan hal yang berbeda, kita sangat menginginkan mendapatkan sebuah nilai yang tidak bergantung pada kumpulan eksperimen berjumlah N . Jika jumlah eksperimen cukup besar atau $N \rightarrow \infty$, untuk eksperimen lempar koin kita memperoleh $F_m = 0.5$. Kita menyebut harga limit untuk N besar ini dengan istilah "probabilitas" atau "peluang" untuk kejadian koin bagian muka.

Jadi secara formal, definisi probabilitas P_i dari sebuah kejadian i adalah

$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} F_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i}{N} \quad (3.2)$$

Jika kita perhatikan ada dua interpretasi dari definisi probabilitas ini yaitu

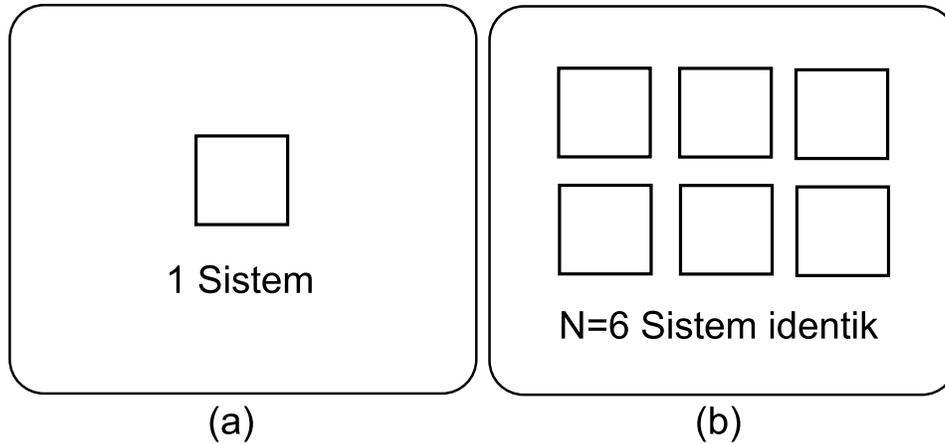
1. Ada satu sistem fisis (sebagai contoh ada 1 koin yang identik, 1 kartu, atau 1 tabung gas) di mana kita melakukan eksperimen yang sama berulang berkali-kali sebanyak N eksperimen (lihat Gambar 3.1. n_i adalah banyaknya kejadian i muncul pada sederetan eksperimen yang dilakukan.
2. Ada N sistem yang identik (sebagai contoh ada sebanyak N koin, N kartu, atau N tabung gas yang identik). N sistem ini identik dalam artian kita tidak dapat membedakan di antara sistem ini dengan segala cara mikroskopik. Kumpulan dari sistem-sistem identik ini biasanya di sebut dengan "*ensemble*" atau ensembel. Setelah kita mempunyai N sistem identik, kita melakukan eksperimen yang sama pada setiap sistem dan mendapatkan ada sebanyak n_i sistem ini yang menghasilkan kejadian i . Hasil dari eksperimen sistem yang satu tidak mempengaruhi hasil dari sistem yang lain.

Kita perhatikan bahwa pada interpretasi pertama, hasil satu eksperimen dapat dipengaruhi oleh hasil dari eksperimen sebelumnya karena kita menggunakan satu sistem saja. Sehingga ada pengaruh variabel waktu karena untuk melakukan eksperimen kedua harus menunggu eksperimen pertama selesai terlebih dahulu atau kita melakukan eksperimen silih berganti. Sedangkan pada interpretasi kedua, seluruh eksperimen bisa dilakukan sekaligus secara bersamaan atau variabel waktu tidak mempengaruhi hasil eksperimen.

Dalam fisika statistik, kita berasumsi bahwa dua interpretasi atau dua cara melakukan eksperimen ini menghasilkan hasil yang sama. Asumsi ini disebut dengan "*Hipotesis Ergodik*" (*Ergodic Hypothesis*).

Pada kenyataannya, jumlah sistem N tidak mungkin mendekati tak terhingga. Kita hanya bisa melakukan atau menggunakan N sistem fisis yang terbatas, sehingga kita hanya bisa mendapatkan nilai pendekatan/aproksimasi dari probabilitas kejadian.

Sebagai contoh pada eksperimen melempar koin, jika kita lakukan atau gunakan N yang besar, nilai ratio yang kita peroleh untuk koin



Gambar 3.1: Dua cara melakukan sekumpulan N eksperimen yang identik: (a) eksperimen pada satu sistem dilakukan berulang-ulang sebanyak N , dan (b) N sistem dilakukan satu kali eksperimen setiap sistem.

bagian muka akan mendekati nilai $1/2$. Kita bisa mengatakan bahwa probabilitas/peluang untuk mendapatkan koin bagian muka adalah $1/2$. Kita juga dapat memperoleh nilai probabilitas ini dengan berasumsi bahwa probabilitas kejadian koin bagian muka dan belakang adalah sama. Karena ada dua jenis kejadian maka setiap kejadian mendapatkan probabilitas yang sama yaitu $P_m = P_b = 1/2 = 0.5$. Dua cara penentuan probabilitas ini disebut dengan pendekatan empiris (atau dengan melakukan eksperimen) dan pendekatan teoritik.

Untuk mendapatkan probabilitas suatu kejadian dengan pendekatan teoritik, kita akan menggunakan sifat-sifat probabilitas. Dari definisi probabilitas Pers. (3.2), kita dapat memperoleh sifat-sifat sebagai berikut:

1. Probabilitas selalu bernilai positif atau nol dan lebih kecil sama dengan satu.

$$0 \leq P_i \leq 1 \quad \text{untuk semua kejadian } i \quad (3.3)$$

Sifat ini berasal dari keharusan bahwa nilai n_i dan N harus lebih besar atau sama dengan nol dan nilai maksimum n_i adalah N , $0 \leq n_i \leq N$ dan $N > 0$. $P_i = n_i/N$ selalu lebih besar atau sama dengan nol dan lebih kecil sama dengan satu.

2. Jumlah total semua probabilitas sama dengan satu.

$$\sum_i P_i = 1 \quad \text{Jumlah untuk semua kejadian } i \quad (3.4)$$

Sifat ini diturunkan dari jumlah semua kejadian adalah $N = \sum_i n_i$. Jadi ratio atau probabilitas untuk menemukan semua kejadian adalah satu atau $\sum_i P_i = \sum_i \frac{n_i}{N} = \frac{1}{N} \sum_i n_i = N/N = 1$.

Dengan menggunakan dua sifat ini, kita akan mendapatkan probabilitas suatu kejadian. Sebagai contoh eksperimen lempar dadu. Ada enam probabilitas kejadian yaitu P_1, \dots, P_6 . Dari sifat-sifat probabilitas dan dengan asumsi bahwa setiap kejadian memiliki probabilitas yang sama, kita mendapatkan,

$$\begin{aligned} P_1 &= P_2 = \dots = P_5 = P_6 = P_0, \\ P_1 + P_2 + \dots + P_5 + P_6 &= 1, \\ 6P_0 &= 1 \text{ atau } P_0 = \frac{1}{6}, \\ P_1 &= P_2 = \dots = P_5 = P_6 = \frac{1}{6} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Untuk eksperimen dengan kartu, kita mempunyai 52 kartu dan semua memiliki probabilitas yang sama. Karena ada 52 kejadian, P_1, P_2, \dots, P_{52} , maka kita mendapatkan,

$$\begin{aligned} P_1 &= P_2 = \dots = P_{52} = P_0, \\ P_1 + P_2 + \dots + P_{52} &= \sum_{i=1}^{52} = 1, \\ \sum_{i=1}^{52} P_0 &= 52P_0 = 1, \quad P_0 = \frac{1}{52} \\ P_1 &= P_2 = \dots = P_{52} = P_0 = \frac{1}{52} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dua contoh di atas menunjukkan bahwa kita menggunakan asumsi probabilitas semua kejadian adalah sama. Asumsi ini menjadi salah satu syarat awal untuk mendapatkan probabilitas. Tanpa asumsi awal ini kita tidak akan mungkin menentukan probabilitas dengan metode seperti di atas. Aturan umum probabilitas yang sering digunakan adalah sebagai berikut:

Jika kita tidak mengetahui kejadian mana yang lebih sering terjadi, maka asumsi yang kita dapat gunakan adalah probabilitas kejadian-kejadian bernilai sama.

Probabilitas yang diambil dari aturan ini disebut dengan sebuah "priori probability" atau sebuah probabilitas yang ditentukan menggunakan nilai asumsi atau sebelum eksperimen. Sedangkan probabilitas yang didapat dengan $P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} n_i(N)/N$ disebut dengan "posteriori probability" atau "empirical probability". setelah eksperimen. Untuk teori fisis, biasanya menggunakan dasar "a priori probabilities". Justifikasi teori adalah pencocokan hasil dengan eksperimen.

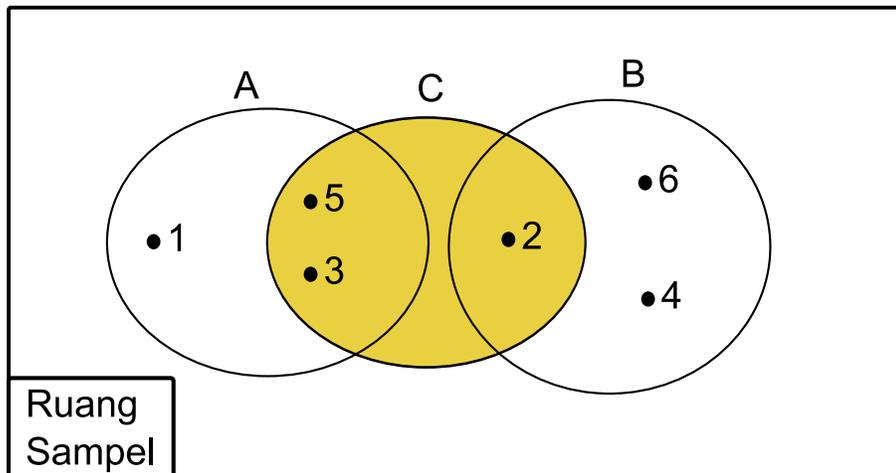
Agar lebih mudah mempelajari (atau juga memperhitungkan) kejadian-kejadian, kita dapat menggambarkan kejadian-kejadian tersebut dengan menggunakan simbol-simbol atau juga dapat berupa titik-titik pada sebuah bidang/ruang sampel. Perlu diingat bahwa di sini kita tidak memperhatikan jarak atau pengaturan simbol-simbol atau titik-titik tetapi kita hanya memperhatikan hanya simbol-simbol atau titik-titik itu sendiri. Sebagai contoh yang ditunjuk pada Gambar 3.2 sebuah ruang sampel untuk eksperimen lempar dadu. Karena ada enam (6) kejadian yang direpresentasikan dengan enam titik yang diberi angka yang sesuai. Tampilan enam angka sebenarnya tidak diperlukan, tetapi ditampilkan pada gambar untuk memperjelas pembagian ruang sampel yang akan digunakan nanti.

Pada ruang sampel, kejadian-kejadian dapat dikelompokkan yang disesuaikan dengan permasalahan yang dihadapi. Contohnya pada Gambar 3.2, kejadian dikelompokkan menjadi kelompok bilangan ganjil (A), bilangan genap (B) dan bilangan prima (C). Probabilitas untuk suatu kelompok, sebut saja kelompok A diperoleh dengan menjumlahkan semua probabilitas kejadian yang termasuk di kelompok A . Jadi,

$$P(A) = \sum_{i \in A} P_i \quad (3.7)$$

atau jumlah semua probabilitas kejadian yang termasuk di kelompok A . Sebagai contoh, untuk kejadian pada eksperimen lempar dadu dan dengan asumsi setiap kejadian mempunyai probabilitas yang sama, kita mendapatkan probabilitas untuk kelompok A (berangka ganjil) adalah $P(A) = P_1 + P_3 + P_5 = 3 \times (1/6) = 1/2$. Begitu pula untuk kelompok B dan C diperoleh probabilitas $P_B = 1/2$ dan $P_C = 1/2$.

Dua kelompok kejadian dapat pula memiliki kejadian yang sama. Seperti eksperimen dadu, kelompok bilangan genap dan bilangan prima memiliki kejadian yang sama yaitu kejadian angka 2. Bagian kelompok yang menjadi bagian yang sama dari dua kelompok dinamakan



Gambar 3.2: Sebuah contoh penggambar kejadian-kejadian pada sebuah bidang/ruang sampel untuk eksperimen pelemparan dadu. Kejadian dikelompokkan menjadi kelompok bilangan ganjil (A), bilangan genap (B) dan bilangan prima (C)

irisan (lihat Gambar 3.3 (b)). Simbol \cap dan kata "dan" mengindikasikan sebuah irisan. Untuk Gambar 3.2, probabilitas bilangan ganjil dan prima adalah $P(A \cap C) = P_3 + P_5 = 1/3$. Notasi lain untuk irisan sering dijumpai tanpa simbol \cap seperti $P(AC) = P(A \cap C)$.

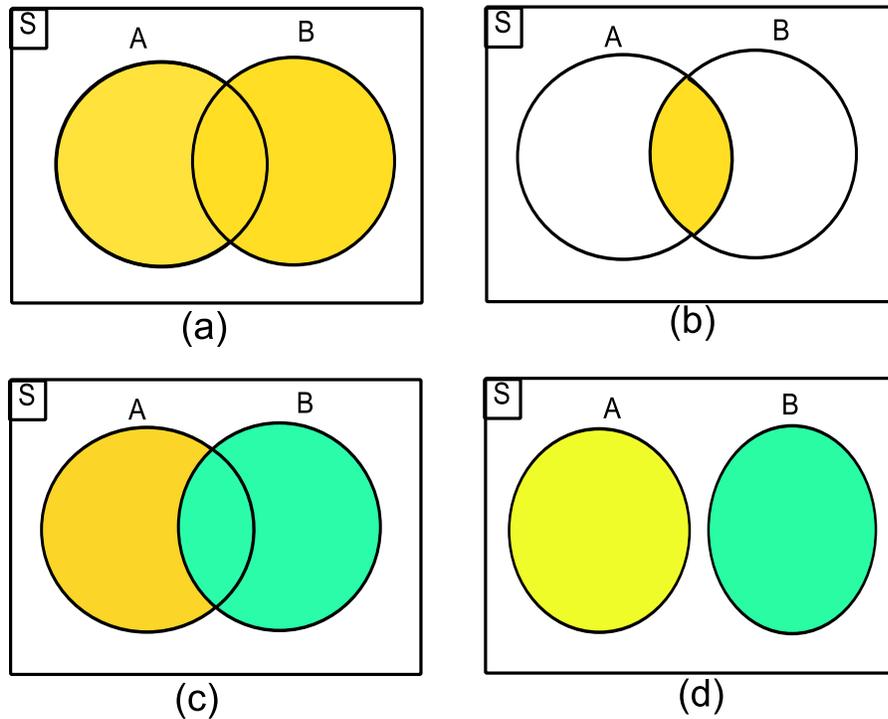
Dari dua kelompok kejadian, kita dapat membentuk satu kelompok gabungan antara dua kelompok ini yang disebut kelompok gabungan (*union*) (lihat Gambar 3.3 (a)). Gabungan biasanya ditandai dengan tanda \cup dan dengan kata penghubung "atau". Seperti pada eksperimen lempar dadu (lihat kembali Gambar 3.2), kelompok bilangan ganjil atau prima adalah 1, 2, 3, 5, sehingga probabilitasnya adalah $P(A \cup C) = 4 \times (1/6) = 2/3$.

Probabilitas untuk gabungan dua kelompok yang memiliki anggota yang sama (mempunyai irisan) (atau tidak terpisah atau tersambung) yaitu

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B) \quad (3.8)$$

Seperti contoh eksperimen lempar dadu, probabilitas kelompok bilangan ganjil $P(A) = 1/2$ dan probabilitas kelompok bilangan prima $P(C) = 1/2$ dan $P(A \cap C) = 1/3$, kita memperoleh $P(A \cup C) = P(A) + P(C) - P(A \cap C) = 1/2 + 1/2 - 1/3 = 2/3$ sesuai dengan nilai hasil sebelumnya.

Dua kelompok (umpama A dan B) yang terpisah (lihat Gambar 3.3



Gambar 3.3: Kelompok terbentuk dari (a) gabungan ($A \cup B$) dan (b) irisan dua kelompok ($A \cap B$). Dua kelompok yang (c) tidak terpisah ($A \cap B \neq \emptyset$) dan (d) terpisah ($A \cap B = \emptyset$)

(d) berarti bahwa tidak ada kejadian yang masuk kedua kelompok tersebut atau $A \cap B = \emptyset$. Probabilitas untuk kejadian yang termasuk kedua kelompok sama dengan nol, $P(A \cap B) = 0$. Jadi untuk dua kelompok yang terpisah, probabilitas gabungan dua kelompok ini adalah jumlah probabilitas dua kelompok ini.

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) \text{ Jika } A \text{ dan } B \text{ yang terpisah} \quad (3.9)$$

Selain menggabungkan kelompok-kelompok kejadian, kita juga dapat mengkaji apakah kejadian yang satu mempengaruhi kejadian yang lain. Untuk mempelajari ini, kita mendefinisikan sebuah probabilitas kondisional atau bersyarat yaitu probabilitas yang menjadi ukuran efek (jika ada) munculnya kejadian A jika sudah diketahui kejadian B sudah terjadi. Sebagai contoh, berapakah probabilitas kita ambil kartu bernomor 5 jika kita sudah tahu kartu yang kita ambil itu adalah kartu jantung? Karena ada 13 jenis kartu jantung maka probabilitasnya menjadi $1/13$.

Persamaan untuk menghitung probabilitas untuk kondisi bersyarat adalah

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad (3.10)$$

Notasi $P(A|B)$ menyatakan probabilitas kejadian untuk kelompok A jika kita sudah mengetahui bahwa terjadi kejadian dari kelompok B . Jadi untuk eksperimen ambil kartu, probabilitas kartu bernomor 5 jika kita sudah tahu bahwa kartu jantung adalah $P(A|B) = P(A \cap B)/P(B) = (1/52)/(1/4) = 1/13$ dimana A adalah kelompok dengan kartu bernomor 5 dan B adalah kelompok kartu jantung.

Secara umum, probabilitas dengan kondisi bersyarat tidak memenuhi sifat komutatif,

$$P(A|B) \neq P(B|A) \quad (3.11)$$

Jika,

$$\begin{aligned} P(A|B) &= P(A) \\ P(B|A) &= P(B) \\ \text{sehingga} \\ P(AB) &= P(A)P(B) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Ini berarti kita memiliki dua kejadian yang independen, atau tidak saling mempengaruhi. $P(A|B) = P(A)$ menunjukkan bahwa kejadian untuk kelompok A tidak dipengaruhi oleh kondisi B . Begitu pula sebaliknya, $P(B|A) = P(B)$ menyatakan terjadinya kejadian B tidak dipengaruhi oleh kejadian A .

Probabilitas untuk kondisi bersyarat akan berguna nantinya dalam menurunkan probabilitas suatu sistem memiliki energi tertentu.

3.1 Fungsi distribusi

Berkaitan dengan nilai probabilitas untuk satu kejadian pada suatu eksperimen, kita dapat menggunakan sebuah fungsi distribusi probabilitas yang mendiskripsikan seluruh sebaran probabilitas pada semua kejadian pada ruang sampel. Untuk mempelajari fungsi-fungsi distribusi probabilitas, mari kita melihat contoh probabilitas untuk eksperimen lempar dadu. Jika kita menggunakan satu dadu, kita mendapatkan distribusi probabilitas yang diskrit yaitu $P(i) = 1/6$ untuk $i = 1, 2, \dots, 6$. Untuk eksperimen menggunakan dua dadu distribusi probabilitas jumlah hasil dua dadu tersebut bisa dilihat pada Tabel

Tabel 3.1: Jumlah angka untuk eksperimen lempar dadu

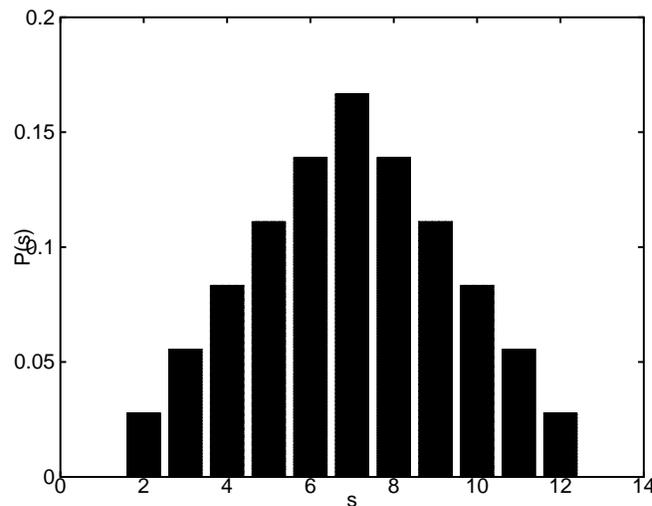
^a Ruang Sampel (i,j)	Jumlah x = i+j	Probabilitas Probabilitas
(1,1)	2	$\frac{1}{36}$
(1,2) (2,1)	3	$\frac{2}{36}$
(1,3) (2,2) (3,1)	4	$\frac{3}{36}$
(1,4) (3,2) (2,3) (4,1)	5	$\frac{4}{36}$
(1,5) (4,2) (3,3) (2,4) (5,1)	6	$\frac{5}{36}$
(1,6) (5,2) (4,3) (3,4) (2,5) (6,1)	7	$\frac{6}{36}$
(6,2) (5,3) (4,4) (3,5) (2,6)	8	$\frac{5}{36}$
(6,3) (5,4) (4,5) (3,6)	9	$\frac{4}{36}$
(6,4) (5,5) (4,6)	10	$\frac{3}{36}$
(6,5) (5,6)	11	$\frac{2}{36}$
(6,6)	12	$\frac{1}{36}$

^aNote: The minipage environment also places footnotes correctly.

3.1 dan Gambar 3.4 yang berupa sebuah histogram. Di sini kita tidak tertarik pada setiap kejadian, melainkan kita hanya memperhatikan jumlah dari hasilnya. Sehingga distribusi probabilitas hanya tergantung pada jumlah hasil dua dadu tersebut. Untuk eksperimen dengan jumlah dadu yang lebih banyak, ambil saja 24 dadu, distribusi probabilitas ditunjukkan pada Gambar 3.5. Dari contoh-contoh ini kita bisa simpulkan bahwa probabilitas untuk jumlah dadu ini adalah sebuah fungsi dari x (jumlah dadu). Distribusi $P(x)$ menentukan bagaimana probabilitas tersebar pada semua jumlah x atau $P(x)$ adalah sebuah fungsi dari x .

Untuk eksperimen lempar dadu, kita menggunakan variabel x atau hasil jumlah dari kejadian dua dadu. Atau $x = i + j$ di mana i dan j adalah nilai dua kejadian untuk dadu pertama dan kedua. Jadi dengan kata lain, $x = X(x)$ merupakan sebuah fungsi dari i dan j . Dengan kata lain, fungsi $X(x)$ memberikan nilai untuk kejadian-kejadian sederhana i dan j . Variabel atau fungsi X sering dikenal dengan nama **variabel acak atau random**. Fungsi $P(x)$ merupakan distribusi probabilitas untuk variabel acak X .

Contoh dadu di atas, merupakan sebuah contoh probabilitas untuk hasil yang diskrit. Umpamanya kita mempunyai sebuah detector



Gambar 3.4: Distribusi probabilitas untuk jumlah hasil lempar dua dadu.

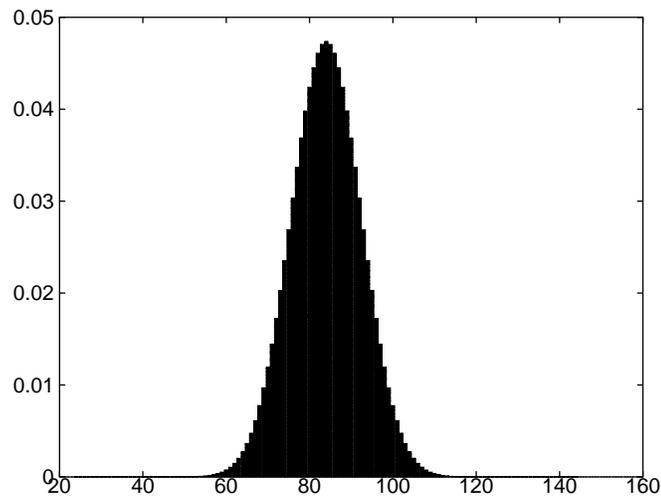
cahaya yang mempunyai lebar Δ dan kita ingin mengamati proses difraksi cahaya melalui sebuah celah. Pengamatan kita menghasilkan distribusi cahaya yang tergantung pada posisi x dan lebar detektor yaitu sebuah fungsi $P(x, \Delta)$. Fungsi ini dapat diartikan probabilitas cahaya diterima oleh detektor pada posisi x . Jika lebar detektor Δ diperkecil, akan terlihat nilai $P(x, \Delta)/\Delta$ akan menjadi lebih halus dan mendekati sebuah fungsi $f(x)$ atau

$$f(x) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{P(x, \Delta)}{\Delta} = \frac{P(x)}{dx} \quad (3.13)$$

atau

$$f(x)dx = P(x) \quad (3.14)$$

$f(x)$ disebut dengan nama fungsi distribusi kerapatan (atau densitas) probabilitas. Perlu diingat bahwa $f(x)$ bukanlah sebuah probabilitas pada posisi x , tetapi merupakan kerapatan probabilitas. Sedangkan $P(x) = f(x)dx$ adalah probabilitas pada daerah antar x dan $x + dx$. Jadi perlu kita perhatikan bahwa untuk sistem yang kontinu, kita memiliki kerapatan probabilitas $f(x)$ dan probabilitasnya tergantung pada luas daerah dibawah kurva seperti diperlihatkan pada Gambar 3.6.



Gambar 3.5: Distribusi probabilitas untuk jumlah hasil lempar 24 dadu.

Seperti sebelumnya, total probabilitas selalu sama dengan satu, maka kita memperoleh

$$\sum_{x=-\infty}^{\infty} P(x, \Delta) = \sum_{x=-\infty}^{\infty} f(x)dx \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1 \quad (3.15)$$

Jika kita ingin mengetahui probabilitas pada interval antara (x_1, x_2) adalah

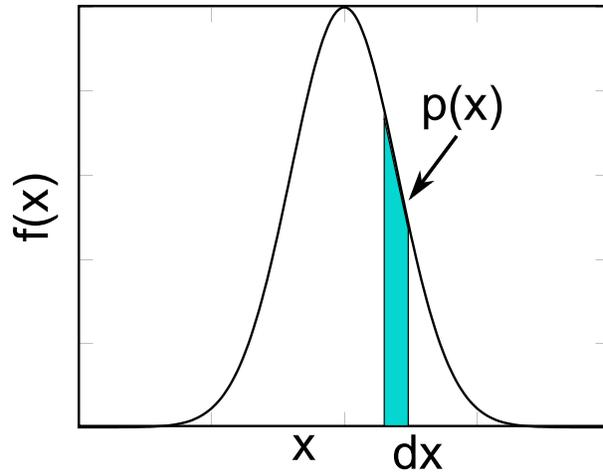
$$\sum_{x_1 \leq x \leq x_2} P(x) \rightarrow \sum_{x=x_1}^{x_2} f(x)dx \quad (3.16)$$

Untuk ruang dua maupun tiga dimensi kita menggunakan probabilitas yaitu

$$P(x, y) = f(x, y)dxdy \text{ dan } P(x, y, z) = f(x, y, z)dxdydz \quad (3.17)$$

Mengubah probabilitas dari dua dimensi ke satu dimensi dengan cara mengintegrasikan salah satu variabel, sebagai contoh

$$f(x)dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)dy \quad (3.18)$$



Gambar 3.6: Sebuah amplitudo probabilitas dan ilustrasi nilai probabilitas.

Untuk koordinat polar, kita mempunyai distribusi probabilitas,

$$P(r, \theta) = F(r, \theta) dr d\theta \quad (3.19)$$

Hubungan probabilitas untuk sistem koordinat Kartisius dan Polar adalah sebagai berikut.

$$\begin{aligned} P(x, y) &= f(x, y) dx dy \\ x &= r \cos \theta \quad \text{dan} \quad y = r \sin \theta \\ dx dy &= r dr d\theta \\ P(x, y) &= f(r \cos \theta, r \sin \theta) r dr d\theta = P(r, \theta, dr, d\theta) \\ F(r, \theta) &= r f(r \cos \theta, r \sin \theta) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Dengan cara yang sama dapat dilakukan untuk ruang tiga dimensi, kita memperoleh $F(r, \theta, \phi) = [r^2 \sin \theta] f(r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$.

Sebagai contoh, distribusi probabilitas untuk gas dengan kecepatan v_x , v_y dan v_z adalah

$$P(v_x, v_y, v_z) = f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z \quad (3.21)$$

distribusi berbentuk fungsi Gauss yaitu $f(\vec{v}) = \sqrt{\alpha/\pi} \exp(-\alpha v^2)$, di mana $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$.

3.2 Nilai Ekspektasi atau Rata-Rata

Setelah probabilitas $P(x)$ atau $P(i)$ sudah ditentukan, kita dapat menghitung nilai ekspektasi (atau rata-rata) suatu variabel atau kuantitas. Nilai ekspektasi untuk sebuah variabel x dengan probabilitas $P(x)$ didefinisikan sebagai berikut,

$$\langle x \rangle = \sum_i^N x_i P(x_i) \quad (3.22)$$

$$= x_1 P(x_1) + x_2 P(x_2) + \cdots + x_N P(x_N) \quad (3.23)$$

Nilai rata-rata untuk variabel x^2 didefinisikan dengan,

$$\langle x^2 \rangle = \sum_i x_i^2 P(x_i) \quad (3.24)$$

Secara umum nilai rata-rata suatu kuantitas g adalah

$$\langle g \rangle = \sum_i g_i P(x_i) \quad (3.25)$$

Jika g merupakan sebuah fungsi yang kontinu, $g(x)$, maka simbol \sum diganti dengan integrasi dan $P(x) \rightarrow f(x)dx$.

$$\langle g(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx \quad (3.26)$$

Sebagai contoh:

$$f(x) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \exp(-\beta x^2) \quad (3.27)$$

kita mendapatkan nilai rata-rata,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \exp(-\beta x^2) dx = 0 \quad (3.28)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \exp(-\beta x^2) dx = \frac{1}{2\beta} \quad (3.29)$$

Sebuah kuantitas yang sering diperlukan dalam eksperimen adalah kuantitas yang menyatakan seberapa besar hasil eksperimen ber-

beda dengan nilai rata-rata. Umpamanya kita mencoba mendefinisikan sebuah beda $x - \langle x \rangle$, nilai ekspektasi beda ini adalah

$$\begin{aligned} \langle x - \langle x \rangle \rangle &= \sum_i (x_i - \langle x \rangle) P(x_i) \\ &= \sum_i x_i P(x_i) - \langle x \rangle \sum_i P(x_i) = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

Karena nilai beda adalah nol, maka kita tidak bisa menggunakan deviasi dengan cara di atas. Metode lain yang sering digunakan adalah kuadrat beda, $(x - \langle x \rangle)^2$. Ekspektasi kuadrat beda yaitu

$$\begin{aligned} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &= \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle \\ &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = var(x) \end{aligned} \quad (3.31)$$

atau yang disebut variansi (x) atau disebut juga dispersi.

Untuk fungsi kontinu,

$$var(x) = \int_{x_1}^{x_2} (x - \langle x \rangle)^2 f(x) dx \quad (3.32)$$

Nilai deviasi diperoleh dari nilai variansi dengan persamaan,

$$\sigma = \sqrt{var(x)} \quad (3.33)$$

Kuantitas $\langle x \rangle$ dan $var(x)$ tidaklah sepenuhnya menentukan sifat-sifat sistem yang kita pelajari, tetapi dua kuantitas ini menentukan sifat-sifat penting sistem tersebut. Nanti kita akan menggunakan konsep ini pada Bab ?.

Selain nilai ekspektasi dan deviasi, kita akan menggunakan konsep nilai yang sering muncul atau "most probable event" atau nilai yang memiliki probabilitas tertinggi atau modus. Nilai modus diperoleh dengan menggunakan kondisi bahwa nilai kemiringan atau turunan pada titik puncak adalah nol atau

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_m} = 0 \quad (3.34)$$

Jadi untuk menyelesaikan persamaan (3.34) untuk mendapatkan nilai modus.

3.3 Ketidakpastian atau uncertainty

Konsep statistik yang sangat erat kaitannya dengan fisika statistik adalah konsep ketidakpastian (atau *uncertainty*). Konsep ketidakpastian dalam teori informasi bisa diartikan sebagai ketidaktahuan. Konsep ini penting karena dalam fisika statistik, kita tidak mengetahui informasi yang lengkap tentang sistem fisis. Apa itu ketidakpastian? Apakah ketidakpastian bisa diukur? Agar lebih jelas, mari kita pelajari contoh-contoh berikut ini.

Umpamanya kita melakukan eksperimen dengan koin-koin yang berbeda, kita menemukan bahwa:

1. Koin I: probabilitas $P_m = 1/2$ dan $P_b = 1/2$. [Paling tidak pasti]
2. Koin II: probabilitas $P_m = 4/5$ dan $P_b = 1/5$.
3. Koin II: probabilitas $P_m = 1/5$ dan $P_b = 4/5$.
4. Koin III: probabilitas $P_m = 199/200$ dan $P_b = 1/200$.
5. Koin IV: probabilitas $P_m = 1$ dan $P_b = 0$. [Paling pasti]

Dari kelima hasil ini kita dapat menyimpulkan bahwa eksperimen dengan koin I memiliki ketidakpastian yang paling tinggi, kemudian diikuti oleh eksperimen dengan koin II, III dan IV. Ketidakpastian yang paling rendah adalah untuk koin V. Ini menunjukkan bahwa nilai ketidakpastian dipengaruhi oleh nilai probabilitas setiap kejadian. Ketidakpastian yang paling tinggi terjadi jika semua kejadian memiliki probabilitas yang sama dan ketidakpastian yang terendah bernilai nol jika salah satu kejadian (anggap itu kejadian j) mempunyai probabilitas sama dengan satu ($P_j = 1$). Ketidakpastian untuk koin II dan III haruslah sama karena kita tidak membedakan antara urutan kejadian. Ini menunjukkan pula bahwa ketidakpastian harus bersifat simetrik.

Sekarang kita pertimbangkan eksperimen dengan probabilitas setiap kejadian adalah sama tetapi memiliki jumlah kejadian yang berbeda seperti berikut ini:

1. Koin : probabilitas $P_m = 1/2$ dan $P_b = 1/2$. [Paling pasti]
 2. Dadu : probabilitas $P_1 = 1/6, \dots$, dan $P_6 = 1/6$.
 3. Kartu : probabilitas $P_1 = 1/52, \dots$, dan $P_{52} = 1/52$. [Paling tidak pasti]
-

Tiga eksperimen dengan koin, dadu dan kartu, kita dapat menyimpulkan bahwa eksperimen dengan kartu I memiliki ketidakpastian yang paling tinggi, kemudian diikuti oleh eksperimen dengan dadu. Ketidakpastian yang paling tinggi adalah untuk kartu. Ketidakpastian yang tertinggi terjadi pada eksperimen yang memiliki jumlah kejadian yang terbanyak.

Sekarang bagaimana jika kita melakukan dua eksperimen yang berbeda (umpamanya dengan koin dan dadu) secara bersamaan? Jika kita sudah tahu hasil kejadian untuk koin, ketidakpastian yang tersisa adalah ketidakpastian untuk dadu saja. Begitu pula sebaliknya, jika kita tahu pasti hasil kejadian untuk dadu, berarti ketidakpastian hanya pada koin saja. Jadi dari argumentasi ini kita menyimpulkan bahwa ketidakpastian untuk dua eksperimen, bernilai lebih besar dibandingkan ketidakpastian masing-masing. Secara intuisi kita bisa menganggap bahwa ketidakpastian dua eksperimen yang berbeda merupakan jumlah dari ketidakpastian masing-masing eksperimen.

Dari dua contoh kasus diatas, kita ingin menentukan ukuran ketidakpastian suatu eksperimen yang konsisten dengan kesimpulan yang kita peroleh dengan mempertimbangkan dua kasus tersebut. Karena ketidakpastian hanya dipengaruhi oleh probabilitas, maka ukuran ketidakpastian akan diberi notasi $H(p_1, p_2, \dots, p_N)$ yang merupakan sebuah fungsi probabilitas masing-masing kejadian $j = 1, 2, \dots, N$.

Dari penjelasan di atas, kita memperoleh sifat-sifat yang dimiliki ketidakpastian yaitu:

1. Ketidakpastian dari suatu eksperimen hanya tergantung pada probabilitas semua kejadian P_i .
 2. Ketidakpastian dari suatu eksperimen bernilai maksimum terjadi jika semua probabilitas bernilai sama.
 3. Jika salah satu kejadian mempunyai probabilitas sama dengan satu, maka ini berarti ketidakpastian sama dengan nol.
 4. Ketidakpastian tidak tergantung pada urutan probabilitas P_i atau bersifat simetrik.
 5. Ketidakpastian dari dua eksperimen yang berbeda (atau independen) adalah merupakan jumlah dari ketidakpastian dari masing-masing eksperimen.
-

Kita bisa membuktikan (berikan di Lampiran), bahwa fungsi yang memenuhi semua sifat-sifat ketidakpastian di atas adalah

$$H(P_1, P_2, \dots, P_n) = - \sum_{i=1}^n P_i \ln(P_i) \quad (3.35)$$

Perlu diingat ada tanda negatif di depan simbol jumlah.

Fungsi H pertama dikemukakan oleh Ludwig Boltzmann pada tahun 1874 untuk membuktikan hasil pada teori gas kinetik. Tetapi Boltzmann menggunakan bentuk integral yaitu,

$$H = - \int f(x) \ln(f(x)) dx = - \langle \ln(f(x)) \rangle \quad (3.36)$$

Untuk probabilitas pada ruang dua dimensi, kita memperoleh

$$H = - \iint f(x, y) \ln(f(x, y)) dx dy = - \langle \ln(f(x, y)) \rangle \quad (3.37)$$

Jika $f(x, y) = g(x)h(y)$, di mana $g(x)$ dan $h(y)$ merupakan dua hal yang berbeda (atau independen), maka

$$H = - \int g(x) \ln(g(x)) dx - \int h(y) \ln(h(y)) dy \quad (3.38)$$

Untuk mempelajari bagaimana menghitung ketidakpastian, sebagai contoh sebuah partikel ada pada ruang satu dimensi dan bergerak pada interval $0 \leq x \leq 3$. Jika kita berasumsi bahwa kerapatan probabilitas sama untuk semua lokasi, maka kerapatan probabilitas adalah $f(x) = 1/3$. Ini karena $f(x) = \text{konstan} = f_0$ dan $\int_0^3 f(x) dx = f_0 \int_0^3 dx = 3f_0 = 1$ sehingga $f_0 = 1/3$. Jadi ketidakpastian untuk partikel ini adalah

$$\begin{aligned} H &= - \int_{x_1}^{x_2} f(x) \ln(f(x)) dx \\ &= - \int_0^3 \left(\frac{1}{3}\right) \ln\left(\frac{1}{3}\right) dx \\ &= \frac{1}{3} \ln(3) \int_0^3 dx \\ &= \ln(3) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Jika ruang gerak partikel ini diperlebar menjadi $0 \leq x \leq 6$, maka dengan cara yang sama kita mendapatkan $f(x) = 1/6$ dan ketidakpastian,

$$\begin{aligned}
H &= - \int_{x_1}^{x_2} f(x) \ln(f(x)) dx \\
&= - \int_0^6 \left(\frac{1}{6}\right) \ln\left(\frac{1}{6}\right) dx \\
&= \frac{1}{6} \ln(6) \int_0^6 dx \\
&= \ln(6)
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Jadi dapat di simpulkan bahwa dengan memperlebar ruang gerak partikel ini, ketidakpastian lokasi partikel ini meningkat. Atau dengan kata lain kita kehilangan informasi letak lokasi partikel. Dari nilai-nilai ini kita bisa menghitung kehilangan informasi sebanyak $\ln(6) - \ln(3) = \ln(6/3) = \ln(2)$.

Ini merupakan sebuah contoh ketidakpastian berubah karena kita mengubah sifat fisis lingkungannya. Selain itu pula, umpamanya pada awalnya dalam pengamatan mengatakan bahwa lokasi partikel adalah $0 \leq x \leq 10$, tetapi setelah pengamatan lagi lokasinya $0 \leq x \leq 4$. Jadi ketidakpastian lokasi partikel menurun. Jadi kita bisa simpulkan bahwa ketidakpastian dipengaruhi oleh informasi yang kita miliki.

Ringkasan

Konsep-konsep penting yang perlu diingat untuk bab ini adalah:

- Definisi secara empiris probabilitas P_i dari sebuah kejadian i adalah

$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i}{N}$$

- Sifat-sifat nilai probabilitas untuk suatu eksperimen yaitu

1.

$$0 \leq P_i \leq 1 \quad \text{untuk semua kejadian } i$$

2.

$$\sum_i P_i = 1 \quad \text{Jumlah untuk semua kejadian } i$$

- Pada suatu eksperimen dengan nilai-nilai probabilitas $P_i = P(x_i)$, nilai ekspektasi atau rata-rata suatu kuantitas g dihitung menggunakan

$$\langle g \rangle = \sum_i g_i P(x_i)$$

Jika g dan $P(x)$ merupakan fungsi yang kontinu, maka nilai ekspektasinya adalah

$$\langle g(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx$$

- Fungsi ketidakpastian H dari suatu eksperimen didefinisikan dengan

$$H(P_1, P_2, \dots, P_n) = - \sum_{i=1}^n P_i \ln(P_i)$$

atau

$$H = - \int f(x) \ln(f(x)) dx = - \langle \ln(f(x)) \rangle$$

4

Gerak Acak

Bab ini akan membahas tentang gerak acak atau *random walks* atau juga dikenal dengan *drunkards walks*. Metode gerak acak dapat digunakan untuk mempelajari banyak fenomena seperti gerak Brown, perambatan cahaya melalui suatu medium, pelemparan koin, polimer, pergerakan harga saham dan sebagainya.

Sebagai salah satu contoh, gerak Brown merupakan gerak acak yang disebabkan oleh tumbukan antara molekul-molekul di dalam gas atau suatu larutan. Sebagai contoh pergerakan molekul gas oksigen di udara, lintasan gerak setiap molekul berupa garis lurus (jika tidak ada tumbukan) dan berbelok (arah dan kecepatan berbeda jika bertumbukan dengan molekul lain) sehingga lintasan molekul seperti garis bergerigi. Lintasan yang acak ini diperlihatkan pula pada perambatan cahaya melalui medium seperti cairan susu dan pada pergerakan harga saham. Bentuk polimer juga menyerupai bentuk gerakan acak, tetapi pada polimer ada tambahan ketentuan bahwa molekul tidak dapat overlap.

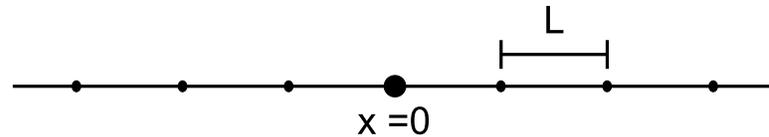
Walaupun gerak acak pada hal yang berbeda terlihat berbeda, tetapi secara statistik semua gerak acak memiliki sifat yang hampir sama. Secara universal mempunyai mekanisme/proses yang sama. Pada eksperimen dengan sejumlah N koin, jumlah dari angka-angka (bernilai 1 jika kejadian kepala atau bagian depan dan -1 jika kejadian ekor atau bagian belakang) mempunyai distribusi yang sama dengan gerak acak N langkah.

Simulasi pergerakan secara acak dapat digunakan pula untuk menyelesaikan persamaan difusi.

$$\frac{d\rho(r, t)}{dt} = D\nabla^2\rho(r, t) \quad (4.1)$$

4.1 Gerak Acak Dimensi Satu

Sekarang kita akan mempelajari gerak acak dari sebuah partikel pada ruang satu dimensi untuk mempermudah analisis. Di sini, pergerakan partikel dalam satu garis dan untuk mempermudah kita menggunakan perpindahan pada grid dengan jarak antara titik grid adalah L seperti ditunjukkan pada Gambar 4.1.



Gambar 4.1: Partikel mulai dari titik $x = 0$ berpindah secara acak

Umpama partikel mempunyai peluang berpindah ke kanan yaitu p dan ke kiri $q = 1 - p$. Karena total peluang harus satu maka $p + q = 1$.

Setelah berpindah sebanyak N kali, pertanyaan yang kita ingin ketahui adalah berapakah probabilitas partikel berada pada posisi $x = mL$, di mana m adalah bilangan bulat? Kita tahu bahwa perpindahan maksimum dari partikel tersebut adalah N langkah dan m bernilai antara $(-N, N)$ atau $-N \leq m \leq N$.

Kita ingin mendapatkan probabilitas partikel pada posisi $x = mL$ setelah N perpindahan (langkah). Umpama dalam N langkah terdapat n_1 langkah ke kanan dan n_2 langkah ke kiri. Dari informasi ini kita mendapatkan bahwa

$$N = n_1 + n_2 \quad (4.2)$$

Dan posisi partikel adalah

$$\begin{aligned} m &= n_1 - n_2 \text{ atau} \\ &= n_1 - (N - n_1) \text{ atau} \\ &= 2n_1 - N \end{aligned} \quad (4.3)$$

Dari rumus di atas bisa kita simpulkan bahwa nilai m juga genap jika N bernilai genap dan m bernilai ganjil jika N ganjil.

Seperti bab sebelumnya, kita berasumsi setiap langkah dilakukan secara independen atau tidak tergantung pada langkah sebelumnya. Jadi setiap langkah kita dapat memberikan peluang p untuk langkah ke kanan dan $q = 1 - p$ untuk langkah ke kiri. Karena ada N langkah yang independen, maka peluang mendapatkan satu kejadian n_1

ke kanan dan n_2 ke kiri adalah perkalian dari p sebanyak n_1 dan q sebanyak n_2 .

$$\underbrace{p \cdot p \cdot p \cdots p}_{\text{sebanyak } n_1} \times \underbrace{q \cdot q \cdot q \cdots q}_{\text{sebanyak } n_2} = p^{n_1} q^{n_2} = p^{n_1} q^{N-n_1} \quad (4.4)$$

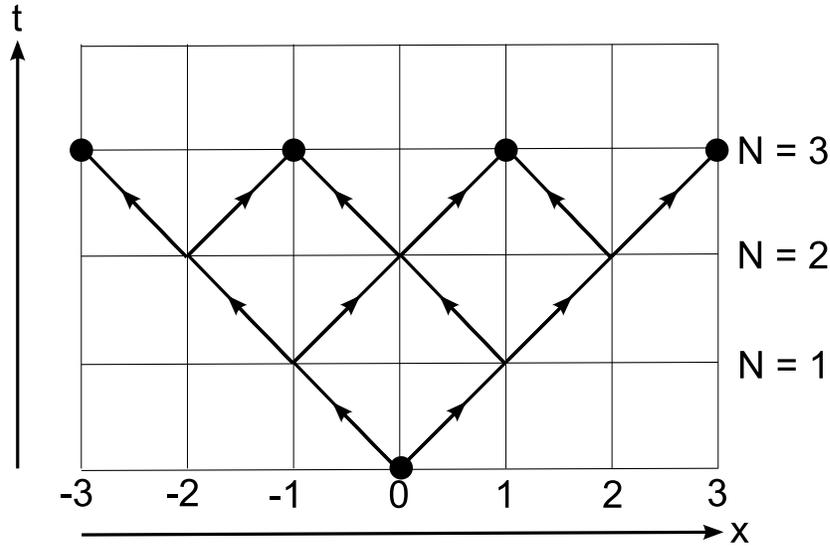
Mendapatkan n_1 langkah ke kanan dan n_2 ke kiri bisa diperoleh dengan beberapa cara. Ini berhubungan dengan pengaturan langkah-langkah yang ke kanan dan ke kiri atau permutasi. Jika ada N langkah, maka permutasi (banyaknya pengaturan N hal yang berbeda) adalah $N!$. Karena ada n_1 dan n_2 langkah-langkah yang sama, maka kita harus membagi $N!$ dengan banyaknya permutasi n_1 dan n_2 atau $n_1!n_2!$. Jadi banyaknya kemungkinan mendapatkan N langkah sehingga ada n_1 ke kanan dan n_2 ke kiri adalah

$$M = \frac{N!}{n_1!n_2!} = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \quad (4.5)$$

Sebagai contoh untuk $N = 2$ dan $N = 3$ ditunjukkan pada Gambar 4.2 dan Tabel 4.1. Pada Gambar 4.2 terlihat jelas bahwa untuk mendapatkan $m = 2$ dengan $N = 3$ ada tiga cara atau jalur yang bisa dilalui atau digunakan. Dengan cara yang sama kita bisa memperoleh banyaknya cara atau jalur untuk m yang berbeda (lihat Tabel 4.1). Pada Gambar 4.2 dan Tabel 4.1 ditunjukkan pula bahwa jika N ganjil, m juga bernilai ganjil dan jika N genap, m juga genap.

Tabel 4.1: Jumlah cara untuk mendapatkan perpindahan n_1 langkah ke kanan dan n_2 langkah ke kiri.

n_1	n_2	m	cara
$N = 2$			
2	0	2	1
1	1	0	2
0	2	-2	1
$N = 3$			
3	0	3	1
2	1	1	3
1	2	-1	3
0	3	-3	1



Gambar 4.2: Partikel mulai dari titik $x = 0$ berpindah secara acak ke kanan dan ke kiri dengan probabilitas p dan q dan setiap langkah berjarak $L = 1$.

Jadi, probabilitas untuk langkah n_1 ke kanan diperoleh dengan mengalikan probabilitas untuk satu kejadian (Pers. (4.4)) dengan banyaknya cara mendapatkan hal yang sama (Pers. (4.5)) adalah

$$W_N(n_1) = \frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} \times p^{n_1} q^{N-n_1} \quad (4.6)$$

Probabilitas ini berhubungan dengan ekspansi Binomial yang mempunyai bentuk sebagai berikut:

$$(p + q)^N = \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} \times p^{n_1} q^{N-n_1} \quad (4.7)$$

Oleh karena itu probabilitas yang dihasilkan oleh gerak acak ini adalah probabilitas Binomial.

Kita mengetahui bahwa nilai m berhubungan langsung dengan nilai n_1 atau $m = 2n_1 - N$. Jadi jika kita tahu terdapat n_1 langkah ke kanan, maka kita juga tahu nilai m . Dengan kata lain, mengetahui probabilitas n_1 , ini berarti juga kita mengetahui probabilitas untuk m . Jadi probabilitas untuk partikel pada posisi m adalah sama dengan probabilitas untuk n_1 yaitu

$$P_N(m) \equiv W_N(n_1) \quad (4.8)$$

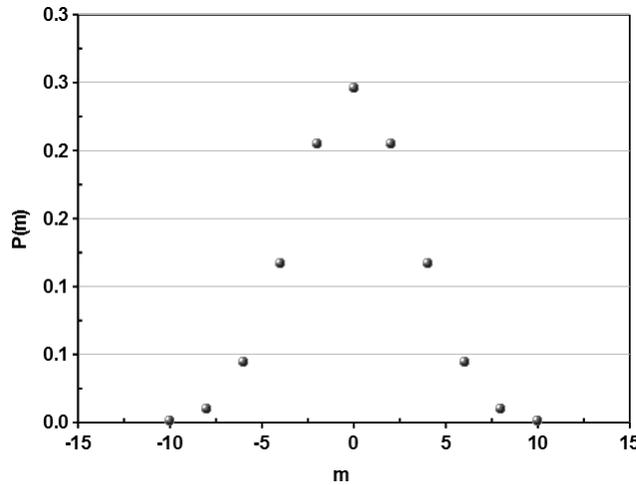
Karena $n_1 = (1/2)(N+m)$ dan $n_2 = (1/2)(N-m)$, maka, probabilitas untuk posisi m adalah

$$P_N(m) = \frac{N!}{[(N+m)/2]![(N-m)/2]!} \times p^{\frac{N+m}{2}} q^{\frac{N-m}{2}} \quad (4.9)$$

Jika probabilitas p dan q sama, persamaan di atas menjadi lebih sederhana yaitu

$$P_N(m) = \frac{N!}{[(N+m)/2]![(N-m)/2]!} \left(\frac{1}{2}\right)^N \quad (4.10)$$

Contoh distribusi probabilitas gerak acak untuk $N = 10$ dan $p = q = 0.5$ ditunjukkan pada Gambar 4.3.



Gambar 4.3: Distribusi probabilitas gerak acak dengan $N = 10$ dan $p = q = 0.5$.

Dari probabilitas Pers. (4.9), kita dapat memperoleh nilai rata-rata yaitu

$$\langle m \rangle = \langle n_1 \rangle - \langle n_2 \rangle \quad (4.11)$$

$$\langle n_1 \rangle = pN \quad (4.12)$$

$$\langle n_2 \rangle = qN \quad (4.13)$$

$$\langle m \rangle = (p - q)N \quad (4.14)$$

$$\text{var}(m) = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 = 4Npq \quad (4.15)$$

$$\sigma(m) = 2\sqrt{Npq} \quad (4.16)$$

Ketika N bernilai cukup besar, distribusi probabilitas terlihat akan lebih halus. Jika $N \rightarrow \infty$, nilai probabilitas $W_N(n_1)$ dapat diaproksimasi dengan

$$W(n_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} \exp \left[-\frac{(n_1 - Np)^2}{2Npq} \right] \quad (4.17)$$

atau

$$W(n_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2/2}} \exp \left[-\frac{(n_1 - \langle n_1 \rangle)^2}{\sigma^2/2} \right] \quad (4.18)$$

Fungsi probabilitas persamaan 4.9 memenuhi sifat normalisasi. Untuk membuktikan hal itu kita menggunakan rumus Binomial (persamaan 4.7).

$$\begin{aligned} \sum P_N(m) &= \sum_{n_1=0}^N W_N(n_1) \\ &= \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} \\ &= (p+q)^N = 1^N = 1 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Nilai rata-rata $\langle n_1 \rangle$ adalah

$$\begin{aligned} \langle n_1 \rangle &= \sum_{n_1=0}^N n_1 W_N(n_1) \\ &= \sum_{n_1=0}^N n_1 \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} \\ &= \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} [n_1 p^{n_1}] q^{N-n_1} \\ &= \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \left[p \frac{\partial p^{n_1}}{\partial p} \right] q^{N-n_1} \\ &= \left[p \frac{\partial}{\partial p} \right] \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} \\ &= p \frac{\partial}{\partial p} (p+q)^N \\ &= pN(p+q)^{N-1} \\ &= pN \end{aligned} \quad (4.20)$$

di sini kita menggunakan $n_1 p^N = p \frac{\partial p^{n_1}}{\partial p}$ dan $p + q = 1$.

Dari hasil di atas maka dapat diperoleh nilai rata-rata $\langle n_2 \rangle$ yaitu

$$\langle n_2 \rangle = \langle N - n_1 \rangle = N - \langle n_1 \rangle = N - pN = qN \quad (4.21)$$

sehingga $\langle m \rangle = (p - q)N$.

untuk menentukan variansi dari n_1 , kita harus menentukan $\langle n_1^2 \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle n_1 \rangle &= \sum_{n_1=0}^N n_1^2 W_N(n_1) \\ &= \sum_{n_1=0}^N n_1^2 \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} \\ &= \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} [n_1^2 p^{n_1}] q^{N-n_1} \\ &= \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \left[p \frac{\partial}{\partial p} \right]^2 p^{n_1} q^{N-n_1} \\ &= \left[p \frac{\partial}{\partial p} \right]^2 \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \left[p \frac{\partial}{\partial p} \right]^2 p^{n_1} q^{N-n_1} \\ &= \left[p \frac{\partial}{\partial p} \right]^2 (p+q)^N \\ &= p[N(p+q)^{N-1} + pN(N-1)(p+q)^{N-2}] \\ &= p[N + pN(N-1)] = p[pN^2 + (1-p)N] \\ &= (pN)^2 + pqN = \langle n_1 \rangle^2 + pqN \end{aligned} \quad (4.22)$$

jadi,

$$var(n_1) = \langle n_1^2 \rangle - \langle n_1 \rangle^2 = pqN \quad (4.23)$$

Standar deviasi yang diperoleh adalah

$$\sigma_{n_1} = \sqrt{pqN} \quad (4.24)$$

Standar deviasi relatif menjadi,

$$\frac{\sigma_{n_1}}{\langle n_1 \rangle} = \frac{\sqrt{pqN}}{pN} = \frac{\sqrt{q/p}}{\sqrt{N}} \quad (4.25)$$

$$\propto \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (4.26)$$

Untuk mendapatkan variansi untuk m , kita menggunakan hasil untuk variansi n_1 ,

$$\begin{aligned} \text{var}(m) &= \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \\ &= \langle (2n_1 - N)^2 \rangle - [(p - q)N]^2 \\ &= \langle 4n_1^2 - 4n_1N + N^2 \rangle - [(2p - 1)N]^2 \\ &= 4\langle n_1^2 \rangle - 4N\langle n_1 \rangle + \langle N^2 \rangle - [(2p - 1)N]^2 \\ &= 4(pN)^2 + 4pqN - 4pN^2 + N^2 - [4(pN)^2 - 4pN^2 + N^2] \\ &= 4pqN \end{aligned} \quad (4.27)$$

deviasi standar, $\sigma(m)$.

$$\sigma(m) = 2\sqrt{pqN} \quad (4.28)$$

Sekarang kita ingin mempelajari distribusi probabilitas untuk $W_N(n_1)$ untuk nilai N yang besar. Untuk $N \gg 1$, fungsi $W_N(n_1)$ mempunyai nilai yang variasi besar di sekitar titik maksimumnya pada $n_1 = pN$, maka kita tidak melakukan pendekatan secara langsung menggunakan $W_N(n_1)$. Melainkan kita menggunakan logaritma dari $W_N(n_1)$ yang variasinya kecil.

Menggunakan pendekatan Taylor di sekitar $a = \langle n_1 \rangle = pN$,

$$\ln[W_N(n_1)] \approx \ln[W_N(a)] + (n_1 - a) \left. \frac{d \ln[W_N(n_1)]}{dn_1} \right|_{n_1=a} + \frac{1}{2}(n_1 - a)^2 \left. \frac{d^2 \ln[W_N(n_1)]}{dn_1^2} \right|_{n_1=a} \quad (4.29)$$

Karena posisi $n_1 = a$ mempunyai nilai $\ln[W_N(n_1)]$ maksimum, maka $\left. \frac{d \ln[W_N(n_1)]}{dn_1} \right|_{n_1=a} = 0$.

Untuk mempermudah penurunan rumus, kita akan menggunakan,

$$A = W_N(n_1 = a) \quad \text{dan} \quad B = - \left. \frac{d^2 \ln[W_N(n_1)]}{dn_1^2} \right|_{n_1=a} \quad (4.30)$$

Pendekatan untuk $\ln[W_N(n_1)]$ menjadi,

$$\ln(W_N(n_1)) \approx \ln A - \frac{1}{2}B(n_1 - a)^2 \quad (4.31)$$

atau

$$W_N(n_1) \approx Ae^{-\frac{1}{2}B(n_1-a)^2} \quad (4.32)$$

Menggunakan Rumus Stirling untuk factorial,

$$\ln(x!) \approx x \ln x - x \quad (4.33)$$

$$\frac{d \ln(x!)}{dx} = \ln x \quad \text{untuk } x > 1 \quad (4.34)$$

$$\ln(W_N(n_1)) = \ln(N!) - \ln(n_1!) - \ln(N - n_1)! + n_1 \ln p + (N - n_1) \ln q \quad (4.35)$$

$$\ln(W_N(n_1)) = N \ln(N) - n_1 \ln(n_1) - (N - n_1) \ln(N - n_1) + n_1 \ln p + (N - n_1) \ln q \quad (4.36)$$

Turunan pertama untuk persamaan di atas terhadap n_1 ,

$$\frac{d \ln(W_N(n_1))}{dn_1} = -\ln(n_1) + \ln(N - n_1) + \ln p - \ln q \quad (4.37)$$

Untuk titik maksimum dari distribusi $\ln[W_N(n_1)]$ terletak pada posisi

$$\left. \frac{d^2 \ln[W_N(n_1)]}{dn_1^2} \right|_{n_1=a} = -\ln(a) + \ln(N - a) + \ln p - \ln q = 0 \quad (4.38)$$

$$\frac{N - a}{a} = \frac{q}{p} \quad (4.39)$$

$$a = pN = \langle n_1 \rangle \quad (4.40)$$

Hasil ini sesuai dengan hasil sebelumnya.

Turunan kedua adalah

$$\frac{d^2 \ln[W_N(n_1)]}{dn_1^2} = -\frac{1}{n_1} - \frac{1}{N - n_1} \quad (4.41)$$

sehingga, koefisien B menjadi

$$\begin{aligned}
B &= - \left. \frac{d^2 \ln[W_N(n_1)]}{dn_1^2} \right|_{n_1=a} = \frac{1}{a} + \frac{N-a}{a^2} \\
&= \frac{1}{pN} + \frac{1}{N-pN} = \frac{1}{pN} + \frac{1}{qN} \\
&= \frac{q+p}{pqN} = \frac{1}{pqN} \\
&= \frac{1}{\sigma^2} \tag{4.42}
\end{aligned}$$

Koefisien A dengan melakukan proses normalisasi diperoleh,

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \tag{4.43}$$

Jadi dihasilkan sebuah distribusi Gauss,

$$W(n_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(n_1 - \langle n_1 \rangle)^2}{2\sigma^2} \right] \tag{4.44}$$

5

Energi

Seperti yang dijelaskan pada Bab 1, dua konsep yang penting dalam fisika statistik adalah konsep probabilitas yang sudah dijelaskan pada Bab 2 dan konsep dinamika atau mekanika yang berhubungan dengan konsep energi. Pada bab-bab berikutnya konsep energi akan menjadi dasar untuk menentukan probabilitas sistem pada suatu keadaan tertentu dan kemudian dari probabilitas tersebut sifat-sifat termodinamika dapat diperoleh. Dengan kata lain, kita dapat menentukan sifat makroskopik atau termodinamika dengan mengetahui energi yang terkandung dalam sistem,

Bab ini akan membahas secara garis besar mengenai rumus-rumus energi yang penting dalam formulasi fisika statistik. Suatu sistem makroskopik terdiri dari elemen-elemen kecil seperti elektron, atom, dan molekul. Setiap elemen memiliki energi yang tergantung dari sifat-sifat fisis elemen, sebagai contohnya adalah massa, muatan, momen dipol listrik, momen dipol magnet, dan spin. Energi untuk benda-benda mikroskopik dibagi menjadi (a) energi yang terkandung pada setiap benda, (b) interaksi dengan lingkungan atau potensial eksternal dan (c) interaksi antar benda. Buku ini tidak membahas sistem dengan interaksi antar benda atau kita hanya membahas tentang sistem noninteracting (atau tidak saling berinteraksi).

Perhatikan bahwa energi dalam bentuk mekanika klasik selalu bernilai kontinyu. Sedangkan, energi dalam teori kuantum biasanya bernilai diskrit. Di sini kita akan membahas mengenai energi berbentuk klasik terlebih dahulu sebelum kita meninjau energi dalam kuantum.

5.1 Monoatom atau Satu Partikel

Sebuah partikel atau atom dapat dimodelkan, karena ukurannya yang kecil, sebagai sebuah titik pada ruang dan tidak memiliki ukuran. Jadi

partikel atau atom ini hanya memiliki dua jenis energi yaitu energi gerak (kinetik) dan energi potensial. Untuk sebuah partikel bergerak mempunyai energi kinetik E_K (nonrelativistik),

$$E_K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2}m[v_x^2 + v_y^2 + v_z^2] \quad (5.1)$$

Kita perhatikan energinya kontinu (sistem klasik) yang ditunjukkan dari nilai v_x yang bisa bernilai berapa saja. Walaupun rumus ini untuk sistem klasik, rumus ini akan berguna untuk beberapa sistem yang kita akan pelajari.

Energi potensial berhubungan dengan konsep gaya, contohnya gaya gravitasi, gaya listrik dan magnet, dan gaya elastisitas.

Dari hukum Newton kedua menyatakan:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = m\frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (5.2)$$

Gaya yang menyebabkan perubahan gerak benda biasanya tergantung pada posisi dan kecepatan. Jika gaya hanya tergantung pada posisi \mathbf{r} maka gaya tersebut adalah gaya konservatif dan dapat dihubungkan dengan sebuah gradien dari energi potensial $\phi(\mathbf{r})$.

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi \equiv -\left[\mathbf{i}\frac{\partial\phi}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial\phi}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial\phi}{\partial z}\right] \quad (5.3)$$

Untuk gaya konservatif, perubahan energi persatuan waktu atau daya adalah

$$\begin{aligned} \frac{dE_K}{dt} &= \frac{d}{dt}[\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}] \\ &= \mathbf{v} \cdot \mathbf{F} \\ &= -\mathbf{v} \cdot \nabla\phi \\ &= -\frac{d\phi}{dt} \end{aligned} \quad (5.4)$$

atau

$$\frac{d(E_K + \phi)}{dt} = 0 \quad (5.5)$$

Ini berarti jumlah energi kinetik dan potensial adalah konstan atau dengan kata lain konservasi atau kekekalan energi mekanik.

$$E = \sum_i^N \epsilon_i \quad (5.6)$$

di mana

$$\epsilon_i = \frac{1}{2}mv_i^2 + \phi(\mathbf{r}_i) + E_{\text{elektronik}} \quad (5.7)$$

Energi elektronik $E_{\text{elektronik}}$ biasanya dianggap konstan, sehingga bisa diabaikan.

Jika partikel atom atau molekul berada di sebuah medan listrik \mathbf{E} dan magnet \mathbf{B} , Energi untuk momen dipol listrik adalah

$$E = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \quad (5.8)$$

Momen dipol magnet adalah

$$E = -\mu_m \cdot \mathbf{B} \quad (5.9)$$

[Gambar interaksi antara medan listrik dan momen dipol permanen ataupun induksi. ingat $p_{\text{induksi}} = \alpha E$] [Gambar interaksi momen dipol magnet dengan medan magnet.]

Energi kinetik untuk banyak partikel untuk sistem dalam sebuah volume diberikan oleh

$$E = \sum_1^N \frac{1}{2}m_i v_i^2 \quad (5.10)$$

5.2 Diatomik

Untuk energi molekul yang berotasi,

$$E_{\text{rot}} = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) \quad (5.11)$$

Untuk partikel pada potensial harmonik atau model pegas atau vibrasi

$$E_{\text{vib}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu \quad (5.12)$$

Energi total untuk satu molekul diatomik adalah

$$\epsilon_i = E_{\text{trans}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{pot}} \quad (5.13)$$

5.3 Energi dalam Kuantum

Untuk sistem mikroskopik, energi tidak kontinu melainkan terkuantisasi atau diskrit. Untuk contoh yang sederhana adalah partikel dalam sumur potensial yang berbentuk kotak. Bayangkan partikel berada pada sebuah kotak tertutup tanpa potensial di dalamnya. Potensial bernilai ∞ batas kotak sehingga partikel terkekang dalam kotak tersebut. Umpama partikel berada pada sebuah kotak dengan panjang L_x , L_y dan L_z . Energi partikel dalam kotak yang diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger yaitu

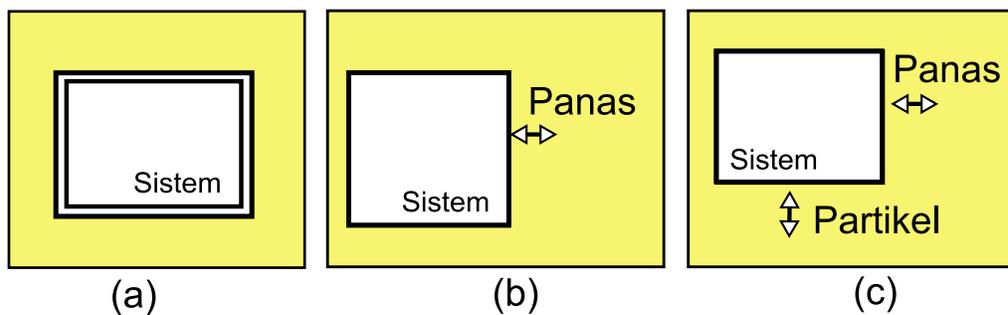
$$E_{trans} = \frac{h^2}{8m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right] \quad (5.14)$$

6

Jenis Sistem Equilibrium

Sebelum kita membahas sifat-sifat mikro maupun makro suatu sistem, kita akan membahas secara singkat tentang jenis-jenis sistem dalam keadaan ekulibrium. Secara umum ada tiga situasi yang kita akan pelajari yaitu: sistem tertutup dan terisolasi diberi nama sistem *kanonik kecil (microcanonical)*, sistem tertutup atau *kanonik (canonical)* dan sistem terbuka atau *kanonik besar (grand canonical)*.

Pembagian tiga jenis sistem dengan ilustrasi ditunjukkan pada Gambar 6.1.



Gambar 6.1: Tiga jenis sistem yang dipelajari: (a) sistem tertutup dan terisolasi, (b) sistem tertutup dan (c) sistem terbuka

Dengan mengetahui jenis ini, kita akan menentukan sifat-sifat mikro dan makro. Karena setiap jenis sistem menghasilkan formulasi yang berbeda dan persamaan yang menghubungkan sifat mikro dan makro juga berbeda.

Sistem tertutup dan terisolasi (kanonik kecil) merupakan sistem yang tidak ada kontak dengan sumber panas dan sumber partikel atau terisolasi dari lingkungan. Secara fisis, dinding kontainer memiliki sifat insulating dan impermeable. Pada Gambar 6.1(a) sistem dikelilingi oleh dinding dua rangkap (dinding insulating dan dinding impermeable). Dengan kata lain, sistem tertutup dan terisolasi tidak bisa ber-

tukar energi atau maupun partikel dengan lingkungan atau sumber panas. Pada keadaan ini berarti energi sistem E dan jumlah partikel N akan selalu konstan. Tidak ada fluktuasi energi maupun jumlah partikel.

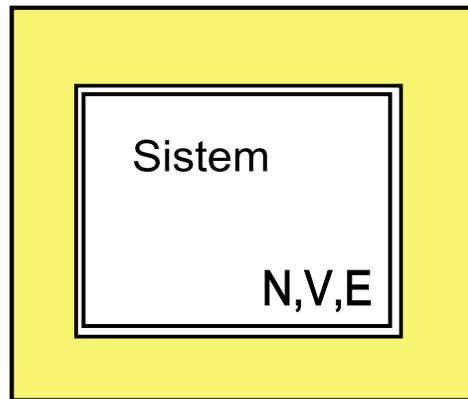
Jika dinding kontainer memiliki sifat impermeable saja, maka sistem hanya dapat bertukar panas/energi saja dan jumlah partikel konstan. Pada situasi ini kita memiliki sistem tertutup (kanonik). Karena sistem memiliki kontak dengan sumber panas (atau lingkungan) maka energi sistem akan mengalami fluktuasi. Tetapi pada keadaan ekuilibrium temperatur sistem dan lingkungan akan sama. Jadi sistem memiliki N dan T konstan.

Sistem terbuka adalah sistem yang bisa bertukar partikel dan energi atau panas dengan lingkungan (sumber panas dan partikel). Jika ada pertukaran partikel dan panas, maka terjadi fluktuasi energi dan jumlah partikel. Tetapi secara rata-rata, temperatur dan jumlah rata-rata partikel akan tetap konstan.

7

Sistem Kanonik Kecil

Pada bab ini kita akan membahas tentang sistem yang tertutup dan terisolasi atau kanonik kecil (*microcanonical*). Ini berarti tidak ada pertukaran energi (atau panas) ataupun partikel antara lingkungan dan sistem. Sistem ini dikarakterisasi secara makroskopik dengan nilai N (jumlah partikel), V (volume sistem) dan E (energi sistem) yang konstan. Dengan kata lain secara termodinamika sistem ini dalam keadaan ekuilibrium dan tidak ada perubahan energi E terhadap waktu.



Gambar 7.1: Sistem tertutup dan terisolasi

Umpama sistem yang kita pelajari ini terdiri dari N partikel dan tidak saling berinteraksi (*non-interacting particle*) maka energi totalnya adalah

$$E = \sum_i n_i \epsilon_i \quad (7.1)$$

di mana n_i merupakan jumlah partikel yang memiliki energi ϵ_i . Jumlah partikel seluruhnya harus sama dengan $N = \sum_i n_i$.

Energi setiap partikel bernilai diskrit (secara kuantum), tetapi karena tingkatan energi setiap partikel cukup rapat, energi totalnya bisa dianggap kontinyu. Secara makroskopik, kita tidak melihat energi dalam yang diskrit. Begitu pula untuk sistem dengan sistem yang saling berinteraksi, walaupun total energi bukan merupakan Persamaan (7.1), energi total dapat dikatakan kontinyu.

Secara mikroskopik, karena kita memiliki banyak sekali jumlah partikel, ada banyak sekali cara sistem untuk membentuk keadaan dengan energi total yang sama E atau nilai energi yang tidak bisa dibedakan secara makroskopik. Atau dengan kata lain banyak cara mendistribusikan energi total ke semua partikel. Setiap cara distribusi atau keadaan yang membentuk energi E disebut dengan *keadaan mikro* atau status mikro atau konfigurasi (*microstate*). Sistem dengan partikel yang saling berinteraksi, juga terdapat banyak cara untuk mendapatkan energi yang sama. Setelah mengetahui semua keadaan mikro, pertanyaan yang ingin kita jawab adalah berapa probabilitas setiap keadaan mikro?

Jumlah keadaan mikro, $\Omega(N, V, E)$, merupakan fungsi N , V dan E . Nantinya dari jumlah inilah kita akan gunakan untuk menghubungkan dengan sifat termodinamika.

Jika kita tahu semua konfigurasi atau keadaan mikro suatu sistem, maka secara statistik kita dapat mempelajari sistem tersebut. Kemungkinan besar, kita hanya bisa mengetahui keadaan mikro sistem dan kita tidak mengetahui keadaan mikro yang mana yang lebih dominan. Seperti yang sudah dijelaskan pada bab II, bahwa *jika kita tidak memiliki informasi tentang probabilitas kejadian maka kita anggap setiap kejadian memiliki probabilitas yang sama*. Jadi asumsi dasar yang digunakan untuk sistem terisolasi adalah **"Semua keadaan mikro (microstate) atau konfigurasi yang bisa diakses diasumsikan mempunyai probabilitas yang sama."** Sekarang dengan asumsi ini, umpama jumlah keadaan mikro / konfigurasi yang bisa diakses adalah Ω , maka probabilitas menemukan sistem pada keadaan mikro tertentu (microstate) adalah

$$P_s = \begin{cases} 1/\Omega & \text{jika } s \text{ bisa diakses} \\ 0 & \text{jika } s \text{ tidak bisa diakses} \end{cases} \quad (7.2)$$

di mana s adalah indeks untuk keadaan mikro. Normalisasi probabilitas tentunya menghasilkan $\sum_s P_s = 1$. Keadaan yang bisa diakses sistem tentunya adalah keadaan yang memiliki energi E .

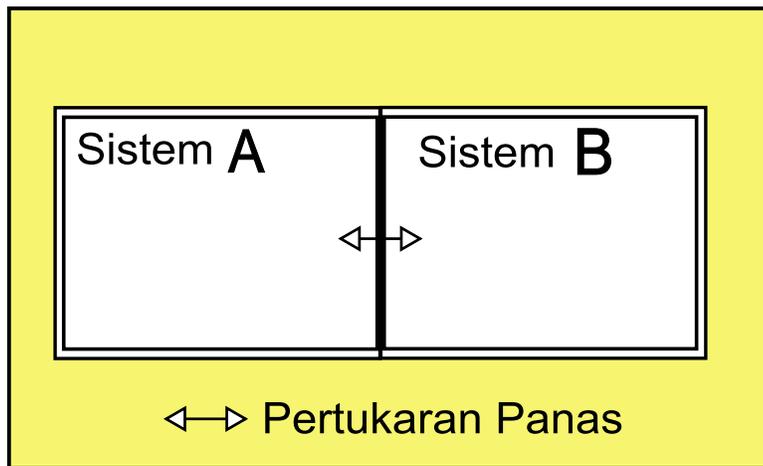
Setelah mengetahui probabilitas, pertanyaan yang harus dijawab

adalah bagaimana menghubungkan keadaan mikro dengan sifat-sifat termodinamika.

Penurunan hubungan entropi dengan Ω berikut ini mengikuti Phatria.

Umpama ada dua sistem yang ekuilibrium dengan energi E_A dan E_B (sistem A dan sistem B). Jumlah keadaan mikro/konfigurasi sistem A dan B adalah $\Omega_A(N_A, V_A, E_A)$ dan $\Omega_B(N_B, V_B, E_B)$. Dua sistem ini kemudian didekatkan dan saling berkontak sehingga terjadi pertukaran panas seperti ditunjukkan pada Gambar 7.2. Energi total dua sistem ini adalah

$$E_{A+B} = E_A + E_B \quad (7.3)$$



Gambar 7.2: Dua sistem tertutup dan terisolasi, A dan B yang didekatkan dan terjadi pertukaran panas.

Banyaknya keadaan mikro kedua sistem ini, karena kedua sistem yang independen maka

$$\Omega_{A+B} = \Omega_A(E_A)\Omega_B(E_B) = \Omega_A(E_A)\Omega(E_{A+B} - E_A) \quad (7.4)$$

Terlihat bahwa Ω_{A+B} tergantung pada E_A . Sekarang pertanyaannya berapa nilai E_A sehingga kedua sistem dalam keadaan ekuilibrium?

Ini terjadi jika nilai E_A memaksimalkan jumlah keadaan mikro Ω_{A+B} . Seperti halnya entropi yang selalu menuju ke entropi yang lebih tinggi dan mencapai nilai maksimum.

Pada keadaan ekuilibrium, energi sistem E_A diperoleh dengan kondisi turunanya sama dengan nol yaitu

$$\frac{\partial \Omega_A}{\partial E_A} \Omega_B + \Omega_A \frac{\partial \Omega_B}{\partial E_A} \frac{\partial E_B}{\partial E_A} = 0 \quad (7.5)$$

Karena $E_B = E_{A+B} - E_A$ maka $\frac{\partial E_B}{\partial E_A} = -1$,

$$\frac{\partial \Omega_A}{\partial E_A} \Omega_B = \Omega_A \frac{\partial \Omega_B}{\partial E_A} \quad (7.6)$$

atau

$$\frac{1}{\Omega_A} \frac{\partial \Omega_A}{\partial E_A} = \frac{1}{\Omega_B} \frac{\partial \Omega_B}{\partial E_A} \quad (7.7)$$

atau

$$\frac{\partial \ln \Omega_A}{\partial E_A} = \frac{\partial \ln \Omega_B}{\partial E_A} \quad (7.8)$$

Karena kedua sisi persamaan ini merupakan fungsi dari variabel yang berbeda, maka supaya keduanya memiliki nilai yang sama, maka keduanya harus bernilai konstan. Kita memberi simbol konstantanya adalah β , Jadi

$$\frac{1}{\Omega_A} \frac{\partial \Omega_A}{\partial E_A} = \beta \quad (7.9)$$

Secara umum ini berlaku juga untuk semua sistem, kita akan menghilangkan subscript A .

Nilai β ini tergantung pada suhu T . Untuk mendapatkan hubungannya kita lihat persamaan termodinamika,

$$\left[\frac{\partial S}{\partial E} \right]_{N,V} = \frac{1}{T} \quad (7.10)$$

S adalah entropi sistem.

$$\frac{\Delta S}{\Delta \ln \Omega} = \frac{1}{\beta T} = \text{Konstan} \quad (7.11)$$

Sekarang dengan mengetahui probabilitas ini, bagaimana menghubungkan dengan sifat-sifat makronya? jawabannya terletak pada definisi entropy yang menyatakan bahwa

$$S = k \ln \Omega \quad (7.12)$$

di mana k adalah konstanta universal, Boltzmann. Jadi nilai $\beta = \frac{1}{kT}$. Konstanta ini akan sering digunakan untuk mendapatkan sifat termodinamika suatu sistem.

Persamaan di atas berhubungan dengan definisi entropi. Substitusi probabilitas (Persamaan (7.2) pada definisi ketidakpastian, menghasilkan

$$H = - \sum_{i=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega} \ln \left(\frac{1}{\Omega} \right) = k \Omega \times \frac{1}{\Omega} \ln \Omega$$

$$= \ln \Omega \quad (7.13)$$

$$= S/k \quad (7.14)$$

atau

$$S = kH \quad (7.15)$$

Dengan hubungan ini, kita bisa menggunakannya untuk menentukan sifat-sifat makro lainnya. Untuk menurunkan sifat-sifat lainnya, kita memulai dengan menulis diferensial untuk entropi yaitu,

$$dS = k \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} dE + k \frac{\partial \ln \Omega}{\partial V} dV + k \frac{\partial \ln \Omega}{\partial N} dN \quad (7.16)$$

Dengan membandingkan definisi diferensial untuk termodinamika yaitu

$$dS = \frac{dE}{T} + \frac{pdV}{T} - \frac{\mu dN}{T} \quad (7.17)$$

, kita mendapatkan hubungan sebagai berikut.

$$T = \left(k \frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N}^{-1} = \left(k \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} \right)_{V,N}^{-1} \quad (7.18)$$

$$P = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{E,N} = kT \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial V} \right)_{E,N} \quad (7.19)$$

$$\mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -kT \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial N} \right)_{E,V} \quad (7.20)$$

Untuk turunan parsial untuk S terhadap N, kita dapat menggunakan definisi $\frac{\partial S}{\partial N} = S(N+1) - S(N)$.

Sebuah contoh, untuk gas Maxwell-Boltzmaan, jumlah keadaan mikro yang bisa diakses adalah

$$\Omega(E, V, N) = CE^{3N/2}V^N \quad (7.21)$$

Logaritma persamaan ini menghasilkan,

$$\ln \Omega(E, V, N) = (3N/2) \ln E + N \ln V + \ln(C\Delta V) \quad (7.22)$$

Dengan menggunakan Persamaan (7.18) dan (7.19), kita kemudian mendapatkan temperatur sistem

$$T = \frac{2E}{3Nk} \quad (7.23)$$

atau

$$U = \langle E \rangle = \frac{3N}{2}kT \quad (7.24)$$

dan tekanan

$$P = kT \frac{N}{V} \quad (7.25)$$

atau

$$PV = NkT \quad (7.26)$$

Rumus-rumus ini yang kita telah pelajari di termondinamika.

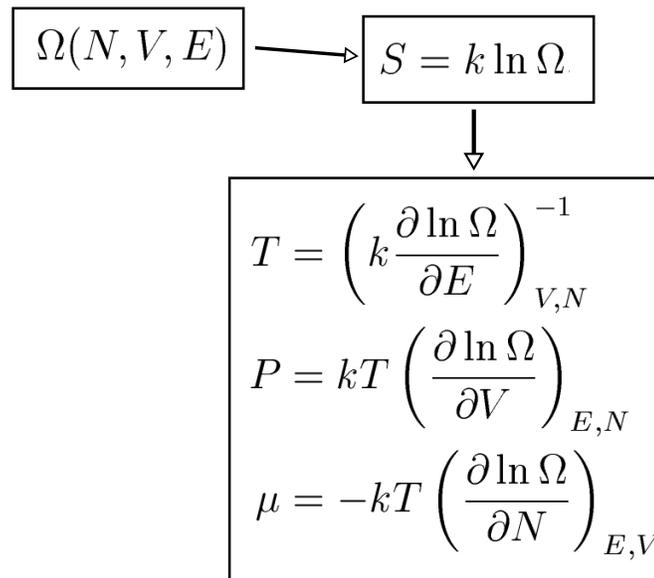
Ringkasan

Bab ini telah menjelaskan prosedur untuk mendapatkan sifat-sifat termodinamika dari keadaan mikroskopik untuk sistem kanonik kecil (tertutup dan terisolasi).

- Jumlah keadaan mikro yang dapat diakses adalah $\Omega(N, V, E)$
- Nilai $\Omega(N, V, E)$ berhubungan dengan sifat termodinamika melalui entropi di mana $S = k \ln \Omega$.
- Dengan mengetahui entropi, kita memperoleh sifat-sifat termodinamika yang lain menggunakan

$$\begin{aligned} T &= \left(k \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} \right)_{V, N}^{-1} \\ P &= kT \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial V} \right)_{E, N} \\ \mu &= -kT \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial N} \right)_{E, V} \end{aligned} \quad (7.27)$$

Hubungan jumlah keadaan mikro dengan sifat-sifat termodinamika ditunjukkan pada Gambar 7.



Gambar 7.3: Hubungan jumlah keadaan mikro/konfigurasi dengan sifat-sifat termodinamika.

8

Sistem Kanonik

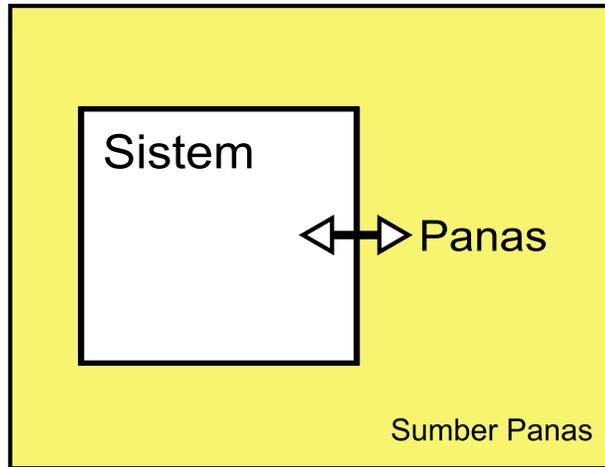
Bab sebelumnya kita telah membahas sistem tertutup dan terisolasi. Kita telah menghubungkan sifat atau keadaan mikro dengan sifat termodinamika melalui definisi entropi. Jika kita perhatikan secara menyeluruh, kita mengerti bahwa dengan menggunakan satu asumsi dasar tentang probabilitas keadaan mikro dan jumlahnya, kita kemudian dapat menurunkan sifat-sifat makroskopik.

Dengan asumsi sederhana dan cara yang hampir sama kita pada bab ini akan mempelajari sistem tertutup atau sistem kanonik yang mempunyai kontak dengan sumber panas atau lingkungan. Sistem tertutup ini memiliki jumlah partikel, volume dan temperatur yang konstan. Karena sistem dalam keadaan ekuilibrium dengan sumber panas, hukum termodinamika ke nol menyatakan temperatur sistem harus sama dengan sumber panas. Walaupun temperatur konstan, energi sistem akan berfluktuasi karena aliran energi keluar dan masuk sistem.

Karena energi tidak konstan, maka secara statistik kita dapat mengatakan bahwa setiap energi tertentu memiliki probabilitas tertentu $P(E)$. Dengan kata lain, probabilitas merupakan fungsi dari energi sistem atau keadaan mikro. Untuk mempermudah penjelasan, kita akan membahas terlebih dahulu sistem yang berenergi diskrit.

Seperti bab sebelumnya, kita menggunakan asumsi bahwa semua keadaan mikro yang mempunyai energi yang sama diasumsikan mempunyai probabilitas yang sama. Asumsi merefleksikan ketidakpedulian atau ketidaktahuan tentang apa yang terjadi pada sistem.

Dengan cara yang hampir mirip dengan cara di bab sebelumnya, fungsi $P(E)$ yang memenuhi keadaan sistem ekuilibrium dengan sumber panas ditentukan dengan memperhatikan dua sistem yang identik tetapi dalam keadaan mikro yang berbeda. Kita perhatikan dua sistem yang identik yang berhubungan atau kontak dengan sumber panas yang sama (lihat Gambar 8.2. Karena dua sistem ini merupakan



Gambar 8.1: Sistem tertutup dan pertukaran panas dengan sumber panas atau lingkungan.

an sistem yang identik maka kedua sistem ini memiliki karakteristik temperatur yang sama.

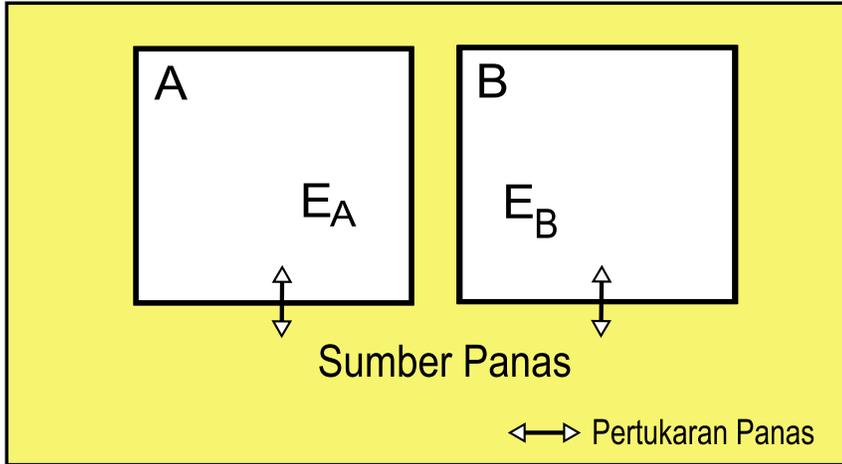
Untuk memperjelas penurunan rumus, kita akan menggunakan notasi yaitu probabilitas untuk sistem A dengan energi E_A adalah $P_A(E_A)$ dan probabilitas untuk sistem B dengan energi E_B adalah $P_B(E_B)$. Jika kita mempertimbangkan sistem gabungan atau komposit kedua sistem $A + B$, maka probabilitas sistem komposit ini adalah $P_{A+B}(E_{A+B})$. Kita menganggap energi interaksi antara partikel di sistem A dengan partikel di sistem B sangat kecil dibandingkan dengan energi sistem E_A dan E_B . Jadi kita bisa menggunakan energi total sistem komposit adalah jumlah energi kedua sistem atau

$$E_{A+B} = E_A + E_B \quad (8.1)$$

Jadi probabilitas sistem komposit merupakan fungsi E_A dan E_B yaitu

$$P_{A+B}(E_{A+B}) = P_{A+B}(E_A + E_B) \quad (8.2)$$

Ini berarti probabilitas sistem komposit adalah probabilitas sistem A dengan energi E_A **dan** sistem B dengan energi E_B . Kata "dan" di kalimat sebelumnya menunjukkan bahwa ini merupakan irisan dari dua kejadian A dan B atau $P(A(E_A)B(E_B))$. Karena kejadian sistem A berenergi E_A dan sistem B berenergi E_B merupakan kejadian yang



Gambar 8.2: Dua sistem tertutup dengan pertukaran panas dengan sumber panas atau lingkungan.

terpisah atau independent atau kedua sistem itu tidak saling mempengaruhi, maka probabilitas kejadian keduanya adalah

$$P(AB) = P(A)P(B) \quad (8.3)$$

atau

$$P_{A+B}(E_A + E_B) = P_A(E_A)P_B(E_B) \quad (8.4)$$

Sebelum kita melanjutkan penurunan fungsi $P(E)$, mari kita lihat terlebih dahulu sebuah fungsi $g(x+y)$ di mana x dan y merupakan dua variabel yang independent. Turunan parsial untuk $g(x+y)$ terhadap $(x+y)$ adalah sebagai berikut:

$$\frac{dg(x+y)}{d(x+y)} = \frac{dg(x+y)}{d(x+y)} \frac{\partial(x+y)}{\partial x} = \frac{\partial g(x+y)}{\partial x} \quad (8.5)$$

Dengan cara yang sama, tetapi untuk variabel y , kita juga memperoleh

$$\frac{dg(x+y)}{d(x+y)} = \frac{dg(x+y)}{d(x+y)} \frac{\partial(x+y)}{\partial y} = \frac{\partial g(x+y)}{\partial y} \quad (8.6)$$

Jadi jika kita turunkan $P_{A+B}(E_A + E_B)$ terhadap $(E_A + E_B)$ dan menggunakan hasil sebelumnya, kita mendapatkan

$$\frac{dP_{A+B}(E_A + E_B)}{d(E_A + E_B)} = \frac{dP_A(E_A)}{dE_A} \cdot P_B(E_B) = P'_A(E_A)P_B(E_B) \quad (8.7)$$

dan juga

$$\frac{dP_{A+B}(E_A + E_B)}{d(E_A + E_B)} = P_A(E_A) \cdot \frac{dP_B(E_B)}{dE_B} = P_A(E_A)P'_B(E_B) \quad (8.8)$$

dari kedua persamaan adalah sama maka

$$\frac{P'_A(E_A)}{P_A(E_A)} = \frac{P'_B(E_B)}{P_B(E_B)} \quad (8.9)$$

Kita perhatikan bahwa sisi kiri persamaan di atas hanya tergantung pada sistem A saja dan sisi sebelah kanan hanya tergantung pada sistem B saja. Karena nilai energi E_A dan E_B bisa bernilai apa saja dan supaya kedua sisi selalu sama, maka kedua sisi tidak boleh tergantung pada energi E_A ataupun E_B . Ini berarti satu satunya cara agar kedua sisi bisa sama adalah dengan menyamakan persamaan dengan sebuah konstanta. Kita akan menyebut konstanta $-\beta$, untuk lebih jelasnya mengapa dipilih nilai negatif akan terungkap pada penjelasan berikutnya.

Jadi,

$$\frac{P'_A(E_A)}{P_A(E_A)} = \frac{P'_B(E_B)}{P_B(E_B)} = -\beta \quad (8.10)$$

atau

$$P'_A(E_A) = -\beta P_A(E_A) \quad (8.11)$$

atau solusi persamaan diferensial ini adalah sebuah fungsi eksponensial yaitu

$$P_A(E_A) = C_A \exp(-\beta E_A) \quad (8.12)$$

Faktor C_A dan β akan ditentukan kemudian. Sebagai catatan faktor C_A tergantung pada komposisi dari sistem A . Tetapi nilai β tidak tergantung pada komposisi sistem.

β merupakan suatu yang "identik" untuk dua sistem. Jadi pertanyaannya? apa yang sama? jika kita perhatikan keduanya mempunyai hal yang sama yaitu sumber panas yang sama. Dengan artian bahwa nilai beta berhubungan dengan sumber panas. Karena sumber

panas dalam keadaan ekuilibrium dengan sistem dan bersuhu T maka β berhubungan dengan suhu T .

Karena sistem A dan B adalah sembarang, kita mengubah notasi tanpa subscript agar untuk lebih umum. Jadi probabilitas sistem menjadi

$$P(E) = C \exp(-\beta E) \quad (8.13)$$

Nilai C disini kita tentukan dengan ketentuan bahwa total probabilitas semua kejadian adalah satu, seperti sudah dijelaskan pada Bab II. Jadi dengan syarat ini, nilai C ditentukan dengan,

$$\sum_k P(E_k) = C \sum_k \exp(-\beta E_k) = 1 \quad (8.14)$$

maka nilai C adalah

$$C = \left[\sum \exp(-\beta E) \right]^{-1} = Z^{-1} \quad (8.15)$$

di mana Z merupakan suatu kuantitas yang dikenal dengan **fungsi partisi** yaitu

$$Z = \sum_k \exp(-\beta E_k) \quad (8.16)$$

Sistem klasik dengan nilai energi sistem yang kontinu, probabilitasnya diperoleh dengan mengganti penjumlahan (\sum) dengan integral \int dan probabilitas $P(E)$ dengan $f(E)dE$. Kerapatan probabilitas untuk energi kontinyu yaitu

$$f(E) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E) \quad (8.17)$$

di mana fungsi partisi diberikan oleh

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_V \exp(-\beta E) d^3 r_1 \cdots d^3 v_N \quad (8.18)$$

Perlu diingat bahwa energi sistem klasik tergantung pada kecepatan dan posisi setiap partikel (v_k dan r_k).

Setelah mengetahui fungsi probabilitas $P(E)$ untuk energi sistem E , bagaimana mendapatkan sifat-sifat makroskopik. Seperti yang dijelaskan sebelumnya bahwa apa yang kita lihat secara makro adalah nilai rata-rata. Jadi untuk mendapatkan sifat fisis, kita menggunakan definisi rata-rata.

Kuantitas yang sering digunakan dalam termodinamika adalah energi dalam yang didefinisikan sebagai energi rata-rata sistem. Energi dalam dihitung dengan,

$$\begin{aligned}
 U = \langle E \rangle &= \sum_k E_k P(E_k) \\
 &= \sum_k E_k \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_k) \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_k E_k \exp(-\beta E_k) \\
 &= -\frac{1}{Z} \sum_k \frac{\partial}{\partial \beta} \exp(-\beta E_k) \\
 &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_k \exp(-\beta E_k) \\
 &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}
 \end{aligned} \tag{8.19}$$

atau

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \tag{8.20}$$

Sekarang kita gunakan rumus energi dalam untuk menentukan nilai parameter β . Untuk ini kita gunakan contoh sederhana yaitu sistem gas monoatomik yang terdiri dari N atom yang tidak saling berinteraksi. Energi sistem ini adalah $E = \sum_i^N E_i = \sum_i^N (1/2)mv_i^2$. Probabilitas sistem ini dengan energi E adalah $f(E) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E)$ dengan fungsi partisi,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_V d^3r_1 \cdots d^3v_N \exp(-\beta [\sum_i E_i]) \tag{8.21}$$

Substitusi energi total, fungsi partisi menjadi

$$Z = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_V d^3r_1 \cdots d^3v_1 \exp(-\beta (1/2)mv_1^2) \right]^N \tag{8.22}$$

Kita perhatikan bahwa fungsi probabilitas tidak tergantung pada posisi dan kita dapat mengintegrasikan semua variabel ruang. Dengan menggunakan sifat eksponensial,

$$\exp(v_1^2 + \dots + v_N^2) = \exp(v_1^2) \cdots \exp(v_N^2) \quad (8.23)$$

Fungsi partisi dapat disederhanakan menjadi,

$$Z = V^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta(1/2)mv^2) \right]^N \quad (8.24)$$

Kemudian dengan menggunakan $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$, kita memperoleh

$$Z = V^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta(1/2)m[v_x^2 + v_y^2 + v_z^2]) \right]^N \quad (8.25)$$

Karena variabel v_x , v_y dan v_z adalah variabel yang independen, maka integral di atas dapat disederhanakan menjadi perkalian integral yaitu

$$Z = V^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} dv_x \exp(-\beta(1/2)mv_x^2) \right]^{3N} \quad (8.26)$$

$$= V^N \left[\sqrt{\frac{2\pi}{\beta m}} \right]^{3N} \quad (8.27)$$

Dari fungsi partisi ini dan dengan persamaan untuk energi dalam, kita mendapatkan

$$\begin{aligned} U &= - \frac{\partial \ln \left[V^N \left(\frac{2\pi}{\beta m} \right)^{3N/2} \right]}{\partial \beta} \\ &= - \frac{\partial [N \ln V + (3N/2) \ln(2\pi/m) - (3N/2) \ln \beta]}{\partial \beta} \\ &= \frac{3N}{2\beta} \end{aligned} \quad (8.28)$$

Jika kita bandingkan energi dalam untuk gas monoatomik dengan volume V adalah $U = \frac{3}{2}NkT$, maka kita mendapatkan

$$U = \frac{3N}{2\beta} = \frac{3}{2}NkT \quad (8.29)$$

Sehingga β berhubungan dengan T melalui,

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (8.30)$$

Jadi seperti yang dikemukakan sebelumnya bahwa parameter β berkaitan dengan temperatur sistem dan sumber panas.

Di atas telah ditentukan persamaan untuk energi dalam dengan fungsi partisi. Sekarang kita akan mencari kuantitas yang bisa diukur secara makro atau termodinamika.

Kita memulai dengan pernyataan bahwa fungsi partisi hanya tergantung pada variabel independen β dan volume V , jadi fungsi partisi merupakan fungsi dari β dan V atau $Z(\beta, V)$.

Dari teorema kalkulus, diferensial dari $\ln(Z)$ adalah

$$d \ln Z = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (8.31)$$

$$= -U d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (8.32)$$

Dan menggunakan $d(U\beta) = U d\beta + \beta dU$ atau $-U d\beta = -d(U\beta) + \beta dU$, kita memperoleh,

$$d \ln Z = -d(U\beta) + \beta dU + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (8.33)$$

$$d(\ln Z + U\beta) = \beta dU + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (8.34)$$

dengan menggunakan $\beta = 1/kT$,

$$kT d(\ln Z + U\beta) = dU + kT \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (8.35)$$

Dari hubungan ini dan hukum pertama termodinamika yang menyatakan

$$TdS = dU + PdV \quad (8.36)$$

dan dengan menyamakan bagian perbagian dari persamaan ini, kita mendapatkan hubungan kuantitas-kuantitas termodinamika yaitu

$$dS = kd(\ln Z + \beta U) \quad (8.37)$$

$$P = kT \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \quad (8.38)$$

Jadi

$$S = k \ln Z + k\beta U + C \quad (8.39)$$

Di mana C adalah sebuah konstanta integrasi. Dari hukum termodinamika ketiga menyatakan bahwa entropi sama dengan nol jika temperature nol, atau dengan kata lain konstanta integrasi juga sama dengan nol, $C = 0$

Definisi energi bebas Helmholtz yaitu

$$F = U - TS \quad (8.40)$$

$$= U - T[k \ln Z + k\beta U] \quad (8.41)$$

$$= U - T[k \ln Z + k(1/kT)U] \quad (8.42)$$

$$= -kT \ln Z \quad (8.43)$$

atau $-\beta F = \ln Z$, atau dengan kata lain

$$Z = \exp(-\beta F) \quad (8.44)$$

Ini menyatakan fungsi partisi berhubungan erat dengan energi bebas Helmholtz. Ini dapat digunakan sebagai definisi alternatif untuk formulasi fisika statistik.

Ketidakpastian atau uncertainty kita lihat bagaimana hubungannya dengan kuantitas fisis.

$$H = - \sum_k P(E_k) \ln P(E_k) \quad (8.45)$$

$$= - \sum_k \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_k) [-\ln Z - \beta E_k] \quad (8.46)$$

$$= \frac{1}{Z} \ln Z \sum_k \exp(-\beta E_k) + \beta \frac{1}{Z} \sum_k E_k \exp(-\beta E_k) \quad (8.47)$$

$$= \ln Z + \beta U \quad (8.48)$$

$$= S/k \quad (8.49)$$

atau

$$S = kH \quad (8.50)$$

Persamaan ini menyatakan bahwa entropi merupakan tidak lain dari ketidakpastian tentang sistem itu atau dalam arti fisisnya adalah ukuran ketidakteraturan sistem.

Jika kita bisa mengingat kembali apa yang kita telah lakukan kita bisa simpulkan, dengan definisi dan asumsi-asumsi sederhana tentang sistem fisis (dengan menggunakan prinsip ketidaktahuan) kita dapat menurunkan persamaan-persamaan yang menghubungkan antara sistem mikroskopik dengan sistem makroskopik, dengan kata lain kita telah menurunkan hubungan antara fisika statistik dan termodinamika.

Ringkasan

Probabilitas suatu sistem dengan energi E adalah

$$P(E) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E) \quad (\text{diskrit})$$

atau

$$f(E) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E) \quad (\text{kontinyu})$$

di mana fungsi partisi diberikan oleh

$$Z = \sum_k \exp(-\beta E_k)$$

atau

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_V \exp(-\beta E) d^3r_1 \cdots d^3v_N$$

Jadi secara ringkas, persamaan yang menghubungkan fungsi partisi dengan sifat makro adalah

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

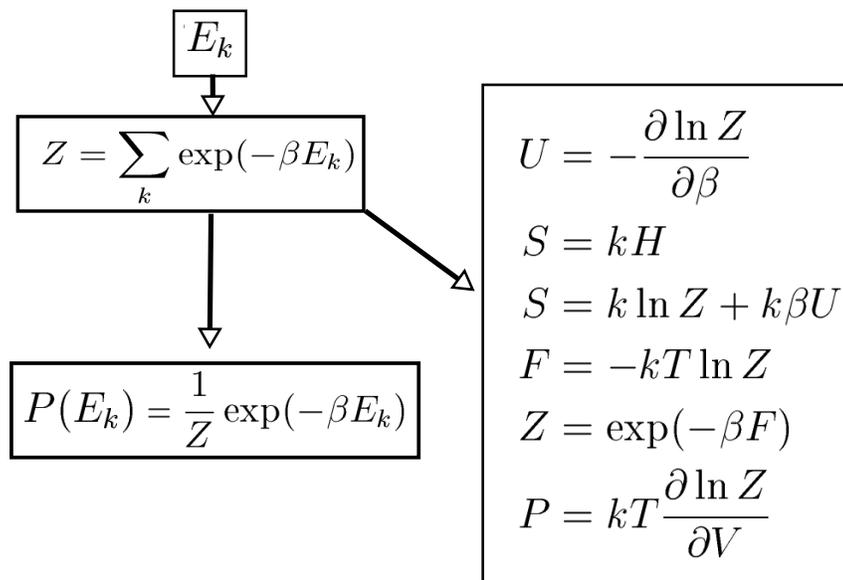
$$S = kH$$

$$S = k \ln Z + k\beta U$$

$$F = -kT \ln Z$$

$$Z = \exp(-\beta F)$$

$$P = kT \frac{\partial \ln Z}{\partial V}$$



Gambar 8.3: Ringkasan .

9

Sistem Kanonik Besar

Bab ini seperti sebelumnya penentuan probabilitas keadaan mikro suatu sistem yang ekuilibrium dengan kontak dengan lingkungan. Di bab ini selain sistem berkontak dengan sumber panas, sistem juga berkontak dengan sumber partikel seperti diilustrasikan pada Gambar 9.1. Ini berarti sistem tidak hanya dapat bertukar panas, tapi juga bertukar partikel. Sistem ini disebut dengan sistem kanonik besar (atau *grand canonical*). Karena terjadi pertukaran panas dan partikel antara sistem dan lingkungan (sumber panas dan partikel) maka akan terjadi fluktuasi panas (atau temperatur) dan jumlah partikel pada sistem. Tetapi sistem dalam keadaan ekuilibrium sehingga total rata-rata panas (atau rata-rata temperatur) dan jumlah rata-rata partikel akan konstan. Dengan kata lain sistem kanonik besar ini dapat dikarakterisasi dengan volume V , temperature T dan jumlah rata-rata partikel $\langle N \rangle$. Sistem $(V, T, \langle N \rangle)$.

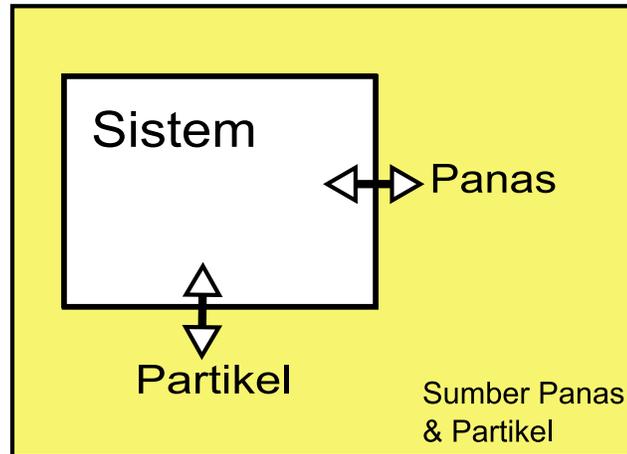
Seperti bab sebelumnya untuk sistem kanonik kecil dan kanonik, kita memulai dengan suatu prinsip dasar yang sederhana dan kemudian probabilitas sistem dalam keadaan mikro tertentu dapat ditentukan. Pengembangan asumsi sebelumnya adalah sebagai berikut: **"Semua keadaan mikro (microstate) yang mempunyai energi dan jumlah partikel yang sama diasumsikan mempunyai probabilitas yang sama."**

Dengan cara yang sama seperti sebelumnya, kita akan menurunkan fungsi probabilitas yang sesuai untuk sistem terbuka.

Kita perhatikan dua sistem yang identik (sistem A dan B) yang berkontak dengan sumber panas dan sumber partikel yang sama. Karena sistem ini identik maka kedua sistem ini memiliki karakteristik temperatur dan jumlah rata-rata partikel yang sama.

[Tambahkan gambar dua sistem A dan B kontak dengan sumber panas dan sumber partikel]

Seperti sebelumnya, untuk memperjelas penurunan rumus, kita



Gambar 9.1: Sistem terbuka yang mana terjadi pertukaran panas dan partikel dengan sumber panas dan partikel atau lingkungan.

akan menggunakan notasi sebagai berikut. Probabilitas sistem A pada energi E_A dan jumlah partikel N_A adalah $P_A(E_A, N_A)$. $P_B(E_B, N_B)$ adalah probabilitas sistem B dengan energi E_B dan jumlah partikel N_B .

Sekarang perhatikan sistem yang terdiri dari gabungan sistem A dan B atau sistem komposit.

Probabilitas keduanya atau sistem komposit ini adalah $P_{A+B}(E_{A+B}, N_{A+B})$. Karena kedua sistem merupakan sistem makroskopik, energi interaksi antara partikel di sistem A dengan partikel di sistem B sangat kecil dibandingkan dengan energi total sistem E_A dan E_B . Jadi kita bisa approximasikan bahwa energi totalnya adalah jumlah energi kedua sistem ini atau diberikan oleh

$$E_{A+B} = E_A + E_B \quad (9.1)$$

dan juga jumlah partikelnya adalah

$$N_{A+B} = N_A + N_B \quad (9.2)$$

Jadi probabilitas sistem $A + B$ diberikan oleh

$$P_{A+B}(E_{A+B}, N_{A+B}) = P_{A+B}(E_A + E_B, N_A + N_B) \quad (9.3)$$

Dengan kata lain, probabilitas sistem $A + B$ adalah probabilitas menemukan sistem A mempunyai energi E_A dan sistem B mempunyai energi E_B . [perlu dijelaskan lagi]

Dengan kata lain, probabilitas sistem $A + B$ adalah perkalian dua probabilitas kejadian masing-masing sistem atau $P_A(E_A, N_A)P_B(E_B, N_B)$. Karena kedua kejadian A dan B merupakan kejadian yang terpisah atau independen, maka probabilitasnya diberikan oleh

$$P(A + B) = P(A)P(B) \quad (9.4)$$

$$P_{A+B}(E_A + E_B, N_A + N_B) = P_A(E_A, N_A)P_B(E_B, N_B) \quad (9.5)$$

Jadi jika kita turunkan $P_{A+B}(E_A + E_B, N_A + N_B)$ terhadap $(E_A + E_B)$ dan $(N_A + N_B)$ dan menggunakan hasil sebelumnya, kita mendapatkan

$$\frac{dP_{A+B}(E_A + E_B, N_A + N_B)}{d(E_A + E_B)} = \frac{\partial P_A(E_A, N_A)}{\partial E_A} \cdot P_B(E_B, N_B) \quad (9.6)$$

dan juga

$$\frac{dP_{A+B}(E_A + E_B, N_A + N_B)}{d(E_A + E_B)} = P_A(E_A, N_A) \cdot \frac{\partial P_B(E_B, N_B)}{\partial E_B} \quad (9.7)$$

untuk turunan jumlah partikel,

$$\frac{dP_{A+B}(E_A + E_B)}{d(N_A + N_B)} = \frac{\partial P_A(E_A, N_A)}{\partial N_A} \cdot P_B(E_B, N_B) \quad (9.8)$$

dan juga

$$\frac{dP_{A+B}(E_A + E_B)}{d(N_A + N_B)} = P_A(E_A, N_A) \cdot \frac{\partial P_B(E_B, N_B)}{\partial N_B} \quad (9.9)$$

dari keempat persamaan di atas kita sederhanakan dan diperoleh

$$\frac{\left[\frac{\partial P_A(E_A, N_A)}{\partial E_A}\right]}{P_A(E_A, N_A)} = \frac{\left[\frac{\partial P_B(E_B, N_B)}{\partial E_B}\right]}{P_B(E_B, N_B)} \quad (9.10)$$

dan

$$\frac{\left[\frac{\partial P_A(E_A, N_A)}{\partial N_A}\right]}{P_A(E_A, N_A)} = \frac{\left[\frac{\partial P_B(E_B, N_B)}{\partial N_B}\right]}{P_B(E_B, N_B)} \quad (9.11)$$

Kita perhatikan bahwa sisi kiri hanya tergantung pada sistem A saja dan sisi sebelah kanan hanya tergantung pada sistem B saja dan nilai energi E_A dan E_B bisa bernilai apa saja. Dengan kata lain dua

sisi tidak boleh tergantung pada energi E_A ataupun E_B dan N_A ataupun N_B , ini berarti satu satunya cara agar kedua sisi bisa sama adalah dengan menyamakan dengan sebuah konstanta. Di sini kita akan menyebut konstanta $-\beta$, untuk lebih jelasnya mengapa dipilih nilai negatif akan terungkap pada penjelasan berikutnya. dan untuk persamaan yang kedua kita menggunakan $C = \beta\mu$.

Jadi

$$\frac{\left[\frac{\partial P_A(E_A, N_A)}{\partial E_A}\right]}{P_A(E_A, N_A)} = \frac{\left[\frac{\partial P_B(E_B, N_B)}{\partial E_B}\right]}{P_B(E_B, N_B)} = -\beta \quad (9.12)$$

dan

$$\frac{\left[\frac{\partial P_A(E_A, N_A)}{\partial N_A}\right]}{P_A(E_A, N_A)} = \frac{\left[\frac{\partial P_B(E_B, N_B)}{\partial N_B}\right]}{P_B(E_B, N_B)} = C = \beta\mu \quad (9.13)$$

Dari kedua persamaan di atas seperti sebelumnya, kita memperoleh

$$P_A(E_A, N) = C_A \exp(-\beta E_A) \exp(\beta\mu N_A) \quad (9.14)$$

Faktor C_A dan β dan μ akan ditentukan kemudian. Sebagai catatan faktor C_A tergantung pada komposisi dari sistem A . Tetapi nilai β tidak tergantung pada komposisi sistem.

β merupakan suatu yang sama "common" untuk dua sistem. Jadi pertanyaannya? apa yang sama? jika kita perhatikan keduanya mempunyai hal yang sama yaitu sumber termal/panas yang sama. Dengan artian bahwa nilai beta berhubungan dengan sumber panas. Karena sumber panas dalam keadaan equilibrium dengan sistem dan bertemperatur T maka β ada hubungannya dengan temperature T .

Karena sistem A dan B adalah sembarang, kita mengubah notasi tanpa subscript agar untuk lebih umum. Jadi probabilitas sistem adalah

$$f(E) = C \exp(-\beta(E - \mu N)) \quad (9.15)$$

untuk sistem dengan energi kontinyu dan

$$P(E) = C' \exp(-\beta(E - \mu N)) \quad (9.16)$$

untuk sistem dengan energi diskrit. Sekarang kita akan menentukan nilai C dan C' .

Nilai C disini kita tentukan dengan ketentuan bahwa total probabilitas semua kejadian adalah satu, seperti sudah dijelaskan pada Bab II.

Jadi dengan ketentuan itu kita tentukan dengan,

$$\begin{aligned} & \sum_{N=1}^{\infty} \int_V \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(E) d^3 r_1 \dots dv_N \\ & = C \sum_{N=1}^{\infty} \int_V \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta(E - \mu N)) d^3 r_1 \dots dv_N = 1 \end{aligned} \quad (9.17)$$

dan

$$\sum_{N=1}^{\infty} \sum_k P(E_k) = C' \sum_{n=1}^{\infty} \sum \exp(-\beta(E_k - \mu N)) = 1 \quad (9.18)$$

Untuk mempermudah kita mendefinisikan suatu kuantitas yang dikenal dengan fungsi partisi besar (grand partition fungsi) yaitu

$$Q = \sum_{N=1}^{\infty} \int_V \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta(E - \mu N)) d^3 r_1 \cdots dv_N \quad (9.19)$$

dan

$$Q' = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_k \exp(-\beta(E_k - \mu N)) \quad (9.20)$$

Jadi C dan C' adalah

$$\begin{aligned} C &= Q^{-1} \\ C' &= Q'^{-1} \end{aligned} \quad (9.21)$$

Kita perhatikan bahwa fungsi partisi besar merupakan jumlah dari perkalian fungsi partisi untuk nilai N tetap dengan $\exp(\beta\mu N)$.

$$Q = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_k \exp(-\beta(E_k - \mu N)) = \sum_{N=0}^{\infty} Z_N \exp(\beta\mu N) \quad (9.22)$$

Hubungan fungsi partisi besar dengan sifat-sifat termodinamika.

Nilai rata-rata jumlah partikel di dalam sistem adalah

$$\langle N \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_k N \exp(-\beta(E_k - \mu N)) \quad (9.23)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_k \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \exp(-\beta(E_k - \mu N)) \quad (9.24)$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{\partial Q}{\partial \mu} \quad (9.25)$$

Selanjutnya kita akan menentukan sifat termodinamika yang lain. Kita ketahui bahwa fungsi partisi hanya tergantung pada variabel independen β , volume V dan $\langle N \rangle$. Jadi fungsi partisi besar merupakan fungsi dari β , V dan $\langle N \rangle$ atau $Q(\beta, V, \langle N \rangle)$.

Seperti sebelumnya pada sistem kanonik, dari teorema kalkulus, diferensial dari $\ln(Q)$ adalah

$$d \ln Q = \frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln Q}{\partial V} dV + \frac{\partial \ln Q}{\partial \mu} d\mu \quad (9.26)$$

$$= [\mu \langle N \rangle - \langle E \rangle] d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV + \beta \langle N \rangle d\mu \quad (9.27)$$

di bagian pertama di sisi kanan, kita menggunakan

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_k \frac{\partial}{\partial \beta} \exp(-\beta(E_k - \mu N)) \quad (9.28)$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_k [\mu N - E_k] \exp(-\beta(E_k - \mu N)) \quad (9.29)$$

$$= \mu \langle N \rangle - \langle E \rangle \quad (9.30)$$

Dan menggunakan

$$d[\beta(\mu \langle N \rangle - \langle E \rangle)] = \beta \langle N \rangle d\mu + (\mu \langle N \rangle - \langle E \rangle) d\beta \quad (9.31)$$

kita memperoleh,

$$\begin{aligned} d \ln Q &= d[\beta(\mu \langle N \rangle - \langle E \rangle)] + \beta d(-\mu \langle N \rangle + \langle E \rangle) + \frac{\partial \ln Q}{\partial V} dV \\ &+ \beta d(\mu \langle N \rangle) - \beta \mu d\langle N \rangle \end{aligned} \quad (9.32)$$

$$\frac{1}{\beta}d[\ln Q + \beta(\langle E \rangle - \mu\langle N \rangle)] = d\langle E \rangle + \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q}{\partial V} dV - \mu d\langle N \rangle \quad (9.33)$$

Dari hubungan ini dan hukum pertama termodinamika yang menyatakan

$$TdS = dU + PdV - (U + TS + pV)d\langle N \rangle \quad (9.34)$$

dan dengan menyamakan bagian perbagian dari persamaan ini, kita mendapatkan hubungan kuantitas kuantitas termodinamika, yaitu

$$U = \langle E \rangle \quad (9.35)$$

$$S = k(\ln Q + \beta\langle E \rangle - \beta\mu\langle N \rangle) \quad (9.36)$$

$$P = kT \frac{\partial \ln Q}{\partial V} \quad (9.37)$$

$$\langle N \rangle = kT \frac{\partial \ln Q}{\partial \mu} \quad (9.38)$$

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} + \mu kT \frac{\partial \ln Q}{\partial \mu} \quad (9.39)$$

10

Fluktuasi

10.1 Sistem Tertutup

Sistem kanonik, mempunyai sumber panas (heat reservoir) yang selalu menyuplai energi atau sink energi sehingga temperature tetap stabil (dilihat secara makroskopik). Kalo kita lihat secara mikroskopik, energi secara berkesinambungan keluar dan masuk dari sumber atau ke sumber panas. Dengan demikian energi sistem akan mengalami fluktuasi karena perpindahan energi dari/ke sistem ke/dari sumber panas. Terus pertanyaannya adalah mengapa yang kita ukur secara makro, hanyalah energi dalam dan tergantung pada temperature dan tidak berfluktuasi. Ini dikarenakan kuantitas yang diukur pada tingkat makroskopik adalah nilai rata-rata dari sistem tersebut. Dengan kata lain kita mengabaikan flutuasinya hanya mementingkan tingkat keseimbangan.

Sebelumnya dijelaskan bahwa energi dalam U adalah nilai rata-rata energi atau $\langle E \rangle$.

Flutuasi biasanya diukur dengan melihat variance nya. $var(E)$

Untuk menghitung varansinya

$$var(E) = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (10.1)$$

sebelumnya kita sudah mengetahui bahwa:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (10.2)$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_k E_k^2 \exp(-\beta E_k) = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial^2 \beta} \sum_k \exp(-\beta E_k) = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial^2 \beta} \quad (10.3)$$

Jadi

$$\text{var}(E) = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \quad (10.4)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) \right] \quad (10.5)$$

$$= -\frac{\partial U}{\partial \beta} \quad (10.6)$$

dengan menggunakan $\beta = 1/kT$,

$$\text{var}(E) = kT^2 \frac{\partial U}{\partial T} \quad (10.7)$$

Tanpa kerja

Tanpa kerja artinya perubahan U terhadap T pada $W = 0$ atau pada kondisi konstan volum.

Dari definisi kuantitas termodinamika disebutkan bahwa kapasitas panas pada kondisi konstan volum merupakan perubahan energi dalam terhadap temperature atau

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (10.8)$$

Maka bisa kita ambil kesimpulan bahwa $\text{var}(E)$ mempunyai hubungan sebanding berbanding lurus dengan kapasitas panas dari sistem tersebut.

$$\text{var}(E) = kT^2 C_v \quad (10.9)$$

dan deviasinya adalah

$$\sigma(E) = [kT^2 C_v]^{1/2} \quad (10.10)$$

Sebagai contoh, untuk gas ideal, $C_v = (3/2)Nk$,

$$\sigma(E) = [(3/2)N]^{1/2} kT \quad (10.11)$$

Dari hubungan ini, deviasi sebanding dengan suhu sistem, jadi semakin besar suhu sistem fluktuasi semakin besar.

Jika perhatikan fluktuasi per satuan energi rata-rata $\sigma/\langle E \rangle$, maka fluktuasinya adalah

$$\frac{\sigma}{\langle E \rangle} = \frac{[3N/2]^{1/2}kT}{(3/2)NkT} = \frac{1}{[(3/2)N]^{1/2}} \quad (10.12)$$

Jadi fluktuasi berbanding terbalik dengan \sqrt{N} . Dengan kata lain flutuasi semakin kecil jika jumlah partikel/molekul bertambah. Ini berarti bahwa sistem akan sering berada pada energi rata-rata. sebaliknya jika jumlah partikel sedikit/kecil maka fluktuasinya menjadi besar, yang artinya sistem akan sering berada jauh dari nilai rata-rata. Ini juga menunjukkan bahwa sistem bisa dianggap sebagai sistem makroskopik jika fluktuasinya sangat kecil atau jumlah partikel sangat besar. Disamping itu pula jika jumlah partike kecil, maka kita tidak bisa menggunakan energi rata-rata untuk menjadi karakteristik sistem tersebut. Oleh karena itu dalam meninjau kegunaan suatu teori perlu diperhatikan keadaan yang sesuai.

10.2 Sistem Terbuka

Sistem terbuka atau sistem kanonik besar, selain mempunyai sumber panas (heat reservoir), juga memiliki sumber partikel. Jika kita lihat secara mikroskopik, energi dan jumlah partikel secara berkesinambungan keluar dan masuk dari sumber atau ke sumber panas. Dengan demikian energi sistem akan mengalami fluktuasi karena perpindahan energi dari/ke sistem ke/dari sumber panas. Terus pertanyaannya adalah mengapa yang kita ukur secara makro, hanyalah energi dalam dan tergantung pada temperature dan tidak berfluktuasi. Ini dikarenakan kuantitas yang diukur pada tingkat makroskopik adalah nilai rata-rata dari sistem tersebut. Dengan kata lain kita mengabaikan flutuasinya hanya mementingkan tingkat keseimbangan.

Sebelumnya dijelaskan bahwa energi dalam U adalah nilai rata-rata energi atau $\langle E \rangle$.

Flutuasi biasanya diukur dengan melihat variance nya. $var(N)$

Untuk menghitung varansinya

$$var(N) = \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \quad (10.13)$$

sebelumnya kita sudah mengetahui bahwa:

$$\langle N \rangle = -\frac{1}{\beta Q} \frac{\partial Q}{\partial \mu} \quad (10.14)$$

$$\langle N^2 \rangle = \frac{1}{Q} \sum_N \sum_k N^2 \exp(\beta(\mu N - E_k)) = \frac{1}{\beta^2 Q} \frac{\partial^2}{\partial^2 \mu} \sum_N \sum_k \exp(\beta(\mu N - E_k)) = \frac{1}{\beta^2 Q} \frac{\partial^2 Q}{\partial^2 \mu} \quad (10.15)$$

Jadi

$$\text{var}(E) = \frac{1}{\beta Q} \frac{\partial^2 Q}{\partial^2 \mu} - \frac{1}{\beta^2 Q} \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu} \right)^2 \quad (10.16)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\frac{1}{\beta Q} \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu} \right) \right] \quad (10.17)$$

$$= - \frac{\partial U}{\partial \mu} \quad (10.18)$$

dengan menggunakan $\beta = 1/kT$,

$$\text{var}(E) = kT^2 \frac{\partial U}{\partial T} \quad (10.19)$$

Tanpa kerja

Tanpa kerja artinya perubahan U terhadap T pada $W = 0$ atau pada kondisi konstan volum.

Dari definisi kuantitas termodinamika disebutkan bahwa kapasitas panas pada kondisi konstan volum merupakan perubahan energi dalam terhadap temperature atau

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (10.20)$$

Maka bisa kita ambil kesimpulan bahwa $\text{var}(E)$ mempunyai hubungan sebanding berbanding lurus dengan kapasitas panas dari sistem tersebut.

$$\text{var}(E) = kT^2 C_v \quad (10.21)$$

dan deviasinya adalah

$$\sigma(E) = [kT^2 C_v]^{1/2} \quad (10.22)$$

Sebagai contoh, untuk gas ideal, $C_v = (3/2)Nk$,

$$\sigma(E) = [(3/2)N]^{1/2} kT \quad (10.23)$$

Dari hubungan ini, deviasi sebanding dengan suhu sistem, jadi semakin besar suhu sistem fluktuasi semakin besar.

Jika perhatikan fluktuasi per satuan energi rata-rata $\sigma/\langle E \rangle$, maka fluktuasinya adalah

$$\frac{\sigma}{\langle E \rangle} = \frac{[3N/2]^{1/2}kT}{(3/2)NkT} = \frac{1}{[(3/2)N]^{1/2}} \quad (10.24)$$

Jadi fluktuasi berbanding terbalik dengan \sqrt{N} . Dengan kata lain flutuasi semakin kecil jika jumlah partikel/molekul bertambah. Ini berarti bahwa sistem akan sering berada pada energi rata-rata. sebaliknya jika jumlah partikel sedikit/kecil maka fluktuasinya menjadi besar, yang artinya sistem akan sering berada jauh dari nilai rata-rata. Ini juga menunjukkan bahwa sistem bisa dianggap sebagai sistem makroskopik jika fluktuasinya sangat kecil atau jumlah partikel sangat besar. Disamping itu pula jika jumlah partike kecil, maka kita tidak bisa menggunakan energi rata-rata untuk menjadi karakteristik sistem tersebut. Oleh karena itu dalam meninjau kegunaan suatu teori perlu diperhatikan keadaan yang sesuai.

11

Aplikasi

Pada bab ini, kita akan mempelajari penggunaan prinsip/konsep yang sudah kita pelajari beberapa bab sebelumnya untuk mempelajari sifat-sifat sistem fisis.

11.1 Gas pada medan gravitasi

Pertimbangkan/pikirkan atau bayangkan ada gas yang mengalami gaya gravitasi. Seperti gas di atas permukaan bumi. Kita asumsikan bahwa medan gravitasi adalah linier atau potensial gravitasi sebanding dengan ketinggian atom dari gas tersebut.

Energi untuk atom ini adalah

$$E(v, z) = \frac{1}{2}mv^2 + mgz \quad (11.1)$$

Probabilitas untuk partikel ini adalah

$$P(E) = \exp(-\beta E) d^3r d^3v \quad (11.2)$$

Fungsi partisinya adalah

$$\begin{aligned} Z &= \int_V d^3r \int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta E(v, z)) \\ &= \int_A d^a \int_{z=0}^{z=L} \int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta E(v, z)) \\ &= A \int_{z=0}^{z=L} \exp(-\beta mgz) dz \int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta mv^2/2) \\ &= A \left[\frac{1}{\beta mg} (1 - e^{-\beta mgL}) \right] \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta mv_x^2/2) dv_x \right]^3 \\ &= A \left[\frac{1}{\beta mg} (1 - e^{-\beta mgL}) \right] \left[\frac{2\pi}{m\beta} \right]^{3/2} \end{aligned} \quad (11.3)$$

Kerapatan atau densitas jumlah partikel

$$\begin{aligned} n(r)d^3r &= d^3r \int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta E)/Z \\ &= \frac{N\beta mg}{A} (1 - \exp(-\beta mgL))^{-1} \exp(-\beta mgz) d^3r \end{aligned} \quad (11.4)$$

Jika $L \rightarrow \infty$, kita mendapatkan $PV = nRT$

11.2 Distribusi Maxwell

Sistem gas monoatomik.
energi atom

$$\begin{aligned} E(v) &= \text{Energi Kinetik} \\ &= \frac{1}{2}mv^2 \\ &= \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \end{aligned} \quad (11.5)$$

Fungsi partisiya adalah

$$\begin{aligned} Z &= \int_V d^3r \int_{-\infty}^{\infty} d^3v \exp(-\beta(m/2)(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)) \\ &= V \left[\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta(m/2)v_x^2) dv_x \right]^3 \\ &= V \left[\frac{2\pi}{\beta m} \right]^{3/2} \end{aligned} \quad (11.6)$$

$$= V \left[\frac{2\pi kT}{m} \right]^{3/2} \quad (11.7)$$

$$(11.8)$$

Fungsi probabilitas nya,

$$f(v_x, v_y, v_z) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} \exp(-\beta(m/2)(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)) \quad (11.9)$$

Densitah jumlah partikel adalah

$$\eta(v_x, v_y, v_z) = N f(v_x, v_y, v_z) = N \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} \exp(-\beta(m/2)(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)) \quad (11.10)$$

Sekarang bagaimana probabilitas untuk satu arah saja, misalkan v_x saja, dengan mengabaikan variabel v_y dan v_z .

$$\begin{aligned} \eta(v_x) &= \iint_{-\infty}^{\infty} N \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} \exp(-\beta(m/2)(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)) dv_y dv_z \\ &= N \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{1/2} \exp(-\beta(m/2)v_x^2) \end{aligned} \quad (11.11)$$

Normalisasi

$$N \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{1/2} \exp(-\beta(m/2)v_x^2) dv_x = N \quad (11.12)$$

Gambar plot eta terhadap v_x di sini.

Nilai rata rata kecepatan ke arah v_x adalah

$$\begin{aligned} \langle v_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} v_x \eta(v_x) dv_x \\ &= N \int_{-\infty}^{\infty} v_x \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{1/2} \exp(-\beta(m/2)v_x^2) dv_x \end{aligned} \quad (11.13)$$

Jika kita ingin mengetahui distribusi laju partikel tanpa memperhatikan arah, mengubah ke bentuk polar (v, θ, ϕ) .

$$\begin{aligned} \eta(v) &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \eta(v, \theta, \phi) v^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \\ &= N \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \exp(-\beta(m/2)v^2) v^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \\ &= N v^2 \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} \exp(-\beta(m/2)v^2) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \\ &= N 4\pi v^2 \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{3/2} \exp(-\beta(m/2)v^2) \end{aligned} \quad (11.14)$$

Gambar distribusi kecepatan disini $\eta(v)$.

laju maksimum untuk partikel didapatkan dengan teknik mendiferensialkan $\eta(v)$, menggunakan $\alpha = m/2kT$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \eta(v)}{\partial v} &= 0 \\ &= \frac{\partial [v^2 e^{-\alpha v^2}]}{\partial v} \\ &= v^2 \cdot (-2\alpha v) e^{-\alpha v^2} + 2v \cdot e^{-\alpha v^2} = 0\end{aligned}\tag{11.15}$$

Solusi persamaan dia atas, menghasilkan posisi probabilitas maksimum yaitu,

$$v_m = 1/\sqrt{\alpha} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}\tag{11.16}$$

nilai laju rata-rata.

$$\begin{aligned}\langle v \rangle &= \int_0^\infty v \eta(v) dv \\ &= \text{isidisini} \\ &= \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} v_m\end{aligned}\tag{11.17}$$

kuantitas yang sering digunakan adalah jumlah partikel yang menumbuk dinding.

Kita ingin mengetahui seberapa banyak partikel/molekul yang menumbuk sebuah dinding dengan luas A dalam waktu Δt .

Gambar dinding dan volume Ω .

$$\int_{\Omega} \eta(v) d^3 r d^3 v = \left[\frac{\Omega}{V} \right] n(v) d^3 v\tag{11.18}$$

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dv_x \int_{-\infty}^\infty dv_y \int_{-\infty}^\infty dv_z v_x n(v) \frac{A}{V} \Delta t &= \frac{N}{V} \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} A \Delta t \\ n &= \frac{N}{V} A \Delta t \cdot \frac{1}{4} \langle v \rangle \\ &= \frac{1}{4} n \langle v \rangle\end{aligned}\tag{11.19}$$

sekarang kita ingin menentukan tekanan yang ditimbulkan karena tumbukan oleh molekul pada dinding.

Perubahan momentum, merupakan impuls yang dilakukan oleh gaya dalam waktu Δt .

$$\Delta P = F \cdot \Delta t \quad (11.20)$$

Gambar tumbukan

Perubahan momentum karena adanya tumbukan dengan dinding adalah

$$\begin{aligned} \Delta P_x &= \int_0^\infty dv_x \int_{-\infty}^\infty dv_y \int_{-\infty}^\infty dv_z (-2mv_x)v_x n(v)(A/V)\Delta t \\ &= NkT(A/T)\Delta t \end{aligned} \quad (11.21)$$

$$F = \frac{\Delta P}{\Delta t} = NkT(A/V) = P \cdot A \quad (11.22)$$

$$PV = NkT \quad (11.23)$$

Buktikan dengan menggunakan fungsi partisi (ingat definisi tekanan).

tulis disini.

11.3 Prinsip Ekuipartisi

Ekuipartisi dapat diartikan mempunyai pembagian yang sama. prinsip ini hanya berlaku untuk sistem klasik. Jadi tidak dapat digunakan untuk sistem kuantum. harus hati-hati penggunaannya.

Fungsi partisi untuk sistem klasik (ingat bab ??) adalah diberikan oleh

$$Z = \int_V \dots \int_{-\infty}^\infty e^{-\beta E(r_1, r_2, \dots, v_1, \dots, v_N)} d^3r_1 \dots d^3v_N \quad (11.24)$$

Kita umpamakan energi sistem ini dapat dibagi menjadi dua bagian yaitu $E = cs^2 + E'$ di mana s adalah salah satu variabel integrasi yang dapat berupa r_i atau v_j dan c adalah konstanta (positif) dan energi E' adalah energi yang tidak tergantung pada s . sebagai contoh $E = \frac{1}{2}mv_x^2 + E'$ dan $E = \frac{1}{2}kx^2 + E'$.

Fungsi partisi ini dapat diintegrasikan menjadi

$$Z = \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta cs^2} ds \right] \times \left[\int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E'} d^3r_1 \cdots d^3v_N \right]$$

$$Z = \sqrt{\frac{\pi}{\beta c}} \cdot Z' \quad (11.25)$$

atau

$$\ln Z = \frac{1}{2}(\ln \pi - \ln \beta - \ln c) + \ln Z' \quad (11.26)$$

Dari hasil ini kita mendapatkan energi dalam

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{2\beta} - \frac{\partial \ln Z'}{\partial \beta}$$

$$= \frac{1}{2}kT + U' \quad (11.27)$$

Jadi setiap bagian energi yang berbentuk kuadrat variabelnya atau cs^2 menghasilkan tambahan energi dalam sebesar,

$$U_s = \frac{1}{2}kT \quad (11.28)$$

Jadi kita bisa simpulkan "setiap bagian yang berbentuk kuadrat variabel menghasilkan tambahan energi sebesar $\frac{1}{2}kT$ " atau dengan kata lain energi dalam sistem terbagi sama rata dengan setiap bagian bernilai $\frac{1}{2}kT$. Inilah yang disebut ekuipartisi.

Sebagai contoh untuk sistem gas ideal monoatomik, energi untuk satu atom berbentuk,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \quad (11.29)$$

dengan prinsip ekuipartisi, energi dalam yang terkandung/terbagi untuk satu atom adalah $3 \times \frac{1}{2}kT = \frac{3}{2}kT$. Jadi jika di dalam sistem terdapat N atom maka, energi dalam untuk sistem adalah $U = N \times \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2}NkT$.

11.4 Teorema Virial

11.5 Osilator Harmonik

Dalam mekanika klasik, energi osilator harmonik untuk satu dimensi adalah

$$E = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad (11.30)$$

Dengan menggunakan prinsip ekuipartisi, kita memperoleh energi dalamnya adalah $U = 2(\frac{1}{2}kT) = kT$.

Dalam mekanika kuantum Hamiltonian adalah $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ dan persamaan Schrödingernya yaitu

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi \quad (11.31)$$

Solusi persamaan ini menghasilkan tingkatan energi yaitu

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (11.32)$$

Fungsi partisi untuk osilator harmonik menjadi

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0) \\ &= \exp(-\beta\hbar\omega_0/2) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n\hbar\omega_0) \end{aligned} \quad (11.33)$$

Dengan menggunakan penjumlahan deret geometri,

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad (11.34)$$

berlaku untuk $|x| < 1$,

kita kemudian dapat memperoleh fungsi partisi,

$$Z = \exp(-\beta\hbar\omega_0/2) \frac{1}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_0)} \quad (11.35)$$

Energi rata-rata osilator atau energi dalamnya adalah

$$\begin{aligned}
 U = \langle E \rangle &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \\
 &= \frac{\partial \ln[1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}]}{\partial \beta} \\
 &= \frac{\hbar \omega_0 e^{-\beta \hbar \omega_0}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}} \\
 &= \frac{\hbar \omega_0}{e^{\beta \hbar \omega_0} - 1}
 \end{aligned}
 \tag{11.36}$$

Jika $\beta \hbar \omega_0 = [\hbar \omega_0 / kT] \ll 1$, kita dapat melakukan aproksimasi $e^{\beta \hbar \omega_0} \approx 1 + \beta \hbar \omega_0$.

Energi dalam U pada kondisi ini menjadi,

$$\begin{aligned}
 U &\approx \frac{\hbar \omega_0}{[1 + \beta \hbar \omega_0] - 1} \\
 &= \frac{1}{\beta} = kT
 \end{aligned}
 \tag{11.37}$$

Hasil ini sama dengan energi dalam untuk sistem klasik.

Untuk temperature rendah, kita menggunakan aproksimasi $e^{\beta \hbar \omega_0} - 1 \approx e^{-\beta \hbar \omega_0}$, kita mendapatkan

$$U \approx \hbar \omega_0 e^{-\beta \hbar \omega_0} \tag{11.38}$$

Di kasus ini energi yang dominan adalah energi rendah.

Untuk sistem klasik berlaku jika beda tingkatan energi lebih kecil dari kT .

11.6 Kapasitas Panas Untuk Gas

Jika energi dalam sudah diketahui sebagai fungsi temperature (T), kita dapat memperoleh kapasitas panas dari definisinya yaitu

kapasitas panas konstan volume adalah

$$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \tag{11.39}$$

11.6.1 Gas Monoatomik

Untuk gas ideal monoatomik, energi untuk atom gas ini yaitu

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \quad (11.40)$$

Dengan menggunakan prinsip ekuipartisi, terdapat $3N$ bagian karena setiap atom memiliki tiga bagian, Jadi energi dalamnya adalah

$$U = \frac{3N}{2}kT \quad (11.41)$$

Kemudian kapasitas panasnya untuk konstan volume diperoleh,

$$c_V = \frac{3N}{2}k = \frac{3n}{2}R \quad (11.42)$$

di mana n adalah jumlah mol, dan R adalah konstanta gas universal.

Kapasitas panas untuk konstan tekanan P , adalah

$$c_P = c_V + nR = \frac{3n}{2}R + nR = \frac{5n}{2}R \quad (11.43)$$

Ratio c_P dan c_V adalah nilai gamma γ , kita mendapatkan

$$\gamma = \frac{(5/2)nR}{(3/2)nR} = \frac{5}{3} = 1.667 \quad (11.44)$$

Ini sesuai dengan nilai yang dihasilkan pada eksperimen sebagai contohnya, untuk helium $\gamma = 1.66$, untuk Neon $\gamma = 1.64$ dan untuk Argon $\gamma = 1.67$.

11.6.2 Gas diatomik

Ada dua model untuk gas diatomik, model dumbell (rigid) dan model harmonik (fleksibel).

Untuk gas ideal diatomik dengan model dumbell, energi untuk atom gas ini yaitu

$$E = \frac{1}{2}Mv^2 + E_{rot} = \frac{1}{2}M(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2}I(\omega_1^2 + \omega_2^2) \quad (11.45)$$

Dengan menggunakan prinsip ekuipartisi, terdapat $5N$ bagian karena setiap atom memiliki tiga bagian, Jadi energi dalamnya adalah

$$U = \frac{5N}{2}kT \quad (11.46)$$

Kemudian kapasitas panasnya untuk konstan volume diperoleh,

$$c_V = \frac{5N}{2}k = \frac{5n}{2}R \quad (11.47)$$

Kapasitas panas untuk konstan tekanan P , adalah

$$c_P = c_V + nR = \frac{5n}{2}R + nR = \frac{7n}{2}R \quad (11.48)$$

Ratio c_P dan c_V adalah nilai gamma γ , kita mendapatkan

$$\gamma = \frac{(7/2)nR}{(5/2)nR} = \frac{7}{5} = 1.40 \quad (11.49)$$

Untuk gas ideal diatomik dengan model pegas/harmonik, energi untuk atom gas ini yaitu

$$E = \frac{1}{2}Mv^2 + E_{rot} + E_{vib} = \frac{1}{2}M(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2}I(\omega_1^2 + \omega_2^2) + \frac{1}{2}k(r_{12} - r_0)^2 \quad (11.50)$$

Dengan menggunakan prinsip ekuipartisi, terdapat $7N$ bagian karena setiap atom memiliki tiga bagian, Jadi energi dalamnya adalah

$$U = \frac{7N}{2}kT \quad (11.51)$$

Kemudian kapasitas panasnya untuk konstan volume diperoleh,

$$c_V = \frac{7N}{2}k = \frac{7n}{2}R \quad (11.52)$$

Kapasitas panas untuk konstan tekanan P , adalah

$$c_P = c_V + nR = \frac{7n}{2}R + nR = \frac{9n}{2}R \quad (11.53)$$

Ratio c_P dan c_V adalah nilai gamma γ , kita mendapatkan

$$\gamma = \frac{(9/2)nR}{(7/2)nR} = \frac{9}{7} = 1.286 \quad (11.54)$$

Berdasarkan eksperimen untuk beberapa gas diatomik pada suhu 15° dan 1 atm, untuk molekul helium $\gamma = 1.408$, untuk molekul klorida $\gamma = 1.34$ dan untuk molekul oksigen $\gamma = 1.400$. Dari hasil eksperimen ini kita bisa menyimpulkan bahwa model yang tepat adalah model dumbell atau rigid. Ini dapat dimengerti karena nilai kT yang digunakan masih lebih rendah dibandingkan dengan beda tingkat energi untuk vibrasi. Dengan kata lain molekul masih tetap pada tingkatan energi terendah atau ground state. Jadi masih frozen pada tingkatan vibrasi ini.

12

Statistik Sistem Kuantum

Pada bab ini kita akan mempelajari penggunaan prosedur fisika statistik yang dijelaskan pada Bab III untuk sistem kuantum yang mempunyai tingkatan energi diskrit. Seperti dijelaskan sebelumnya, pada sistem kuantum (energi diskrit) prinsip ekuipartisi energi tidak dapat digunakan. Efek kuantum seperti sifat *tak bisa dibedakan* atau *indistinguishable*, degenerasi tingkatan energi (*degenerate*) dan jenis statistika atau simetri dari partikel harus diperhatikan dalam penentuan probabilitas dan fungsi partisi.

Kita akan membatasi pembahasan hanya untuk sistem partikel kuantum yang tidak saling berinteraksi (atau *non-interacting*). Batasan ini tidak mempersempit ilmu yang kita pelajari. Dengan menggunakan sistem partikel yang tidak saling berinteraksi, kita mampu mempelajari banyak sistem fisis. Dari segi aproksimasi, hal pertama yang biasa kita lakukan adalah dengan aproksimasi tidak saling berinteraksi, atau dengan kata lain dengan menggunakan aproksimasi orde ke satu. Setelah aproksimasi ini kita dapat mengkoreksi efek interaksi antar partikel dengan metode perturbasi. [ini mungkin akan dijelsakan diakhir kuliah jika waktu mengijinkan]

Partikel-partikel dalam suatu sistem kuantum dapat dibagi menjadi dua kasus yaitu (a) kasus partikel yang bisa dibedakan (atau *distinguishable*) dan (b) partikel yang tidak bisa dibedakan (atau *indistinguishable*). Partikel yang bisa dibedakan berarti kita mampu secara fisis membedakan antara partikel yang satu dengan partikel yang lain. Mungkin kita bisa membedakan dari segi ukuran, massa, dan muatan, atau komposisi partikel. Atau dengan kata lain kita mampu melakukan sebuah eksperimen untuk dapat membedakan jenis partikel tersebut. dari segi mekanika klasik, walaupun bendanya sama kita mampu membedakan partikel dengan melihat lokasi dan kecepatan partikel tersebut. Dalam mekanika kuantum ini tidaklah mungkin.

Karena sifat partikel yang Untuk

12.1 Distinguishable Partikel

Untuk sistem distinguishable, dengan energi diskrit, fungsi partisinya berbentuk,

$$Z = \sum_{ms} \exp(-\beta E) \quad (12.1)$$

ms adalah semua konfigurasi sistem (microstate) keadaan mikro.

$$E = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \quad (12.2)$$

Fungsi partisinya menjadi

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{ms} \exp(-\beta \sum_{i=1}^N \epsilon_i) \\ &= \sum_{ms} \exp(-\beta[\epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots + \epsilon_N]) \\ &= \sum_{ms} \exp(-\beta\epsilon_1) \cdot \exp(-\beta\epsilon_2) \cdot \dots \cdot \exp(-\beta\epsilon_N) \\ &= \left[\sum_{\epsilon_1} \exp(-\beta\epsilon_1) \right] \cdot \left[\sum_{\epsilon_2} \exp(-\beta\epsilon_2) \right] \cdot \dots \cdot \left[\sum_{\epsilon_N} \exp(-\beta\epsilon_N) \right] \\ &= \prod_{i=1}^N \sum_{\epsilon_i} \exp(-\beta\epsilon_i) \end{aligned} \quad (12.3)$$

12.2 Indistinguishable Partikel

Karena partikel tidak bisa dibedakan, maka kita tidak bisa memberi label pada partikel, tetapi kita bisa memberikan tingkatan energi. kita dapat menentukan jumlah partikel pada tingkatan energi tertentu. simbol yang kita akan gunakan adalah n_s yang artinya jumlah partikel pada tingkatan energi s . dan jumlah partikel adalah N .

sekarang keadaan mikro (microstate) dapat dideskripsikan dengan nilai-nilai n_s . sebagai contoh (n_1, n_2, n_3, \dots) .

Energi setiap keadaan mikro adalah

$$E_{ms} = \sum_{s=1}^{\infty} n_s E_s \quad (12.4)$$

dan jumlah partikel

$$N = \sum_{s=1}^{\infty} n_s \quad (12.5)$$

Fungsi Partisi,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{ms} \exp(-\beta E) \\ &= \sum_{(n_1, n_2, n_3, \dots)} \exp[-\beta(n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + n_3 \epsilon_3 + \dots)] \end{aligned} \quad (12.6)$$

Aproksimasi dengan menggunakan anggapan bahwa sistem non-degenerate. Dengan ketentuan bahwa jumlah tingkat energi dengan $\epsilon_s < kT$ lebih besar dari jumlah partikel N , sehingga kemungkinan dua partikel berada pada tingkat energi yang sama sangat kecil. Dengan kata lain setiap tingkatan energi cenderung diisi oleh satu partikel. Untuk mengerti konsep ini lebih jelas, umpama ada empat orang mahasiswa memasuki ruangan yang berisi dua puluh kursi duduk, kemungkinan besar mahasiswa tidak perlu memakai kursi yang sama karena tersedia banyak kursi. Lain halnya jika di dalam ruangan tersebut ada tiga kursi duduk, maka ada kemungkinan sedikinya satu kursi diduduki oleh dua orang. Di umpama ini, kita bisa ibaratkan mahasiswa sebagai partikel dan kursi sebagai tingkatan energi.

Dengan asumsi ini, kita memperoleh nilai n_s mempunyai dua kemungkinan yaitu $n_s = 0$ atau $n_s = 1$.

Untuk mempermudah pemahaman kita akan memulai menghitung fungsi partisi dengan contoh dengan nilai N yang kecil terlebih dahulu.

Jika $N = 1$, keadaan mikronya yaitu $(1, 0, 0, 0, \dots)$, $(0, 1, 0, 0, \dots)$, $(0, 0, 1, 0, \dots)$, $(0, 0, 0, 1, \dots)$ dan seterusnya.

Gambar pengisian tingkatan energi.

Maka fungsi partisinya menjadi

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{(n_1, n_2, n_3, \dots)} \exp[-\beta(n_1\epsilon_1 + n_2\epsilon_2 + n_3\epsilon_3 + \dots)] \\
 &= \exp(-\beta\epsilon_1) + \exp(-\beta\epsilon_2) + \exp(-\beta\epsilon_3) + \dots \\
 &= \sum_s \exp(-\beta\epsilon_s)
 \end{aligned} \tag{12.7}$$

dengan cara yang sama, untuk $N = 2$ dan melakukan pengisian seperti untuk $N = 1$, kita memperoleh keadaan mikronya yaitu $(1, 1, 0, 0, \dots)$, $(1, 0, 1, \dots)$

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{(n_1, n_2, n_3, \dots)} \exp[-\beta(n_1\epsilon_1 + n_2\epsilon_2 + n_3\epsilon_3 + \dots)] \\
 &= \exp(-\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)) + \exp(-\beta\epsilon_1 + \epsilon_3) + \exp(-\beta\epsilon_2 + \epsilon_3) + \dots \\
 &\approx \left[\sum_s \exp(-\beta\epsilon_s) \right]^2 \\
 &= \frac{1}{2!} [Z(N = 1)]^2
 \end{aligned} \tag{12.8}$$

Langkahnya kurang disini

Begitu pula untuk $N = 3$, kita mendapatkan $Z = \frac{1}{3!} [z(N = 1)]^3$, dan seterusnya. Jadi secara umum untuk N partikel kita memperoleh,

$$Z(N) \approx \frac{1}{N!} [Z(N = 1)]^N \tag{12.9}$$

Sebagai perbandingan untuk partikel yang bisa dibedakan, kita mempunyai

$$Z(N) = [Z(N = 1)]^N \tag{12.10}$$

Jadi ada factor $1/N!$, karena kita tidak bisa membedakan partikel. Dengan kata lain, jika kita melihat fungsi partisi untuk sistem partikel yang bisa dibedakan, untuk mengubah ke bentuk fungsi partisi untuk partikel yang tidak bisa dibedakan kita harus membagi fungsi partisinya dengan $N!$ karena ada $N!$ keadaan mikro yang sama.

Contoh sistem.

Untuk gas kuantum ideal, tanpa interaksi antar partikel.

$$Z(N) \approx \frac{1}{N!} z^N \quad (12.11)$$

dengan,

$$z = \sum_s \exp(-\beta \epsilon_s) \quad (12.12)$$

Untuk molekul, energi ϵ dapat dibagi menjadi beberapa bagian seperti energi translasi (ϵ_{trans}), energi rotasi (ϵ_{rot}), dan energi vibrasi (ϵ_{vib}).

$$\epsilon = \epsilon_{trans} + \epsilon_{rot} + \epsilon_{vib} \quad (12.13)$$

fungsi partisinya

$$\begin{aligned} z &= \sum_{ijk} \exp(-\beta[\epsilon_{i,trans} + \epsilon_{j,rot} + \epsilon_{k,vib}]) \\ &= \sum_{ijk} \exp(-\beta \epsilon_{i,trans}) \cdot \exp(-\beta \epsilon_{j,rot}) \cdot \exp(-\beta \epsilon_{k,vib}) \end{aligned} \quad (12.14)$$

Indeks i, j dan k adalah indeks untuk tingkatan energi translasi, rotasi dan vibrasi. Karena penjumlahan indeks i, j dan k dapat dilakukan secara independen, maka

$$\begin{aligned} z &= \left[\sum_i \exp(-\beta \epsilon_{i,trans}) \right] \cdot \left[\sum_j \exp(-\beta \epsilon_{j,rot}) \right] \cdot \left[\sum_k \exp(-\beta \epsilon_{k,vib}) \right] \\ &= z_{trans} \cdot z_{rot} \cdot z_{vib} \end{aligned} \quad (12.15)$$

Kita tentukan logaritma dari fungsi partisi,

$$\begin{aligned} \ln Z &\approx N \ln z - \ln N! \\ &= N \ln z_{trans} + N \ln z_{rot} + N \ln z_{vib} - \ln N! \end{aligned} \quad (12.16)$$

Energi dalamnya menjadi,

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \\ &= -N \frac{\partial \ln z_{trans}}{\partial \beta} - N \frac{\partial \ln z_{rot}}{\partial \beta} - N \frac{\partial \ln z_{vib}}{\partial \beta} \\ &= U_{trans} + U_{rot} + U_{vib} \end{aligned} \quad (12.17)$$

Fungsi partisi untuk energi translasi,

Untuk partikel dalam kotak/kubus dengan panjang sisi $a = L$, dengan menyelesaikan persamaan Schroödinger untuk partikel bebas, kita memperoleh tingkatan energi sebagai berikut.

$$\epsilon_{trans} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (12.18)$$

di mana n_x , n_y dan n_z adalah bilangan bulat positif. Fungsi partisi untuk energi translasi ini, adalah

$$\begin{aligned} z &= \sum_{n_x n_y n_z} \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\right) \\ &= \sum_{n_x n_y n_z} \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n_x^2\right) \cdot \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n_y^2\right) \cdot \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n_z^2\right) \\ &= \left[\sum_{n_x} \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n_x^2\right) \right] \cdot \left[\sum_{n_y} \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n_y^2\right) \right] \cdot \left[\sum_{n_z} \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n_z^2\right) \right] \\ &= \left[\sum_n \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n^2\right) \right]^3 \end{aligned} \quad (12.19)$$

Jika kita menggunakan asumsi bahwa tingkatan energinya rapat atau beda dua tingkatan energi yang bersampingan adalah kecil atau $\frac{h^2}{8mL^2} \ll 1$ maka kita dapat mengubah penjumlahan menjadi sebuah integrasi,

$$\begin{aligned} z &\approx \left[\int_0^\infty \exp\left(-\beta \frac{h^2}{8mL^2}n^2\right) dn \right]^3 \\ &= \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi mL^2}{\beta h^2}} \right]^3 \\ &= \left[\frac{2\pi mL^2}{\beta h^2} \right]^{3/2} \\ &= V \left[\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right]^{3/2} \end{aligned} \quad (12.20)$$

Kita menggunakan $V = L^3$.

Energi dalam untuk translasi adalah

$$U_{trans} = -N \frac{\partial \ln z_{trans}}{\partial \beta} = \frac{3N}{2\beta} = \frac{3}{2} NkT \quad (12.21)$$

Fungsi partisi untuk Energi rotasi.
Tingkatan energinya adalah

$$\epsilon_{rot} = \frac{h^2}{8\pi I} J(J+1) \quad (12.22)$$

di mana $J = 0, 1, 2, \dots$ dan setiap J terdapat $(2J+1)$ energi degene-
ret.

langkah missing here.

$$z_{rot} = \sum_J (2J+1) \exp(-\beta h^2 J(J+1)/8\pi^2 I) \quad (12.23)$$

Untuk menyederhanakan, kita gunakan sebuah temperatur karak-
teristik yang diberikan oleh

$$\Theta_{rot} = \frac{h^2}{8k\pi^2 I} \quad (12.24)$$

dengan asumsi $\Theta_{rot}/T \ll 1$, kita ubah penjumlahan menjadi inte-
grasi,

$$z_{rot} = \int_0^\infty dJ (2J+1) \exp(-J(J+1)\Theta_{rot}/T) \quad (12.25)$$

Dengan substitusi $x = J(J+1)$ dan $dx = (2J+1)dJ$, integral menjadi

$$z_{rot} = \int_0^\infty \exp(-x\Theta_{rot}/T) dx = T/\Theta_{rot} \quad (12.26)$$

atau Jadi fungsi partisi,

$$z_{rot} = \frac{8\pi^2 I}{\beta h^2} \quad (12.27)$$

dengan fungsi partisi ini, kita kemudian dapat memperoleh, energi
dalam

$$U = N/\beta = NkT \quad (12.28)$$

Fungsi partisi untuk energi vibrasi. ini sudah dijelaskan di aplikasi bab 7. tetapi kita akan ulang kembali

Energi untuk sistem harmonik adalah

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (12.29)$$

Fungsi partisi untuk osilator harmonik menjadi

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0) \\ &= \exp(-\beta\hbar\omega_0/2) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n\hbar\omega_0) \end{aligned} \quad (12.30)$$

Dengan menggunakan penjumlahan deret geometri,

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad (12.31)$$

berlaku untuk $|x| < 1$,

kita kemudian dapat memperoleh fungsi partisi,

$$\begin{aligned} Z &= \exp(-\beta\hbar\omega_0/2) \frac{1}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_0)} \\ &= \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega_0/2) - \exp(-\beta\hbar\omega_0/2)} \\ &= \frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)} \end{aligned} \quad (12.32)$$

Temperatur karakteristik untuk vibrasi didefinisikan dengan $\Theta_{vib} = \hbar\omega_0/k$

Energi dalamnya adalah

$$\begin{aligned} U &= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega_0/2)} \right] \\ &= N \frac{\partial \ln[2 \sinh(\beta\hbar\omega_0/2)]}{\partial \beta} \\ &= \frac{N \cosh(\beta\hbar\omega_0/2)(\hbar\omega_0/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega_0/2)} \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega_0 N \coth(\beta\hbar\omega_0/2) \end{aligned} \quad (12.33)$$

kapasitas panas,

$$c_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = Nk \frac{[\beta \hbar \frac{\omega_0}{2}]^2}{\sinh(\beta \hbar \omega_0 / 2)} \quad (12.34)$$

RECHECK !

12.3 degenerasi

Pada bagian ini kita akan mempelajari sistem kuantum untuk partikel yang tidak bisa dibedakan dengan energi yang degenerate. Kita akan menggunakan konsep occupation number n_s yang merupakan jumlah partikel pada tingkat energi tertentus s . Setiap keadaan mikro di tandain/label dengan (n_1, n_2, n_3, \dots) . Untuk sistem degenerate, satu tingkatan energi dapat menampung 2 atau lebih partikel.

Sistem dengan tingkatan energi yang degenerate terjadi pada temperature rendah di mana $\epsilon_s > kT$.

contoh satu keadaan mikro $(2, 1, 0, 0, 0)$ untuk tiga partikel mempunyai energi $\epsilon = 2 \cdot \epsilon_1 + \epsilon_2$.

Gambar pengisian tingkatan energi.

Seperti sebelumnya, jumlah partikel pada sistem adalah $N = \sum_s n_s$.

Karena setiap tingkatan dapat diisi berapa saja, bagaimana mendapatkan n_s .

Di alam terdapat tiga tipe partikel sesuai dengan jenis statistiknya:

1. Fermion adalah partikel yang memenuhi statistik Fermi-Dirac, sebagai contohnya Elektron dan Proton. nilai n_s hanya berisi satu atau kosong, $n_s = 0, 1$. Jadi satu tingkatan energi berisi maksimum hanya satu partikel.
2. Boson adalah partikel yang memenuhi statistik Bose-Einstein, sebagai contohnya atom hidrogen, helium. Pada statistik ini setiap tingkatan dapat berisi partikel berapa saja.
3. Anyon ...baca lagi.

Jenis partikel ini, sesuai dengan simetri dari fungsi gelombangnya. dan apakah mengikuti larangan Pauli.

sebagai conoth untuk dua partikel simetri partikel. simetri jika dua partikel ditukar

Jika partikel ditukar, karena partikel tidak bisa dibedakan berarti, distribusi/probabilitas partikel haruslah sama, jadi

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2 \quad (12.35)$$

Jadi perbedaanya hanya pada fasenya saja.

$$\psi(x_1, x_2) = e^{i\phi} \psi(x_2, x_1) \quad (12.36)$$

untuk Fermion

$$\psi(x_1, x_2) = -1\psi(x_2, x_1) \quad (12.37)$$

untuk Boson

$$\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) \quad (12.38)$$

untuk Anyon, nilainya fasenya bisa berapa saja.

$$\psi(x_1, x_2) = \exp(i\phi)\psi(x_2, x_1) \quad (12.39)$$

Tapi pada buku ini kita hanya membahas dua jenis partikel, Fermion dan Boson. Jenis partikel anyon tidak akan dibahas, karena ini merupakan perkembangan teori fisika yang terbaru dan belum menjadi hal yang perlu diajarkan pada tingkat Sarjana.

12.4 Fermion

$$n_s = 0, 1 \quad (12.40)$$

Untuk mempermudah dalam penurunan persamaan, kita akan menggunakan sistem terbuka karena penjumlahan lebih mudah dilakukan pada sistem terbuka daripada sistem tertutup.

Fungsi partisi untuk sistem terbuka untuk fermion adalah

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{ms} \exp(\beta\mu N - \beta E) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{(n_1, n_2, n_3, \dots)} \exp(\beta\mu N - \beta \sum_s n_s \epsilon_s) \end{aligned} \quad (12.41)$$

dengan syarat konstrain $\sum_s n_s = N$.

Untuk memperjelas bagaimana melakukan penjumlahan untuk mendapatkan fungsi partisi Q , kita menggunakan contoh sebuah sistem yang terdiri dari dua tingkatan energi. jumlah partikel yang memenuhi syarat untuk fermion adalah $N = 0, 1, 2$. Untuk $N = 0$, satu keadaan mikro yaitu $(0, 0)$, untuk $N = 1$, keadaan mikronya adalah $(1, 0)$ dan $(0, 1)$. dan untuk $N = 2$ keadaan mikro yang sesuai adalah $(1, 1)$ seperti terlihat pada Gambar. Jadi untuk sistem dua tingkatan ini, mempunyai fungsi partisi,

$$\begin{aligned}
 Q &= e^{\beta\mu(0)-\beta(0)} + e^{\beta\mu}[e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}] + e^{\beta\mu(2)}[e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2)}] \\
 &= 1 + e^{\beta\mu}[e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}] + e^{2\beta\mu}[e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2)}] \\
 &= [1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_1}][1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_2}] \\
 &= \prod_{s=1}^2 [1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_s}] \tag{12.42}
 \end{aligned}$$

Sekarang jika ada tiga tingkatan energi, jumlah partikel yang sesuai yaitu $N = 0, 1, 2, 3$, keadaan mikro untuk sistem ini adalah $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$, $(1, 1, 0)$, $(1, 0, 1)$, $(0, 1, 1)$, dan $(1, 1, 1)$. Fungsi partisinya yaitu,

$$\begin{aligned}
 Q &= e^{\beta\mu(0)-\beta(0)} + e^{\beta\mu}[e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2} + e^{-\beta\epsilon_3}] + e^{\beta\mu(2)}[e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2)} + e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_3)} + e^{-\beta(\epsilon_2+\epsilon_3)}] + e^{\beta\mu(3)}e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2+\epsilon_3)} \\
 &= 1 + e^{\beta\mu}[e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2} + e^{-\beta\epsilon_3}] + e^{2\beta\mu}[e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2)} + e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_3)} + e^{-\beta(\epsilon_2+\epsilon_3)}] + e^{3\beta\mu}e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2+\epsilon_3)} \\
 &= [1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_1}][1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_2}][1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_3}] \\
 &= \prod_{s=1}^3 [1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_s}] \tag{12.43}
 \end{aligned}$$

Dengan melihat dua kasus ini, kita dapat melihat pola yang jelas, untuk $N_s = \infty$ jumlah tingkatan energi, fungsi partisinya yaitu

$$Q = \prod_{s=1}^{\infty} [1 + e^{\beta\mu-\beta\epsilon_s}] \tag{12.44}$$

12.5 Boson

$$n_s = 0, 1, 2, 3, \dots \tag{12.45}$$

Seperti halnya untuk fermion, sistem boson juga menggunakan sistem terbuka dalam penyederhanaan fungsi partisinya.

Fungsi partisi untuk sistem terbuka untuk boson adalah

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{ms} \exp(\beta\mu N - \beta E) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{(n_1, n_2, n_3, \dots)} \exp(\beta\mu N - \beta \sum_s n_s \epsilon_s) \end{aligned} \quad (12.46)$$

dengan syarat konstrain $\sum_s n_s = N$.

Untuk memperjelas bagaimana melakukan penjumlahan untuk mendapatkan fungsi partisi Q , kita menggunakan contoh sebuah sistem yang terdiri dari dua tingkatan energi (ϵ_1 dan ϵ_2). Keadaan mikro yang memenuhi kriteria untuk boson berjumlah tak terhingga, karena jumlah partikel yang menempati tingkat energi yang sama bisa berapa saja. Beberapa keadaan mikro yang memiliki energi terendah yaitu $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$, $(2, 0)$, $(1, 1)$, $(0, 2)$, $(3, 0)$, $(2, 1)$, $(1, 2)$, $(0, 3)$ dan seterusnya. seperti terlihat pada Gambar. Jadi untuk sistem dua tingkatan ini, mempunyai fungsi partisi,

$$\begin{aligned} Q &= e^{\beta\mu(0) - \beta(0)} + e^{\beta\mu} [e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}] + e^{\beta\mu(2)} [e^{-\beta 2\epsilon_1} + e^{-\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} + e^{-\beta 2\epsilon_2}] + \dots \\ &= 1 + e^{\beta\mu} [e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}] + e^{\beta\mu(2)} [e^{-\beta 2\epsilon_1} + e^{-\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} + e^{-\beta 2\epsilon_2}] + \dots \\ &= [1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_1)} + e^{2\beta(\mu - \epsilon_1)} + \dots] \times [1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_2)} + e^{2\beta(\mu - \epsilon_2)} + \dots] \\ &= \prod_{s=1}^2 [1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_s)} + e^{2\beta(\mu - \epsilon_s)} + e^{3\beta(\mu - \epsilon_s)} + \dots] \\ &= \prod_{s=1}^2 [1 - e^{\beta\mu - \beta\epsilon_s}]^{-1} \end{aligned} \quad (12.47)$$

Dengan cara yang sama, kita dapat melihat pola yang jelas, untuk $N_s = \infty$ jumlah tingkatan energi, fungsi partisinya yaitu

$$Q = \prod_{s=1}^{\infty} [1 - e^{\beta\mu - \beta\epsilon_s}]^{-1} \quad (12.48)$$

Kedua rumus untuk fungsi partisi fermion dan boson,

$$Q = \prod_{s=1}^{\infty} [1 \pm e^{\beta\mu - \beta\epsilon_s}]^{\pm 1} \quad (12.49)$$

tanda + untuk fermion dan – untuk boson.
logaritma fungsi partisinya adalah,

$$\ln Q = \pm \sum_{s=1}^{\infty} \ln[1 \pm e^{\beta\mu - \beta\epsilon_s}] \quad (12.50)$$

Sekarang berapa jumlah rata-rata partikel menempati tingkat energi $s = q$?

$$\begin{aligned} \langle n_q \rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{ms} n_q P(E, N) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{ms} n_q \frac{1}{Q} \exp(\beta\mu N - \beta E) \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{ms} n_q \exp(\beta\mu N - \beta \sum_s n_s \epsilon_s) \\ &= \frac{1}{Q} \left(-\frac{1}{\beta} \right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_q} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{ms} \exp(\beta\mu N - \beta \sum_s n_s \epsilon_s) \\ &= -\frac{1}{\beta Q} \frac{\partial Q}{\partial \epsilon_q} \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q}{\partial \epsilon_q} \end{aligned} \quad (12.51)$$

$$\begin{aligned} \langle n_q \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_q} \left[\pm \sum_{s=1}^{\infty} \ln(1 \pm e^{\beta\mu - \beta\epsilon_s}) \right] \\ &= \frac{e^{\beta\mu - \beta\epsilon_q}}{(1 \pm e^{\beta\mu - \beta\epsilon_q})} \\ &= (e^{-\beta(\mu - \epsilon_q)} \pm 1)^{-1} \end{aligned} \quad (12.52)$$

Perlu ingat bahwa tanda + untuk fermion dan – untuk boson.
Gambar plot n_q disini.

Kita perhatikan bahwa distribusi \bar{n}_q tergantung pada nilai μ . Kuantitas ini yang harus kita tentukan dengan melihat kondisi keadaan sebelumnya. Syarat yang kita gunakan untuk menentukan μ adalah kondisi dimana jumlah rata-rata partikel dalam sistem harus \bar{N} . Jadi

$$\bar{N} = \sum_q \bar{n}_q = \sum_q [1 + e^{-\beta(\mu - \epsilon_q)}]^{-1} \quad (12.53)$$

$$\epsilon_q = \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2L} \right)^2 \mathbf{q}^2 \quad (12.54)$$

Ingat bahwa $\mathbf{q}^2 = q_x^2 + q_y^2 + q_z^2$ dan $q_x, q_y, q_z = 0, 1, 2, \dots$.

Disamping itu partikel dapat juga mempunyai spin σ , proyeksi pada sumbu z adalah $\sigma_z = -\sigma, -\sigma+1, \dots, \sigma$. Ada $(2\sigma+1)$ jumlah tingkatan energi dan semua energi mempunyai nilai yang sama, atau degenerasi.

Penjumlahan pada persamaan di atas di gantikan dengan,

$$\sum_q \equiv \sum_{\sigma_z=-\sigma}^{\sigma} \sum_{q_x=0}^{\infty} \sum_{q_y=0}^{\infty} \sum_{q_z=0}^{\infty} \quad (12.55)$$

Dan karena tingkat energi ϵ_q rapat, kita dapat mengaproksimasi penjumlahan dengan integral seperti sebelumnya yang sudah kita lakukan di bab?

$$\sum_q \equiv \sum_{\sigma_z=-\sigma}^{\sigma} \int_0^{\infty} d^3q \quad (12.56)$$

Jadi jumlah rata-rata partikel adalah

$$\bar{N} = \sum_{\sigma_z=-\sigma}^{\sigma} \int_0^{\infty} d^3q [1 + \exp(-\beta(\mu - \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2L} \right)^2 \mathbf{q}^2))]^{-1} \quad (12.57)$$

Karena bagian integrasi tidak tergantung pada σ_z maka jumlah $\sum_{\sigma_z} = 2\sigma + 1 = g$. Kita ubah representasi menjadi koordinat momentum dimana $\mathbf{p} = \frac{h\mathbf{q}}{2L}$, Jumlah rata-rata menjadi

$$\bar{N} = g \left(\frac{2L}{h} \right)^3 \int_0^{\infty} d^3p [1 + \exp(-\beta(\mu - p^2/2m))]^{-1} \quad (12.58)$$

Karena fungsi pada integral atau integran adalah fungsi simetrik atau genap, maka kita dapat mengubah integral di atas menjadi

$$\bar{N} = \left(\frac{gV}{h^3} \right) \int_0^{\infty} d^3p [1 + \exp(-\beta(\mu - p^2/2m))]^{-1} \quad (12.59)$$

Kita telah menggunakan $L^3 = V$. Persamaan ini menentukan hubungan antara μ dengan \bar{N} , V dan T .

Jadi distribusi $\bar{n}(\mathbf{p})$ adalah

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = \left(\frac{gV}{h^3} \right) [1 + \exp(-\beta(\mu - p^2/2m))]^{-1} \quad (12.60)$$

Pertanyaan kita adalah bagaimana hubungan dengan distribusi Maxwell. Kita mendapatkan sebelumnya untuk distribusi Maxwell yaitu

$$\eta(\mathbf{p}) = N(2\pi mkT)^{-3/2} e^{-\beta p^2/2m} \quad (12.61)$$

Jika kita ambil situasi dimana $e^{\beta\mu} \ll 1$ maka kita akan memperoleh

$$\begin{aligned} \bar{n}(\mathbf{p}) &= \left(\frac{gV}{h^3} \right) \frac{\exp(\beta(\mu - p^2/2m))}{\exp(\beta(\mu - p^2/2m)) + 1} \\ &\approx \left(\frac{gV}{h^3} \right) \exp(\beta(\mu - p^2/2m)) \\ &= \left(\frac{gV}{h^3} \right) e^{\beta\mu} e^{-\beta p^2/2m} \end{aligned} \quad (12.62)$$

Persamaan ini hampir sama dengan persamaan distribusi Maxwell dengan perbedaan koefisien. Di sini kita belum menentukan nilai μ .

Jika kita substitusi persamaan di atas ke integral untuk \bar{N} maka

$$\bar{N} \approx \left(\frac{gV}{h^3} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d^3p e^{\beta\mu} e^{-\beta p^2/2m} = \left(\frac{gV}{h^3} \right) \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{3/2} e^{\beta\mu} \quad (12.63)$$

Jadi kita memperoleh

$$e^{\beta\mu} = \left(\frac{h^3}{gV} \right) \frac{\bar{N}}{(2m\pi kT)^{3/2}} \quad (12.64)$$

Substitusi hasil ini kita memperoleh

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = \bar{N}(2\pi mkT)^{-3/2} e^{-\beta p^2/2m} \quad (12.65)$$

Perbedaan dengan persamaan distribusi Maxwell adalah nilai rata-rata \bar{N} . Ini dikarenakan kita menggunakan sistem kanonik besar atau sistem terbuka untuk mempelajari sistem ini.

Sekarang apa maksud dari kondisi $e^{\beta\mu} \ll 1$ atau kondisi

$$e^{\beta\mu} = \left(\frac{h^3}{gV} \right) \left(\frac{\bar{N}}{(2m\pi kT)^{3/2}} \right) \ll 1 \quad (12.66)$$

Jika kita bandingkan dengan hasil sebelumnya untuk sistem non-degenerate, kondisi ini hampir sama dengan sistem non-degenerate. Ini juga menunjukkan sistem dalam keadaan klasik.

Sekarang bagaimana jika sistem yang degenerate atau $e^{\beta\mu} \gg 1$. Ini berarti juga bahwa $\beta\mu \gg 1$. Ini menunjukkan pula nilai β harusnya bernilai besar atau temperature T rendah. Untuk β yang mendekati ∞ atau suhu $T \rightarrow 0$, faktor

$$[1 + \exp(-\beta(\mu - p^2/2m))] = \{1 \text{ dan } \infty \quad (12.67)$$

Jika kita definisikan sebuah energi limit ϵ_F (energi Fermi) yaitu

$$\epsilon_F(\bar{N}, V) = \lim_{\mu} \mu(\bar{N}, V, T) \quad (12.68)$$

Maka

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = \left(\frac{gV}{h^3} \right) \text{jika } p^2/2m < \epsilon_F \quad (12.69)$$

13

Zat Padat

Pada bab ini, kita menggunakan /menerapkan sistematika fisika statistik untuk mempelajari sifat-sifat statistik dan termodinamika untuk zat padat terutama tentang kapasitas panasnya. Materi yang kita akan bahas yaitu tentang zat padat yang berupa kristal yang terdiri dari atom atau ion seperti (materi besi dan kristal garam) di mana atom atau ion berada pada lattice.

Kapasitas panas untuk suhu tinggi sesuai dengan hukum Dulong dan Petit adalah $3nR$.

Untuk mempelajari sistem kristal, karena atom terikat oleh sebuah potensial yang kita akan kita dekati dengan pendekatan potensial harmonik.

Seperti yang dijelaskan sebelumnya, nilai rata-rata energinya adalah

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\hbar\omega_0/kT) - 1} \quad (13.1)$$

13.1 Teori Einstein

Untuk pendekatan pertama, seperti yang dikemukakan oleh Einstein, menganggap bahwa setiap atom pada kristal zat padat terikat dan bergerak independen secara harmonik pada tiga sumbu axisnya. Jadi ada $3 \times N$ osilator harmonik dengan energi seperti sebelumnya.

Jadi energi dalam dengan pendekatan Einstein adalah

$$\langle \epsilon \rangle = 3N \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\hbar\omega_0/kT) - 1} \quad (13.2)$$

Kapasitas panasnya menjadi

$$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3N \frac{\hbar\omega_0}{\exp(\hbar\omega_0/kT) - 1} \text{(cek lagi)} \quad (13.3)$$

Karakteristik frekuensi Einstein adalah

$$\theta_E = \frac{h\nu_E}{k} \quad (13.4)$$

Teori Einstein ini kurang akurat untuk temperatur rendah tetapi mendekati sebenarnya untuk temperature tinggi.

13.2 Teori Debye

Teori Einstein menggunakan pendekatan bahwa setiap atom dianggap bergerak secara independen. Tetapi kenyataannya ini tidak demikian, setiap atom bergerak akan mempengaruhi gerakan atom di lattice yang berdekatan atau dengan kata lain semua atom bergerak/bergetar secara bersamaan dan saling mempengaruhi.

Teori Debye menjelaskan dengan menggunakan semua atom pada lattice secara keseluruhan. Jadi di sini kita mengasumsikan sebuah distribusi frekuensi, tidak hanya satu frakuensi seperti teori Einstein.

Distribusi frekuensinya adalah

$$g(\nu)d\nu = \frac{9N}{\nu_m^3} \nu^2 d\nu \quad (13.5)$$

Jadi distribusi energi menjadi

$$\begin{aligned} dE &= \langle \epsilon(\nu) \rangle g(\nu) d\nu = \langle \epsilon(\nu) \rangle g(\nu) \frac{9N}{\nu_m^3} \nu^2 d\nu \\ &= \frac{9Nh}{\nu_m^3} \frac{\nu^2}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \end{aligned} \quad (13.6)$$

karateristik temperatur Debye,

$$\theta_D = h\nu_m/k \quad (13.7)$$

Energi totalnya didapat dengan menjumlahkan (mengintegalkan) untuk semua frekuensi dibawah frekuensi $\nu_m = \theta_D/T$.

$$U = 9RT \left(\frac{T^3}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} \frac{u^3}{e^u - 1} du \right) \quad (13.8)$$

Integral ini harus dihitung secara numerik.

Untuk mendapatkan kapasitas panasnya kita menghitung terlebih dahulu kapasitas panas per vibrasi atau $c_v = \frac{\partial \langle \epsilon \rangle}{\partial T}$.

kemudian kapasitas panasnya dapat dilakukan dengan,

$$c_v = \int_0^{\nu_m} (d\langle \epsilon \rangle / dT) g(\nu) d\nu \quad (13.9)$$

dan kemudian menghasilkan,

$$c_{vD} = 3RD(\theta_D/T) \quad (13.10)$$

$D()$ adalah

untuk temperatur rendah $T \ll \theta_D$,

$$\begin{aligned} U(\text{low}) &= \frac{9RT^4}{\theta_D^3} \int_0^\infty \frac{u}{e^u - 1} du \\ &= \frac{9RT^4}{\theta_D^3} \frac{\pi^4}{15} \end{aligned} \quad (13.11)$$

14

Sistem Dielektrik Sederhana

Pada bagian ini kita akan membahas sifat-sifat sistem dielektrik yang terdiri dari molekul-molekul dengan momen dipol listrik. Jika suatu medan listrik diberikan pada sebuah dipol listrik, energi potensial antara dipol dan medan listrik adalah

$$\Phi = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{p} - (1/2)(\alpha\mathbf{E}) \cdot \mathbf{E} \quad (14.1)$$

Dengan kuantitas \mathbf{p} adalah momen dipol permanen molekul, α adalah polarisabilitas molekul. Perlu diingat kembali bahwa $\alpha\mathbf{E}$ adalah momen dipol induksi.

Jika kita asumsikan bahwa interaksi antar molekul tidak ada atau dengan kata lain dielektrik dalam keadaan gas atau solusi yang dilut sehingga molekul-molekul tidak terlalu berdekatan. Energi potensial total dari sistem ini adalah

$$E = E_0 - \frac{1}{2}N\alpha E^2 - \sum_{i=1}^N \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}_i \quad (14.2)$$

di mana E_0 merupakan energi total ketika medan listrik nol. Perumusan untuk E_0 tidak perlu diperhatikan karena kita hanya meninjau pengaruh yang diakibatkan oleh sifat dielektrik atau dipol listrik.

Karena orientasi dari dipol listrik tidak terkuantisasi, maka nilai arah dipol dapat sembarangan. Seperti yang dilakukan sebelumnya (bab ?) fungsi partisi sistem dielektrik adalah perkalian fungsi partisi $Z_0(T, V)$ karena energi E_0 dan fungsi partisi Z_p karena bagian energi momen dipolnya.

$$\begin{aligned}
Z &= Z_0(T, V) Z_p \\
Z &= Z_0(T, V) \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin(\theta_1) \cdots \int_0^{2\pi} d\phi_N \int_0^\pi d\theta_N \sin(\theta_N) \\
&\quad \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2 + \beta \sum \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}_i\right)
\end{aligned} \tag{14.3}$$

$Z_0(T, V)$ merupakan fungsi partisi ketika medan listrik nol.

Karena energi tidak tergantung pada variabel ϕ maka integral di atas dapat disederhanakan menjadi

$$Z = Z_0(T, V) (2\pi)^N \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2\right) \int_0^\pi d\theta_1 \sin(\theta_1) \cdots \int_0^\pi d\theta_N \sin(\theta_N) \exp\left(\beta \sum \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}_i\right) \tag{14.4}$$

Seperti sebelumnya, kita dapat memperoleh,

$$Z = Z_0(T, V) (2\pi)^N \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2\right) \left[\int_0^\pi d\theta_1 \sin(\theta_1) \exp(\beta \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}_1) \right] \cdots \left[\int_0^\pi d\theta_N \sin(\theta_N) \exp(\beta \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}_N) \right] \tag{14.5}$$

$$Z = Z_0(T, V) (2\pi)^N \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2\right) \left[\int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \exp(\beta \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}) \right]^N \tag{14.6}$$

Substitusi $\mathbf{E} \cdot \mathbf{1} = Ep \cos(\theta)$

$$Z = Z_0(T, V) (2\pi)^N \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2\right) \left[\int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \exp(\beta Ep \cos(\theta)) \right]^N \tag{14.7}$$

dengan substitusi variable $y = \cos(\theta)$,

$$Z = Z_0(T, V) (2\pi)^N \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2\right) \left[\int_{-1}^1 \exp(\beta Epy) dy \right]^N \tag{14.8}$$

$$Z = Z_0(T, V) (2\pi)^N \exp\left(\beta \frac{1}{2} N \alpha E^2\right) \left[\frac{1}{\beta Ep} (\exp(\beta Epy) - \exp(-\beta Epy)) \right]^N \tag{14.9}$$

$$Z = Z_0(T, V) \left[\frac{4\pi \exp(\beta \frac{1}{2} \alpha E^2) \sinh(\beta E p y)}{\beta E p} \right]^N \quad (14.10)$$

Setelah kita mengetahui fungsi partisi ini, kita akan mempelajari sifat termodinamika sistem ini.

Kita perhatikan dengan melihat fungsi partisi Z_p tidak tergantung pada variabel V dan T maka sifat-sifat termodinamika tidak berubah ketika medan listrik diberikan.

$$\text{Tekanan} = kT \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = kT \frac{\partial \ln Z_0}{\partial V} \quad (14.11)$$

Energi dalam dipengaruhi oleh medan listrik sehingga rata-rata energi dalam bergantung pada interaksi antara momen dipol dan medan.

Sifat termodinamika yang baru dari sistem dielektrik adalah rata-rata total momen dipol molekul ()

$$= Z^{-1} \sum_{ms} (N + \sum_{i=1}^N p_i) e^{-E}$$

Menghubungkan sebagai total polarisasi sistem, dengan menggunakan notasi

$$\frac{\partial}{\partial} = \frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j + \frac{\partial}{\partial z} k$$

$$\frac{\partial E}{\partial} = - \left(N + \sum_{i=1}^N p_i \right)$$

Sehingga persamaan dapat ditulis

$$= Z^{-1} \frac{\partial}{\partial} \sum_{ms} e^{-E} = Z^{-1} \frac{\partial Z}{\partial}$$

$$= -1 \frac{\partial \ln Z}{\partial}$$

$$\ln Z = \ln Z_0(T, V) + \frac{1}{2} N^2 - N \ln(p) + N \ln [\sinh(p)] + N \ln 4$$

Dengan mensubstitusi persamaan $\ln Z$ ke persamaan diperoleh

$$= \left[N - \left(\frac{N}{p} \right) + \frac{N p \cosh(p)}{\sinh(p)} \right] ()$$

Atau

$$= N + Np \left[\coth(p) - \left(\frac{1}{p} \right) \right]$$

N mewakili total induksi polarisasi. Group kedua mewakili rata – rata yang dimiliki momen dipol permanen yang bergantung pada suhu. Persamaan ini akan mengecil seiring peningkatan suhu.

Fungsi Langevin

Definisi $L(x) = \coth(x) - \left(\frac{1}{x} \right)$

$L(x) \cong \frac{x}{3}$, x besar $L(x) \cong 1$. Sehingga persamaan total polarisasi dapat ditulis

$$= N + NpL(p)$$

Pada gambar $L(p) \cong p/3$, maka

$$\cong N + \left(\frac{Np^2}{3kT} \right)$$

Atau dapat ditulis $= \left(a + \frac{b}{T} \right)$

Grafik antara $1/T$ terhadap ϵ

Energi dalam

$$U = - \frac{\partial \ln Z}{\partial}$$

Atau bisa ditulis dengan hukum kedua termodinamika

$$dU' = TdS - p dV + d$$

$$d \ln Z = \frac{\partial \ln Z}{\partial} d + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV + \frac{\partial \ln Z}{\partial} d$$

$$d \ln Z = - U d + p dV + d$$

Dimana: $d(U) = U d + dU$

$$d() = d + d$$

Dan $p = kT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial} \right)$

Sehingga diperoleh

$$d(U +) = kT d(\ln Z + U) - p dV + d$$

Atau

$$dU + d = dU'$$

Maka energi dalam dapat diberikan oleh

$$U' = - \frac{\partial \ln Z_o(T, V)}{\partial} + \frac{N^2}{2}$$

15

Sistem Paramagnetik

Pada bagian ini, kita akan membahas tentang sistem paramagnetik yang terdiri dari molekul-molekul dengan dipol magnet μ_m dipengaruhi oleh medan magnet \mathbf{B} . Sudah dijelaskan sebelumnya karena ada dipol magnet molekul dan medan magnet, energi potensial dipol adalah

Jika kita menggunakan asumsi tidak ada interaksi antara dipol molekul yang satu dengan yang lainnya, maka energi total sistem magnetik adalah

$$E = E_0 - \sum_{i=1}^N \mu_m \cdot \mathbf{B} \quad (15.1)$$

di sini E_0 adalah energi total sistem pada saat $\mathbf{B} = 0$

Bentuk energi total ini hampir sama dengan energi untuk sistem dielektrik dengan polarizabilitas nol yang sudah dijelaskan sebelumnya yaitu

$$E = E_0 - \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_m \cdot \mathbf{E} \quad (15.2)$$

Hasil yang kita peroleh untuk sistem dielektrik dapat digunakan dengan melakukan penggantian variabel,

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &\rightarrow \mathbf{B} \\ \mathbf{p} &\rightarrow \mu_m \end{aligned} \quad (15.3)$$

Magnetisasi total sistem atau rata-rata total momen magnet dengan mengangap bahwa variabel μ_m merupakan variabel kontinyu (atau merupakan sistem klasik) adalah

$$\begin{aligned}\mathfrak{M} &= N\mu_m \left[\coth(\beta\mu_m B) - \frac{1}{\beta\mu_m B} \right] \\ &= N\mu_m L(\beta\mu_m B)\end{aligned}\quad (15.4)$$

di mana $L(x)$ adalah fungsi Langenvin. Untuk nilai x yang kecil atau $\beta\mu_m B \ll 1$, kita dapat menggunakan aproksimasi $L(x) \approx x/3$ sehingga kita memperoleh

$$\mathfrak{M} \approx \frac{\beta N \mu_m^2 B}{3} \quad (15.5)$$

Kita perhatikan bahwa magnetisasi total berbanding lurus dengan βB atau B/T (Hukum Curie). Jadi

$$\mathfrak{M} = C \left(\frac{B}{T} \right) \quad (15.6)$$

di mana C adalah proportional konstan atau yang disebut konstanta Curie yang bernilai (dari teori klasik),

$$C = \frac{N\mu_m^2}{3k} \quad (15.7)$$

Jika kita tinjau dengan kuantum teori, energi sistem paramagnetik tidaklah kontinyu, melainkan diskrit. Seperti yang sudah dijelaskan pada bab ?? bagian ?? bahwa komponen μ_m sepanjang arah B hanya bisa bernilai tertentu dan diskrit atau terkuantisasi dan harus merupakan kelipatan magneton Bohr. Energi potensial menjadi

$$-\mu_m B = -2\mu_B M B \quad (15.8)$$

di mana $\mu_B = eh/(4\pi m_e)$ dan M merupakan bilangan bulat yang bernilai antara J dan $-J$.

$$m_B = -2$$

Untuk mempelajari sistem paramagnetik ini kita menggunakan sistem kanonik dengan jumlah molekul N dan molekul dapat dibedakan, sehingga kita memperoleh fungsi partisi sistem adalah perkalian fungsi partisi untuk energi kinetik dan potensial selain energi dipol magnet ($Z_0(T, V)$) dan fungsi-fungsi partisi untuk masing-masing dipol molekul,

$$\begin{aligned}
Z &= Z_0(T, V) \left(\sum_{M_1=-J}^J e^{\beta Z \mu_1 m \beta} \right) \cdots \left(\sum_{M_N=-J}^J e^{\beta 2 \mu M_N B} \right) \\
&= Z_0(T, V) \left(\sum_{M=-J}^J e^{\beta Z \mu m \beta} \right)^N
\end{aligned} \tag{15.9}$$

Kita telah menggunakan fakta bahwa fungsi partisi masing-masing dipol adalah sama sehingga perkalian menjadi pangkat.

Sekarang kita akan menghitung deret fungsi partisi untuk masing-masing dipol. Untuk mempermudah perhitungan kita gunakan $x = \beta 2 \mu_B B$, Fungsi partisi untuk satu dipol adalah

$$\sum_{M=-J}^J e^{Mx} = e^{-J} (1 + e^x + e^{2x} + \cdots + e^{2Jx}) \tag{15.10}$$

Agar lebih sederhana, kita substitusi $e^x = a$, persamaan di atas menjadi

$$\sum_{M=-J}^J e^{Mx} = e^{-J} (1 + a + a^2 + \cdots + a^{2J}) \tag{15.11}$$

Dengan menggunakan rumus jumlah deret geometri yaitu

$$(1 + a + a^2 + \cdots + a^{2J}) = \frac{a^{2J+1} - 1}{a - 1} \tag{15.12}$$

Substitusi kembali nilai a , fungsi partisi

$$\begin{aligned}
\sum_{M=-J}^J e^{Mx} &= e^{-J} \frac{(e^{(2J+1)x} - 1)}{e^x - 1} \\
&= \frac{e^{(J+1/2)x} - e^{-(J+1/2)x}}{e^{x/2} - e^{-x/2}} \\
&= \frac{\sinh[(J + 1/2)x]}{\sinh[x/2]}
\end{aligned} \tag{15.13}$$

Sehingga fungsi partisi keseluruhan menjadi

$$Z = Z_0(T, V) \left[\frac{\sinh[(J + 1/2)x]}{\sinh[x/2]} \right]^N \tag{15.14}$$

Logaritma fungsi partisi,

$$\begin{aligned}\ln Z &= \ln Z_0(T, V) + N \ln \left[\frac{\sinh[(J + (1/2))x]}{\sinh(x/2)} \right] \\ &= \ln Z_0(T, V) + N \ln[\sinh[(J + (1/2))x]] - N \ln[\sinh(x/2)]\end{aligned}\quad (15.15)$$

$$x = 2\beta\mu_B B$$

Magnetisasi total \mathfrak{M} dapat diperoleh dari fungsi partisi dengan menggunakan persamaan,

$$\mathfrak{M} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \quad (15.16)$$

Turunkan persamaan ini!

Dalam melakukan penurunan persamaan untuk \mathfrak{M} kita menggunakan aturan rantai turunan yaitu,

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial B} = \frac{\partial x}{\partial B} \frac{\partial \ln Z}{\partial x} = 2\beta\mu_B \frac{\partial \ln Z}{\partial x} \quad (15.17)$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{M} &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \\ &= 2\mu_B \frac{\partial \ln Z}{\partial x} \\ &= 2N\mu_B \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \ln[\sinh((J + (1/2))x)] - \frac{\partial}{\partial x} \ln[\sinh(x/2)] \right\} \\ &= 2N\mu_B \left\{ (J + (1/2)) \frac{\cosh[(J + (1/2))x]}{\sinh[(J + (1/2))x]} - (1/2) \frac{\cosh(x/2)}{\sinh(x/2)} \right\} \\ &= N\mu_B \{ (2J + 1) \coth[(J + (1/2))x] - \coth(x/2) \}\end{aligned}\quad (15.18)$$

interpretasi di sini.

Untuk kasus medan magnet B yang rendah atau pada suhu T yang tinggi sehingga $x = 2\mu_B B/kT \ll 1$, maka kita dapat menggunakan aproksimasi,

$$\coth(x) \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} \quad (15.19)$$

Magnetisasi total menjadi,

$$\mathfrak{M} \approx N\mu_B \left[\frac{1}{6}(2J + 1)^2 x - \frac{1}{6}x \right] \quad (15.20)$$

Bentuk hukum Curie menjadi :

$$\begin{aligned}\mathfrak{M} &= \frac{4}{3}\beta NJ(J+1)\mu_B^2 B \\ &= \left(\frac{4\beta NJ(J+1)\mu_B^2}{3k} \right) \left(\frac{B}{T} \right)\end{aligned}\quad (15.21)$$

16

Pengenalan Mekanika Kuantum

Energi yang diperlukan dalam mempelajari suatu sistem dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan mekanika kuantum. Untuk partikel dengan kecepatan lebih kecil dari kecepatan cahaya, kita menggunakan persamaan Schrödinger.

Di bab ini kita akan membahas tentang bagaimana memformulasikan atau mendapatkan persamaan Schrödinger untuk sistem yang kita perlukan. Bab ini hanya mengenalkan secara singkat tentang konsep apa yang diperlukan untuk memperoleh energi sistem. Oleh karena itu kita hanya membahas secara garis besar tentang formulasi Kuantum. Untuk penjelasan yang lebih rinci dan akurat secara matematik dapat dibaca pada buku-buku mekanika kuantum seperti ??.

Sebelum meninjau lebih jauh tentang mekanika kuantum, kita terlebih dahulu mempelajari secara singkat bagaimana sejarah perkembangan mekanika kuantum.

Sebelum abad ke 19an, sudah dimengerti bahwa gelombang elektromagnetik merupakan sebuah gelombang yang terjadi karena perubahan medan listrik dan medan magnet. Gelombang dalam pengertian bahwa sifatnya kontinu dan tidak mempunyai massa. Walaupun demikian gelombang bisa membawa momentum.

Kemudian ditemukan fenomena/permasalahan untuk radiasi benda hitam, yang mana radiasinya tidak sesuai dengan teori elektromagnetik (EM). Bahwa spectrum teori klasik menyatakan bahwa spectrum akan semakin meningkat jika frekuensinya semakin tinggi. Ini tidak sesuai dengan pengamatan di mana pada frekuensi tinggi akan mendekati nilai nol. Disamping itu pula, diketahui adanya fenomena fotolistrik yang merupakan proses penyerapan energi EM dan emisi elektron pada logam. Kedua fenomena ini dapat dijelaskan jika gelombang elektromagnetik tidak merupakan sebuah gelombang, melainkan cahaya merupakan kumpulan paket gelombang (*wavepacket*) yang memiliki energi yang sebanding dengan frekuensinya. Planck

menyatakan bahwa gelombang EM atau cahaya dapat bersifat seperti partikel dengan momentum,

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (16.1)$$

di mana λ dan h adalah panjang gelombang cahaya dan konstanta Planck.

Bahas efek Compton di sini.

Di samping gelombang, partikel pada abad itu, sebagai contohnya adalah elektron dan proton, merupakan suatu kuantitas yang bisa dianggap diskrit (atau menempati ruang yang terbatas). Partikel mempunyai massa dan momentum.

Atas usulan de Broglie, melihat analogi bahwa jika cahaya dapat bersifat partikel, maka ada kemungkinan bahwa partikel juga bisa bersifat gelombang dengan panjang gelombang de Broglie $\lambda_{\text{de Broglie}}$ adalah

$$\lambda_{\text{de Broglie}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (16.2)$$

di mana $p = mv$ adalah momentum partikel tersebut.

Kita bisa perhatikan bahwa persamaan (16.1) dan (16.2) merupakan persamaan yang sama tetapi untuk hal yang berbeda.

Davidson Germer eksperimen, difraksi elektron.

Jadi pergerakan partikel pada ruang harus juga berupa fungsi gelombang dan harus menyelesaikan persamaan gelombang. Persamaan gelombang disini adalah persamaan Schrödinger.

Untuk memformulasikan persamaan gelombang, kita perlu mengenal energi sistem klasik terlebih dahulu yang tertuang pada Hamiltonian sistem tersebut. Hamiltonian merupakan cara formulasi dinamika sistem yang menggunakan konsep energi sebagai basis formulasinya. Ini berbeda dari mekanika Newton yang menggunakan konsep gaya. Jika Hamiltonian tidak tergantung pada waktu dan tidak ada gesekan atau gaya nonkonservatif maka Hamiltonian merupakan penjumlahan energi kinetik dan energi potensial atau $H(p, q) = T + V$. Perlu diingat bahwa Hamiltonian merupakan fungsi dari posisi (q) dan momentum (p). Jadi dalam formulasinya, semua variabel harus diubah menjadi fungsi ruang dan momentum. Formulasi Hamilton ini masih merupakan formulasi klasik, belum mempunyai sifat gelombang. Bagaimana mengubah Hamiltonian menjadi persamaan kuantum? Satu yang menjembatani antara mekanika klasik dan kuantum

adalah operator. Semua variabel dan operasi pada mekanika kuantum harus berupa operator.

Jika kita sudah mengetahui Hamiltonian sebagai fungsi posisi dan momentum, kita dapat mengubah Hamiltonian menjadi operator Hamiltonian dengan melakukan substitusi/penggantian sebagai berikut (untuk representasi posisi/ruang)

Variabel klasik \rightarrow Operator

$$\begin{aligned} q &\rightarrow \hat{q} \\ \mathbf{p} &\rightarrow \hat{\mathbf{p}} \equiv -i\hbar\nabla \end{aligned} \quad (16.3)$$

Kita perhatikan penggunaan tanda topi $\hat{}$ pada setiap operator untuk membedakan dengan variabel lain seperti contohnya operator posisi \hat{q} dan momentum $\hat{\mathbf{p}}$. \hbar adalah konstanta Planck dibagi dengan 2π , $\hbar = h/2\pi$.

Sebagai contoh sebuah partikel bebas memiliki Hamiltonian

$$H(p) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (16.4)$$

Setelah melakukan substitusi $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ kita mendapatkan

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (16.5)$$

Perlu diingat bahwa $\hat{p}^2 = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$, jadi dua operator $\hat{\mathbf{p}}$ dioperasikan secara berurutan.

Operator-operator yang digunakan untuk formulasi kuantum harus memiliki sifat **linier** dan **hermitian**. Sifat linier yaitu memenuhi operasi berikut ini.

$$\hat{G}(c_1\Psi + c_2\Phi) = c_1\hat{G}\Psi + c_2\hat{G}\Phi \quad (16.6)$$

untuk sembarang fungsi gelombang Ψ dan Φ dan konstanta c_1 dan c_2 .

Sedangkan operator sifat hermitian berarti,

$$\int \Psi^*(q, t)\hat{G}\Phi(q, t)d\tau = \int \Phi(q, t)(\hat{G}\Psi(q, t))^*d\tau \quad (16.7)$$

Sekarang kita sudah mengetahui dinamika partikel yang direpresentasikan oleh sebuah operator Hamiltonian yang linear dan hermitian.

Seperti disebutkannya sebelumnya bahwa partikel direpresentasi pada ruang dengan sebuah fungsi gelombang, yang kita akan beri notasi $\Psi(q, t)$. Bagaimana fungsi gelombang ini $\Psi(q, t)$ merambat atau berevolusi. Disinilah persamaan Schrödinger diperlukan yang dituliskan sebagai berikut.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(q, t) \quad (16.8)$$

Di sebelah kanan Persamaan (16.8) merupakan operator energi karena berasal dari Hamiltonian (??) dan di sebelah kiri juga merupakan operator energi yaitu $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.

Dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger, kita akan mendapatkan energi dari partikel itu dan fungsi gelombangnya. Di samping fungsi gelombang harus merupakan solusi Persamaan (16.8), fungsi gelombang *Psi* juga harus bersifat *twice differentiable* dan *square integrable* yaitu integral $\int \Psi^* \Psi d\tau$ harus *finite*. Semua fungsi-fungsi gelombang yang merupakan solusi persamaan Schrödinger menjadi satu set fungsi yang orthogonal ...need to be completed.

Jika operator Hamiltonian \hat{H} tidak tergantung pada (atau independen terhadap) waktu, maka fungsi gelombangnya bersifat stationer sehingga kita dapat memisahkan persamaan untuk variabel ruang dan waktu. Dengan menggunakan $\Psi(q, t) = \psi(q) \exp(-iEt/\hbar)$, kita kemudian dapat memperoleh persamaan Schrödinger yang independen terhadap waktu yaitu,

$$E\Psi(q, t) = \hat{H}\Psi(q, t) \quad (16.9)$$

Ini merupakan persamaan eigen. Dengan menyelesaikan persamaan ini kita memperoleh nilai eigen atau tingkatan energi atau energi karakteristik dari sistem tersebut.

Sekarang pertanyaannya, setelah kita mengetahui fungsi gelombang dan nilai energinya, bagaimana dengan posisi partikel, bagaimana mendapatkannya?

Salah satu postulat mekanika kuantum adalah (Teorema ?), kita tidak dapat menentukan secara pasti posisi partikel, tetapi kita dapat mengetahui probabilitas partikel berada pada volume element tertentu. Probabilitas partikel adalah

$$P(q, t) = \Psi^*(q, t)\Psi(q, t)d\tau = |\Psi(q, t)|^2 d\tau \quad (16.10)$$

Kuantitas $|\Psi(q, t)|^2$ disebut dengan kerapatan probabilitas (*probability density*). Untuk kasus fungsi gelombang yang stationer, kerapatan

probabilitas $|\psi(q)|^2$ sama dengan $|\Psi(q, t)|^2$.

Selain probabilitas menemukan partikel, kita juga dapat menghitung nilai rata-rata atau nilai ekspektasi (*expectation value*) untuk suatu variabel dinamik (contohnya operator \hat{G} dengan menghitung,

$$\begin{aligned}\langle \hat{G} \rangle &= \frac{\int \Psi^*(q, t) \hat{G} \Psi(q, t) d\tau}{\int \Psi^*(q, t) \Psi(q, t) d\tau} \\ &= \frac{\langle \Psi | \hat{G} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}\end{aligned}\quad (16.11)$$

Kita menggunakan notasi Dirac atau *bracket* yaitu

$$\langle \Psi | \hat{G} | \Phi \rangle = \int \Psi^*(q, t) \hat{G} \Phi(q, t) d\tau \quad (16.12)$$

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int \Psi^*(q, t) \Phi(q, t) d\tau \quad (16.13)$$

Untuk operator hermitian, nilai ekspektasi selalu bernilai riil atau nyata. Ini yang mendasari bahwa operator untuk variabel fisis harus berupa operator hermitian.

Bagian pembagi pada Persamaan (16.11), $\langle \Psi | \Psi \rangle$ merupakan pembagi untuk normalisasi karena probabilitas selalu satu untuk menemukan partikel untuk seluruh ruang.

16.1 Aplikasi

Pada bagian ini kita akan menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk beberapa sistem yang sering ditemukan di buku ini.

16.1.1 Partikel Pada Sumur Potensial Kotak 1D

Untuk kasus pertama kita mempelajari sebuah partikel pada ruang satu dimensi pada sumur potensial kotak. Potensial untuk sistem ini adalah $V = 0$ untuk $0 < x < L$ dan $V = \infty$ untuk $x < 0$ dan $x > L$. Pada daerah yang memiliki potensial tinggi ∞ , fungsi gelombangnya adalah nol, $\psi = 0$ atau partikel tidak berada di tempat ini.

Pada daerah $0 < x < L$, partikel bebas bergerak. Hamiltonian untuk partikel bebas adalah

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (16.14)$$

Persamaan Schrödinger yang kita akan selesaikan untuk mendapatkan nilai eigen atau tingkat energi menjadi,

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) &= E\psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= E\psi(x) \end{aligned} \quad (16.15)$$

atau

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (16.16)$$

di mana $k^2 = 2mE/\hbar^2$ atau $k = \pm\sqrt{2mE/\hbar^2}$.
Solusi persamaan diferensial ini berbentuk,

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (16.17)$$

dengan konstanta A dan B yang ditentukan sesuai dengan kondisi batas pada sistem.

Pada sistem dengan sumur potensial kotak, mempunyai kondisi batas yaitu $\psi(x=0) = 0$ dan $\psi(x=L) = 0$. Dengan menggunakan dua kondisi batas ini, kita memperoleh,

$$\psi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = 0 \rightarrow B = 0 \quad (16.18)$$

$$\psi(L) = A \sin(kL) + B \cos(kL) = 0 \rightarrow A \sin(kL) = 0 \quad (16.19)$$

Kita perhatikan bahwa kondisi kedua, persamaan (16.19) menyatakan supaya solusinya tidak trivial $A = 0$ maka $\sin(kL) = 0$. Jadi kita harus mendapatkan solusi persamaan ini. Ini menyatakan tidak semua k bisa menjadi solusi $\sin(kL) = 0$. Atau dengan kata lain solusi persamaan Schrödinger tidak dengan energi yang kontinu tetapi diskrit. Nilai k yang memenuhi syarat jika kL adalah kelipatan π . Jadi $kL = n\pi$. Energi yang menjadi solusinya adalah

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = n^2\pi^2/L^2 E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{n^2h^2}{8mL^2} \quad (16.20)$$

Nilai koefisien A diperoleh dengan ketentuan bahwa total probabilitas seluruh ruang adalah 1, kita dapat memperoleh,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx &= A^2 \int_0^L \sin^2(n\pi x/L)dx \\ &= A^2 \left[\frac{2n\pi x - L \sin(2n\pi x/L)}{4n\pi} \right]_0^L = A^2 \frac{L}{2} = 1 \\ A &= \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned} \quad (16.21)$$

Persamaan gelombang yang dihasilkan setelah normalisasi adalah

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (16.22)$$

Fungsi-fungsi gelombang ψ_n merupakan kumpulan fungsi gelombang yang ortogonal, dengan kata lain

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin(m\pi x/L) \sin(n\pi x/L)dx = 0 \quad (16.23)$$

atau menggunakan variabel baru $\theta = \pi x/L$ dan $d\theta = (\pi/L)dx$,

$$\begin{aligned} \frac{2}{L} \int_0^L \sin(m\pi x/L) \sin(n\pi x/L)dx &= \frac{2}{L} \frac{L}{\pi} \int_0^\pi \sin(m\theta) \sin(n\theta)d\theta \\ &= \frac{2}{\pi} \left[\frac{\sin(n-m)\theta}{2(n-m)} - \frac{\sin(n+m)\theta}{2(n+m)} \right]_0^\pi \\ &= 0 \text{ jika } m \neq n \end{aligned} \quad (16.24)$$

16.1.2 Partikel di Sumur Potensial Kotak 3D

Untuk kasus kedua ini, partikel berada pada ruang tiga dimensi sumur potensial kotak. Potensial untuk sistem ini adalah

$$V = 0 \text{ jika } \begin{cases} 0 < x < L_x \\ 0 < y < L_y \\ 0 < z < L_z \end{cases} \quad (16.25)$$

dan $V = \infty$ untuk daerah lainnya.

Seperti sebelumnya, fungsi gelombangnya adalah nol pada daerah yang memiliki potensial tinggi ∞ . Hamiltonian untuk sistem ini adalah

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \quad (16.26)$$

Persamaan Schrödinger yang kita akan selesaikan untuk mendapatkan nilai eigen, tingkat energi menjadi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (16.27)$$

Dengan menggunakan teknik separasi variabel, kita mengumpamakan solusi persamaan diatas adalah $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$.

Setelah substitusi dan melakukan manipulasi kita dapat memperoleh,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\psi_x} \frac{d^2\psi_x}{dx^2} + \frac{1}{\psi_y} \frac{d^2\psi_y}{dy^2} + \frac{1}{\psi_z} \frac{d^2\psi_z}{dz^2} \right] = E \quad (16.28)$$

Kita perhatikan bahwa setiap bagian pada sisi kiri persamaan di atas, mempunyai variabel ruang yang berbeda. Jadi perubahan pada variabel independen tidak mempengaruhi nilainya jadi kita dapat simpulkan setiap bagian haruslah sama dengan sebuah konstanta.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\psi_x} \frac{d^2\psi_x}{dx^2} \right] = E_x \quad (16.29)$$

Begitu pula untuk ψ_y dan ψ_z . Jadi energi sistem menjadi $E = E_x + E_y + E_z$.

Solusi persamaan diferensial () merupakan solusi untuk satu dimensi,

Energi yang menjadi solusinya adalah

$$E_{x,n_x} = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} = \frac{n_x^2 h^2}{8mL_x^2} \quad (16.30)$$

Persamaan gelombang yang dihasilkan setelah normalisasi adalah

$$\psi_{xi}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \quad (16.31)$$

dengan cara yang sama, kita memperoleh solusi untuk ψ_y dan ψ_z . Jadi solusi untuk tiga dimensinya adalah

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y n_z} &= E_{x, n_x} + E_{y, n_y} + E_{z, n_z} \\ &= \frac{h^2}{8m} \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right] \end{aligned} \quad (16.32)$$

dan fungsi gelombangnya

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \quad (16.33)$$

jika $L_x = L_y = L_z = L$, energinya menjadi

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} [n_x^2 + n_y^2 + n_z^2] \quad (16.34)$$

Jika kita perhatikan, persamaan di atas, nilai tingkat energi dapat bernilai sama untuk beberapa tingkat energi. Sebagai contoh, tingkat energi $(2, 1, 0)$, $(2, 0, 1)$, $(1, 0, 2)$, $(0, 1, 2)$, $(0, 2, 1)$, dan $(1, 2, 0)$ memiliki energi $E = 6h^2/(8mL^2)$. Keadaan tingkat energi yang energinya sama dinamakan degenerasi.

16.2 Osilator Harmonik

Sistem osilator harmonik banyak digunakan diberbagai situasi, terutama untuk sistem yang berkaitan dengan vibrasi molekul atau atom. Karena sumur potensial, pada posisit sekitar titik minimum dapat di-dekati dengan sebuah fungsi kuadrat.

Sebuah partikel yang bermassa m berada pada sumur potensial satu dimensi yang berbentuk,

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad (16.35)$$

Energi sistem ini adalah

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (16.36)$$

Untuk sistem kuantumnya, Hamiltoniannya berbentuk,

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (16.37)$$

Persamaan Schrödingernya adalah

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (16.38)$$

atau

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{km}{\hbar^2}x^2\psi(x) - E\frac{2m}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (16.39)$$

Ini adalah persamaan diferensial Hermite. dan solusinya adalah

$$\psi_n = A_n H_n(y) \exp(-y^2/2) \quad (16.40)$$

dan tingkat energinya adalah

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (16.41)$$

di mana $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

16.3 Rigid Rotator

Untuk molecul dengan dua atom, energi yang terkandung dapat berupa energi rotasi. Di bagian ini kita akan mempelajari, sistem dua atom/ molekul yang rigid (kaku), atau dengan artian jarak antara kedua atom tidak berubah.

Gambar dua molekul.

Jika kita ambil pusat massa sebagai titik referensi untuk koordinat, maka energi rotasinya untuk kecepatan angular ω adalah

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}m_1\omega^2r_1^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2r_2^2 \\ &= \frac{1}{2}(m_1r_1^2 + m_2r_2^2) \\ &= \frac{1}{2}I\omega^2 \end{aligned} \quad (16.42)$$

Momentum angular untuk sistem ini adalah

$$\mathbf{L} = I\omega \quad (16.43)$$

Jadi kita memperoleh,

$$T = \frac{1}{2I}(I\omega)^2 = \frac{1}{2I}L^2 \quad (16.44)$$

Untuk mengubah ke bentuk operator Hamiltonian, kita menggunakan operator momentum,

$$\hat{L} \equiv \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (16.45)$$

Untuk potensial eksternal yang konstan dan diabaikan, persamaan Schrödinger menjadi,

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi \\ \frac{1}{2I}\hat{L}^2\psi &= E\psi \end{aligned} \quad (16.46)$$

Jika kita mengubah variabel dan sistem koordinat ke koordinat bola, persamaan Schrödinger menjadi,

$$\frac{-\hbar^2}{2I}\hat{L}^2\psi(\theta, \phi) = E\psi(\theta, \phi) \quad (16.47)$$

menjadi persamaan diferensial,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + l(l+1)\psi = 0 \quad (16.48)$$

Solusi persamaan ini adalah berupa fungsi "spherical harmonics",

$$\psi_{l,m}(\theta, \phi) = Y_{l,m}(\theta, \phi) = AP_l^{|m|}(\theta) \exp(im\phi) \quad (16.49)$$

yang mana A adalah factor normalisasi, $P_l^{|m|}(\theta)$ adalah "associated Legendre polynomial". Energi rotasinya adalah

$$E_J = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I} \quad (16.50)$$

ada $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm J$, $J(J+1)$ dengan tingkat energi yang sama.

17

Statistika Kuantum

Bab ini, kita akan mempelajari fisika statistik dengan menggunakan mekanika kuantum. Kita membahas tentang probabilitas dari awal dengan menggunakan penjelasan tentang kuantum yang diberikan pada bab sebelumnya.

Pada saat ini, teori yang dapat menjelaskan hampir semua fenomena alam adalah mekanika kuantum. Jadi semua sistem harus mematuhi mekanika kuantum. Begitu pula dalam formulasi fisika statistik, kita harus memulai dengan mekanika kuantum.

Jelaskan untuk Pure state terlebih dahulu.

Setiap keadaan mikro suatu sistem dengan energi tertentu diberikan oleh fungsi gelombang seperti dijelaskan pada bab sebelumnya. Pada setiap keadaan pada waktu instantaneus, untuk sistem yang terisolasi atau pure, kita dapat menguraikan fungsi gelombang $\Psi(r, t)$ menjadi sebuah kombinasi linier fungsi-fungsi ortogonal (lihat bab sebelumnya).

$$\Psi(r, t) = \sum_n c_n(t) \psi(r) \quad (17.1)$$

Di sini kita menganggap bahwa $\psi(r)$ tidak tergantung pada waktu atau merupakan fungsi gelombang stationer. Indeks n adalah bilangan kuantum. Perlu diingat bahwa kuadrat modulus koefisien $|c_n|^2 = c_n c_n^*$ merupakan probabilitas menemukan sistem berada pada tingkat energi n , bilangan kuantum n .

Agar mempermudah penjelasan dan penulisan, kita akan membahas terlebih dahulu sistem yang terdiri dari satu partikel dan memiliki dua tingkatan energi. Fungsi gelombang untuk tingkat energi diberikan oleh, dengan menggunakan notasi Dirac, $|1\rangle$ dan $|2\rangle$.

Gambar.

Sebuah keadaan dapat merupakan superposisi dari kedua tingkatan energi ini atau merupakan kombinasi linier,

$$\Psi(t) = c_1(t)|1\rangle c_2(t)|2\rangle \quad (17.2)$$

dan ingat kembali bahwa, probabilitas pada keadaan $|1\rangle$ dan $|2\rangle$ adalah $|c_1|^2$ dan $|c_2|^2$.

Fungsi gelombang Ψ dapat dituliskan dalam bentuk bra dan ket yaitu,

$$\langle\Psi| = [c_1^* \quad c_2^*] \quad (17.3)$$

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (17.4)$$

Perlu diingat bahwa

$$c_i = \langle\Psi|i\rangle \quad (17.5)$$

$$c_i^* = \langle i|\Psi\rangle \quad (17.6)$$

Nilai ekspektasi untuk sebuah observabel \hat{O} adalah

$$\langle O \rangle = \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle = [c_1^* \quad c_2^*] \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (17.7)$$

di mana matriks elemen $O_{i,j} = \langle i|\hat{O}|j\rangle$.
dan bisa dijabarkan menjadi

$$\langle O \rangle = c_1 c_1^* O_{11} + c_1 c_2^* O_{12} + c_2 c_1^* O_{21} + c_2 c_2^* O_{22} \quad (17.8)$$

Bagian $c_i c_j^*$ dapat dibentuk dengan mengalikan secara outer matriks $|\Psi\rangle$ dengan $\langle\Psi|$ yaitu matriks densitas atau operator densitas $|\Psi\rangle\langle\Psi|$.

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{bmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{bmatrix} \quad (17.9)$$

perkalian matriks densitas dan matriks O , menghasilkan

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{O} &= \begin{bmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} c_1 c_1^* O_{11} + c_1 c_2^* O_{21} & c_1 c_1^* O_{12} + c_1 c_2^* O_{22} \\ c_2 c_1^* O_{11} + c_2 c_2^* O_{21} & c_2 c_1^* O_{12} + c_2 c_2^* O_{22} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (17.10)$$

Jika kita perhatikan bagian diagonal, kita dapat menyimpulkan bahwa jumlah diagonalnya atau $Tr\{\}$ merupakan nilai ekspektasi.

$$\langle O \rangle = Tr\{\rho\hat{O}\} \quad (17.11)$$

Dengan menggunakan matriks $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, nilai ekspektasi operator \hat{O} adalah

$$\langle O \rangle = Tr\{c_1c_1^*O_{11} + c_1c_2^*O_{12} + c_2c_1^*O_{21} + c_2c_2^*O_{22}\} \quad (17.12)$$

Kita mengikuti penurunan rumus dari Buku Kuantum Bransden
Nilai ekspektasi suatu operator \hat{O} untuk suatu keadaan $|m\rangle$ adalah

$$\langle O \rangle_m = \langle m|\hat{O}|m\rangle \quad (17.13)$$

Dengan menggunakan ekspansi $|m\rangle$ ke ortonormal basis $|n\rangle$, kita memperoleh

$$\langle O \rangle_m = \sum_n \sum_{n'} c_{n'}^{(m)*} c_n^{(m)} \langle n'|\hat{O}|n\rangle \quad (17.14)$$

di mana $c_n^{(m)} = \langle n|m\rangle$ adalah koefisien ekspansi.

Sebelumnya sudah disebut kan bahwa nilai rata-rata ekspektasi merupakan nilai yang dihasilkan dalam eksperimen merupakan jumlah dari probabilitas sistem dalam keadaan tertentu dikalikan dengan nilai ekspektasi keadaan tersebut atau merupakan nilai rata-rata ensemble. tentunya nilai probabilitas memenuhi syarat-syarat probabilitas yang sudah dijelaskan pada bab II.

$$\langle O \rangle = \sum_{m=1}^N W_m \langle m|\hat{O}|m\rangle \quad (17.15)$$

$$\langle O \rangle = \sum_{m=1}^N \sum_n \sum_{n'} \langle n|m\rangle W_m \langle m|n\rangle \langle n'|\hat{O}|n\rangle \quad (17.16)$$

Seperti sebelumnya kita definisikan operator densitas

$$\hat{\rho} = \sum_{m=1}^N |m\rangle W_m \langle m| \quad (17.17)$$

Dalam bentuk matrik dengan basis $|n\rangle$ adalah

$$\begin{aligned}
 \rho_{nn'} &= \langle n' | \hat{\rho} | n \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^N \langle n' | m \rangle W_m \langle m | n \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^N W_m c_{n'}^{(m)*} c_n^{(m)}
 \end{aligned} \tag{17.18}$$

Nilai ekspektasi dapat diluliskan jika operator $\hat{\rho}$ sudah diketahui.

$$\begin{aligned}
 \langle O \rangle &= \sum_{m=1}^N \sum_n \sum_{n'} \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle \langle n' | \hat{O} | n \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^N \sum_n \langle n | \hat{\rho} \hat{O} | n \rangle \\
 &= Tr \{ \hat{\rho} \hat{O} \}
 \end{aligned} \tag{17.19}$$

Dengan mengetahui matriks densitas $\hat{\rho}$, kita dapat menghitung nilai rata-rata ensemble.

Sifat-sifat matriks densitas:

1. Jika
2. Nilai diagonal $\rho_{nn} = \langle n | \hat{\rho} | n \rangle =, \rho_{nn} \geq 0$ positif semidefinit
3. Hermitian $\langle n' | \hat{\rho} | n \rangle = \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle^*$

Sistem dalam kesetimbangan termal
kanonik kanonik kecil dan kanonik besar

Daftar Pustaka

17.1 Buku Referensi

Buku-buku tambahan yang dapat digunakan untuk memperdalam pemahaman konsep-konsep fisika statistik adalah sebagai berikut

- E. A. Jackson, (1968), *Equilibrium statistical mechanics*, Dover, New York. Buku ini telah menjadi awal penulisan buku ini.
- Harvey Gould and Jan Tobochnik, (2010), *Thermal and Statistical Physics*, dapat diunduh di <http://stp.clarku.edu/notes> atau <http://www.compadre.org/portal/index.cfm>. Buku ini sangat bagus untuk tingkat sarjana tentang termodinamika dan fisika statistik. Banyak pula menampilkan hasil simulasi.
- W. Greiner, L. Neise, dan H. Stöker, (1995), *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Springer, New York. Buku ini menjelaskan secara lengkap dan detail tentang termodinamika dan mekanika statistik.
- J.H. Noggle, (1996), *Physical Chemistry*, Ed. ketiga, Harper collins, New York. Buku Kimia Fisika ini memberikan penjelasan sederhana tentang termodinamika dan fisika statistik.
- F. Rief, (1965), *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill, New York. Buku ini sudah tergolong cukup tua tetapi masih sering digunakan untuk mengajar fisika statistik.
- T. L. Hill, (1986), *An introduction to statistical thermodynamics*, Dover, New York.
- Sethna, *Order Parameters*. Buku ini sangat menarik untuk dibaca, yang memberikan fisika statistik yang terbaru, tetapi untuk tingkat sarjana (S1) buku ini cukup *demanding* untuk dibaca. Buku ini dapat diunduh di <http://www.lassp.cornell.edu/sethna/orderparameters/intro.html>.

Daftar Pustaka

1. E. A. Jackson, (1968), *Equilibrium statistical mechanics*, Dover, New York.

2. E.F. Haeussler, Jr., R.S. Paul, dan R.J. Wood (2005), *Introductory mathematical analysis for business, economics, and the life and social sciences*, 11th, Prentice-Hall, New Jersey.
 3. R.A. Barnett, M.R. Ziegler, dan K.E. Byleen, (2005), *Finite mathematics for business, economics, life sciences, and social sciences*, 10th, Prentice Hall, New Jersey.
 4. D.S. Betts dan R.E. Turner, (1992), *Introductory statistical mechanics*, Addison-Wesley, Wokingham.
 5. A. Katz, (1967), *Principles of statistical mechanics: the information theory approach*, W.H. Freeman and Co, san Francisco.
 6. W. Greiner, L. Neise, dan H. Stöker, (1995), *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Springer, New York.
-



Konstanta dan Konversi Penting

B

Integral Gaussian

Integral yang berbentuk,

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^m \exp(-\alpha x^2) dx \quad (\text{B.1})$$

sering dijumpai dalam kuliah ini, terutama untuk mendapatkan sifat-sifat sistem gas ideal.

Jika pangkat genap ($m = 2n$),

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} \exp(-\alpha x^2) dx &= 2 \int_0^{\infty} x^{2n} \exp(-\alpha x^2) dx \\ &= 2 \times [\text{Lihat dibawah ini}] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

$$\int_0^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (\text{B.3})$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{(2n)! \pi^{1/2}}{2^{2n+1} n! \alpha^{n+1/2}} \quad (\text{B.4})$$

Jika pangkat ganjil ($m = 2n + 1$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n+1} \exp(-\alpha x^2) dx = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\int_0^{\infty} x \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{1}{2\alpha} \quad (\text{B.6})$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}} \quad (\text{B.7})$$