Ajánlott irodalom: Kubo: Statisztikus mechanika

Boltzmann nevéhez köthető a statisztikus fizika kialakulása

Klasszikus mechanikai leírás

$(q_1, \dots q_f, p_1, \dots p_f)$ $\quad 2f = 6N$

f – szabadsági fokok $\quad$ N db részecske

q_i – koordináták $\quad$ tipikusan $N \sim 10^{23}$

p_i – impulzusok

$A \rightarrow$ mechanikai mennyiség

$$A(q_1(t) \dots q_f(t), p_1(t) \dots p_f(t)) = A(t)$$

$$\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(t)\, dt = \overline{A}_t$$ A időbeli átlaga

mennyi ideig kell átlagolni?

hogy függ $\overline{A}_t$ a kezdeti feltételektől?

ergodikus hipotézis: tipikus rendszerek esetén a makroszkopikus viselkedésre nincs hatással a kezdeti feltétel (elhanyagolható)

$$S(q_1, \dots q_f, p_1, \dots, p_f)\, d^f q\, d^f p$$

sűrűségfv., mely megmondja, hogy $(q_1, \dots q_f, p_1, \dots p_f)$ $d^f q\, d^f p$ környezetében milyen valószínűséggel találjuk a rendszert

$$\int A(q_1 \dots q_f, p_1 \dots p_f)\, S(q_1 \dots q_f, p_1 \dots p_f)\, d^f p\, d^f q = \overline{A}$$

ergodikus hipotézis ⇒ fázistérbeli és időbeli átlag egyezik (az ergodikus rendszerek esetén)

$$\boxed{\overline{A} = \overline{A}_t}$$

$$E = \mathcal{H}(q_{1,} \cdots q_{f,} p_{1,} \cdots p_f)$$

↑ Hamilton-fv.

$E, \exists, P, Q, N, \ldots$ megmaradó mennyiségek megadják, hogy a fázistérben mely pontokat érhet el a rendszer

ergodikus rendszernél tetszőleges pontot a fázistérben tetszőlegesen meg tud közelíteni a rendszer

Nagy rendszereknél ez akkor igaz, ha kaotikus!

Kvantummechanikai leírás

ℓ. állapot : E_ℓ $\varphi_\ell(x_{1,} \cdots x_f)$ $A(x_{1,} \cdots, x_f)$

hullámfv.

$$A_\ell = \langle \ell | A | \ell \rangle = \int d^f x \; \varphi_\ell^* A \varphi$$

(Természetesen klasszikusan is köthetem az átlagot az energiához. $\overline{A}(E)$)

$$\sum_e p_e A_e = \overline{A}$$

p_e: e. állapot valószínűsége

Kvantumosan: p_e

Klasszikusan: $\varrho(q,p)$

} értékeket kell ismerni az átlaghoz

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i U(r_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V(r_i, r_j)$$

↑ Descartes-koordinátákban

↑ kölcsönhatás

(Kvantummechanikában nem kvantálhatunk általános koordináták szerint. $\hat{q} \neq q$ $\hat{p} \neq i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$)

Nem triviális, hogy a kölcsönhatás csak két koordinátától függ

$\hat{\mathcal{H}}$

Hány állapota van a rendszernek, mely $(E, E+\delta E)$-be esik? $E < E_e < E+\delta E$

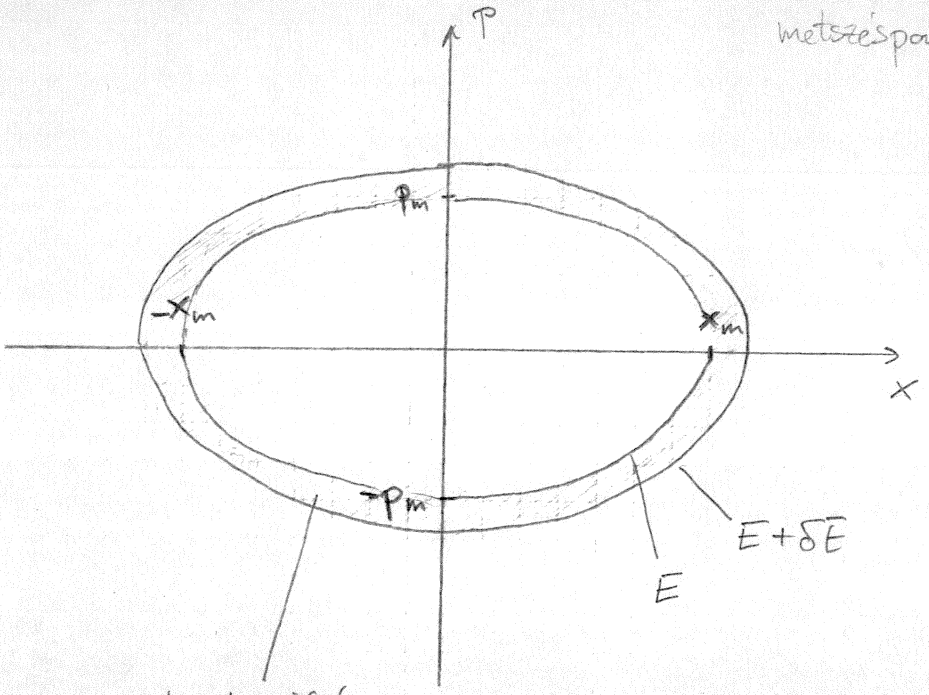
$\Rightarrow W(E, \delta E)$ mondja ezt meg.

$$E < \mathcal{H}(q,p) < E + \delta E$$

Nézzük meg ezt egy lineáris, harmonikus oszcillátornál:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$E = H(x,p)$$



metszéspontok: $E = \frac{p^2}{2m}$

$E = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$\Downarrow$

$p_m = \sqrt{2mE}$

$x_m = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

A terület:

$$\pi\left[\sqrt{2m(E+\delta E)}\sqrt{\frac{2m(E+\delta E)}{m\omega^2}} - \sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\right] =$$

$$= \pi\left[\frac{2(E+\delta E)}{\omega} - \frac{2E}{\omega}\right] = \frac{2\pi\delta E}{\omega}$$

$$\hbar\omega\left(\ell+\tfrac{1}{2}\right) = E_\ell$$

$$E < E_\ell < E+\delta E$$

$$E < \hbar\omega\left(\ell+\tfrac{1}{2}\right) < E+\delta E$$

$$\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} < \ell < \frac{E+\delta E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

$E \to \infty$ eset érdekel

Állapotok száma így a két határ különbsége: $\frac{\delta E}{\hbar\omega} = \frac{2\pi\delta E}{h\omega}$

Általános szabály: $d\Gamma = dx_1\, dx_2 \ldots dx_f\, dp_1\, dp_2 \ldots dp_f$

bevezetésével

$$\frac{1}{N!}\frac{1}{h^f}\int_{E<\mathcal{H}(q,p)<E+\delta E} d\Gamma = W(E,\delta E)$$

klasszikus mennyiség, és mégis szerepel a h, mely dimenziótlanítja is egyben

kvantumosan az azonos részecskék felcserélhetőek (így N azonos részecske esetén még osztani kell $N!$-sal)

II. 16.

$$W(E,\delta E,\dots) = \sum_{E<E_i<E+\delta E} 1$$

$$W(E,\delta E) = \frac{1}{h^f N!}\int_{E<\mathcal{H}(q,p)<E+\delta E} d\Gamma$$

$2f = 6N$

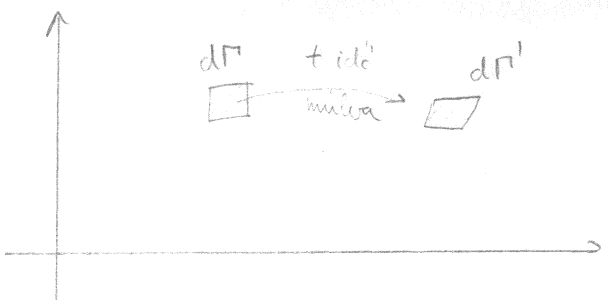
$f = 3N$

$N = N_A + N_B$

$\rightarrow \left(N_A!\, N_B!\right.$ ha van A és B különböző részecske$\left.\right)$

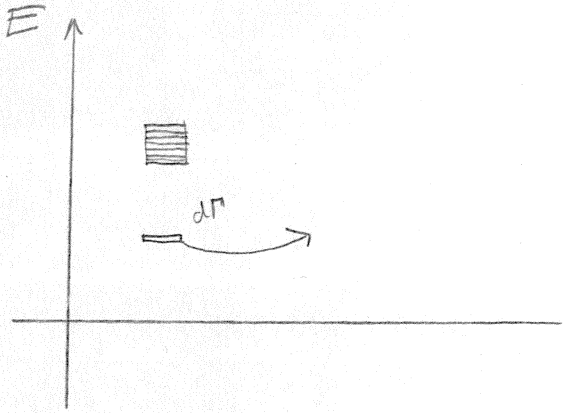
ergod tétel $\Rightarrow$ megkötések (E, $\exists$, P, ...stb.) mellett az összes megengedett állapotát azonos valószínűséggel veszi fel.

Liouville-tétel: fázistérben a térfogat megmarad

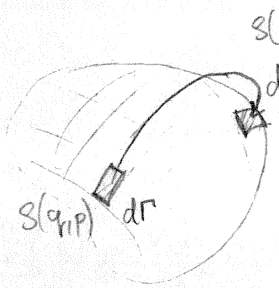


$d\Gamma = d\Gamma'$

energia koordinátával (energia megmarad)



⇒ az energiaskálán, és a többi megmaradó mennyiség skáláin, is igaznak kell lennie a Liouville-tételnek



$$\left.\begin{aligned} \varrho(q,p)\,d\Gamma &= \varrho(q',p')\,d\Gamma' \\ d\Gamma &= d\Gamma' \end{aligned}\right\} \Rightarrow \varrho(q,p) = \varrho(q',p')$$

A valószínűségek azonosak

$$P_e = \frac{1}{\sum_{E<E_e<E+\delta E} 1} = \frac{1}{W(E,\delta E,\dots)}, \quad P_e = 0 \begin{cases} \text{ha } E_e > E+\delta E \\ \text{ha } E_e < E \end{cases}$$

↑ valószínűség azokra az állapotokra, melyekre $E < E_e < E+\delta E$

δE miért kell? pl. kvantummechanikai energia-idő határozatlanság + egyéb okokból is lehet

De δE majd mindig ki fog esni... illetve $\delta E \to 0$

$$\varrho(q,p) = \frac{1'}{W(E,\delta E)} \quad , \quad E < \mathcal{H}(q,p) < E + \delta E$$

$$\delta E \to 0 \quad \Rightarrow \quad \varrho(q,p) = \delta\left(E - \mathcal{H}(q,p)\right)$$

ismerjük a rendszer makroszkopikus állapotát $(E, V, N \ldots)$

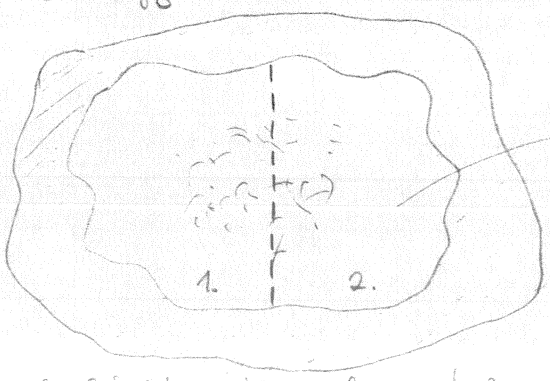
sokaság: azonos makroszkopikus állapot összes lehetséges mikroszkopikus állapota

időbeli átlag helyettesíthető a sokaságra vett átlaggal

↓

minden mikroszkopikus állapotnak ugyanaz a valószínűsége (ez a mikrokanonikus sokaság feltételezés)

Vegyünk egy zárt rendszert



Mik adottak?

pl. $V, Q, \mathcal{F}, E, N_A, N_B,$

(A és B típusú részecskék nem alakulnak át)

külvilágtól jól elszigetelve

A rendszert két részre vágom egy falial

⇒ ha a fal olyan, mint a külső elszigetelés, akkor

eredményképp két zárt rendszer lesz:

$V = V_1 + V_2$ $\quad$ V_1, V_2

$E = E_1 + E_2$ $\quad$ E_1, E_2 $\quad$ } konstansok

stb $\quad$ stb.

→ legyen ez egy olyan fal, mely csak az energiára áteresztő

E_1 és E_2 időben változó lesz, $E_1 + E_2 = E$

$$\Omega_0(E, \dots) := \sum_{E_i < E} 1$$ kvantumosan

↓

állapotok számát számolja le 0-tól E-ig

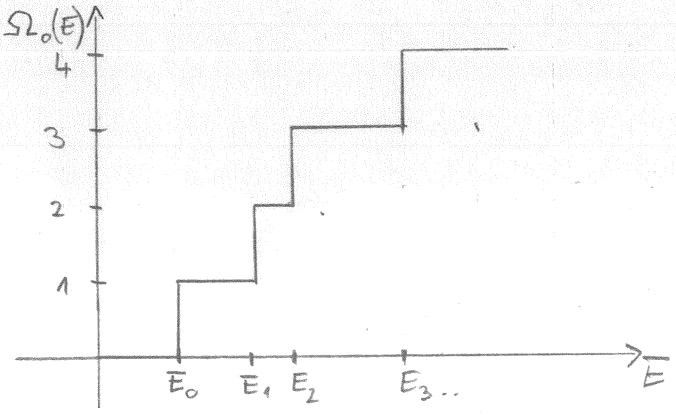
$$\Omega_0(E, \dots) = \frac{1}{h^f N!} \int_{\mathcal{H}(q,p) < E} d\Gamma$$ klasszikusan

$$\Omega(E, \dots) := \frac{d\Omega_0}{dE}$$

↑

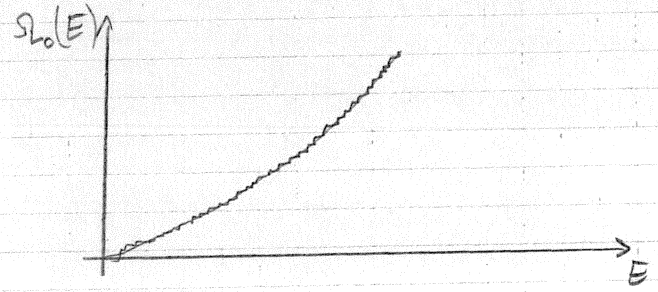
állapotsűrűség

$$W(E, \delta E, \dots) = \Omega_0(E + \delta E, \dots) - \Omega_0(E, \dots)$$



lépcsős fv.

Ha az állapotok sűrűn vannak (...messziről nézve)



sok esetben ilyenkor folytonos görbével számolhatunk

derivált, Ω természetesen tüskékből áll, de messziről nézve tekinthetjük a fenti görbe érintőjének.

Ekkor:

$$\Rightarrow W(E, \delta E) \approx \Omega(E, \dots)\, \delta E$$

1. rész állapotsűrűsége (nagy rendszer, Ω_1 sima)

$$\Omega_1(E_1)\, dE_1$$

2. rész állapotsűrűsége (nagy rendszer, Ω_2 sima)

$$\Omega_2(E_2)\, dE_2$$

$$\Omega(E)\, dE = \Omega_1(E_1)\, dE_1 \cdot \Omega_2(E_2)\, dE_2$$

$$E = E_1 + E_2$$

$$E_2 = E - E_1 \xrightarrow[\text{ha } E \text{ fix}]{} dE_2 = -dE_1$$

$$\Omega(E) = \int \Omega_1(E_1)\, \Omega_2(E - E_1)\, dE_1$$

$$dE\, \Omega(E) = dE \int \Omega_1(E_1)\, \Omega_2(E - E_1)\, dE_1$$ konvolúció

összeggel:

$$\Omega(E) = \sum_{E_1} \Omega_1(E_1)\, \Omega_2(E - E_1)$$

$$p(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1)\,\Omega_2(E-E_1)}{\Omega(E)}$$

annak a valószínűsége hogy a bal oldalon E_1 az energia

példák Ω-ra klasszikusan:

pl1.: ideális gázra $\Omega_0(E,V,N)$

$$H(q,p) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} \leq E$$

$$\Omega_0(E,V,N) = \frac{1}{h^{3N}N!} \int dq_1 \dots dq_{3N}\, dp_1 \dots dp_{3N}$$

q integrálás V^N-t fog

$$\Omega_0(E,V,N) = \frac{1}{h^{3N}N!} V^N \int_{\sum_i p_i^2 \leq 2mE} dp_1 \dots dp_{3N} =$$

$$= \frac{1}{h^{3N}N!} V^N \cdot \underbrace{(2mE)^{3N/2} \cdot C_{3N}}$$

N dimenziós gömb térfogata

(jövő órán levezetjük hogy is néz ki pontosa

pl2.: harmonikus oszillátorra

$$H(q,p) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x_i^2 \right) < E$$

itt egy 6N dimenziós ellipszoid térfogatát kell számolni

$$\Omega_0(E,V,N) = \frac{1}{h^{3N}N!}\int \prod_{i=1}^{3N} dx_i\,dp_i = \frac{1}{h^{3N}N!}\left(\frac{2E}{\omega_0}\right)^{3N} C_{6N}$$

$\uparrow$ $\sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0^2 x_i^2\right) \le E$

? azonos vagy nem azonos részecskék oszcillátorai?

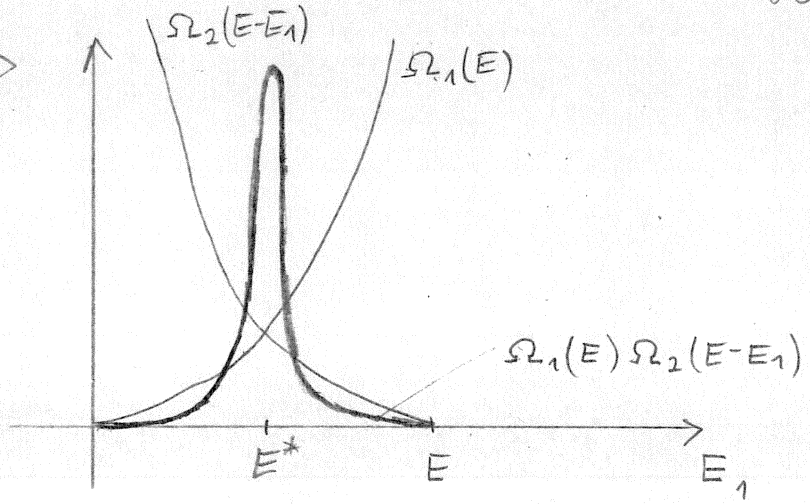
$\left.\begin{matrix}(2mE)^{1/2} \\ \left(\frac{2E}{m\omega_0^2}\right)^{1/2}\end{matrix}\right\}$ a tengelymetszetek

C_{6N}-t ismét következő órán

$\Omega_0(E,V,N) \sim E^{\text{hatalmas kitevő}}$ mindkét esetben

$\Rightarrow$ derivált is ilyen

$\Rightarrow$



keressük meg E^*-ot, ahol $\Omega_1(E)\Omega_2(E-E_1)$, azaz $p(E_1)$-nek maximuma van

A logaritmus maximumát is kereshetjük:

$$\left.\frac{d}{dE_1}\ln p(E_1)\right|_{E_1=E_1^*} = \frac{d}{dE_1}\left(\ln\Omega_1(E_1) + \ln\Omega_2(E-E_1)\right) =$$

($\uparrow$ ($\Omega(E)$-t elhagyjuk ... konstans szorzó)

$$= \frac{d}{dE_1}\ln\Omega_1(E_1^*) - \frac{d}{dE_2}\ln\Omega_2(E_2^*) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dE_1}\ln\Omega_1(E_1^*) = \frac{d}{dE_2}\ln\Omega_2(E_2^*)$$

Termodinamikában az energiaegyensúly feltétele

$$\boxed{T_1 = T_2}$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T} \quad \Rightarrow \quad \left.\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right|_{E_1^*} = \left.\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right|_{E_2^*} \qquad \text{ahol } E_1^* + E_2^* = E$$

Ez a két feltétel akkor igaz, ha:

$$\boxed{S \sim \ln \Omega(E)}$$

ideális gáznál: (A_N: állandó) $\Omega_0(E) = V^N E^{3N/2} A_N$

$$\ln \Omega_0 = \frac{3N}{2} \ln E + N \ln V + \ln A_N$$

$$\Omega(E) = \frac{3N}{2} E^{\frac{3N}{2}-1} V^N A_N$$

$$\ln \Omega(E) = \ln \frac{3N}{2} + \left(\frac{3N}{2} - 1\right) \ln E + N \ln V + \ln A$$

makroszkopikus testeknél ($N \sim 6 \cdot 10^{23}$)

$$\ln \Omega_0(E) \approx \ln \Omega(E) \overset{\uparrow}{\approx} \ln W(E, \delta E)$$

$$\ln W(E, \delta E) = \ln\left(\Omega(E)\delta E\right) = \ln \Omega(E) + \underbrace{\ln \delta E}_{\text{ez kicsi}}$$

történelmileg így vezették be az entrópiát:

$$S = \underbrace{?}_{\ldots} \ln W(E, \delta E)$$

$\ln \Omega_0(E)$

$\ln \Omega(E)$

Nézzük egy példánál, az ideális gáznál, hogy mi lesz a szorzófaktor:

$$\frac{d}{dE} \ln \Omega_0(E) = \frac{3N}{2} \cdot \frac{1}{E} = \frac{1}{k_B T}$$

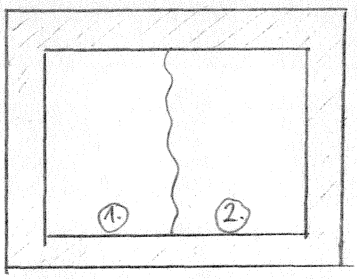
tudjuk:
$E = \frac{3}{2} N k_B T$

$$\Rightarrow \boxed{S = k_B \ln W(E, \delta E)} \Rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V,\ldots} = \frac{1}{T}$$

ez van Boltzmann sírján.

új óra

II. 21.



Az energia a továbbiakban is mindig átmegy a középső falon. Most nézzük meg azt is, hogy a részecskeszám is átmehet

$$N = N_1 + N_2$$
$$E = E_1 + E_2$$

$\Omega_1(E_1, N_1)\, \Omega_2(E_2, N_2)$ az összállapotok száma

$$f(E_1, N_1) = \frac{\Omega_1(E_1, N_1)\, \Omega_2(E - E_1, N - N_1)}{\Omega(E)}$$

keressük a maximumát

Múlt órán ideális gáznál eddig jutottunk:

$$\Omega = \frac{(2mE)^{\frac{3N}{2}} V^N}{h^{3N} N!} \cdot \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)}$$

gyakorlatról

logaritmus + deriválás

$\Rightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial N_1}\left[S_1(E_1,N_1) + S_2(E-E_1, N-N_1)\right] = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial E_1}\left[S_1(E_1,N_1) + S_2(E-E_1, N-N_1)\right] = 0$$

$\Rightarrow$ ez a korábbi feltétel:

$$\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} = 0$$

új feltétel

$$\left.\frac{\partial S_1}{\partial N_1}\right|_{N_1^*} = \left.\frac{\partial S_2}{\partial N_2}\right|_{N_2^*} \qquad N_2^* = N - N_1^*$$

Termodinamikai: $\frac{\partial S}{\partial N_i} = -\frac{\mu_i}{T}$

$$\Rightarrow -\frac{\mu_1}{T_1} = -\frac{\mu_2}{T_2}$$

Az energiafeltételből következik: $\boxed{\mu_1 = \mu_2}$

Ha térfogatok tudnak cserélődni az energia mellett. A levezetés hasonló, az új egyenlet:

Felhasználva termodinamikából: $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,\dots} = \frac{p}{T}$

$$\Rightarrow \quad \frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{p_1 = p_2}$$

Általánosan:

X extenzív mennyiség, hagyjuk kicserélődni:

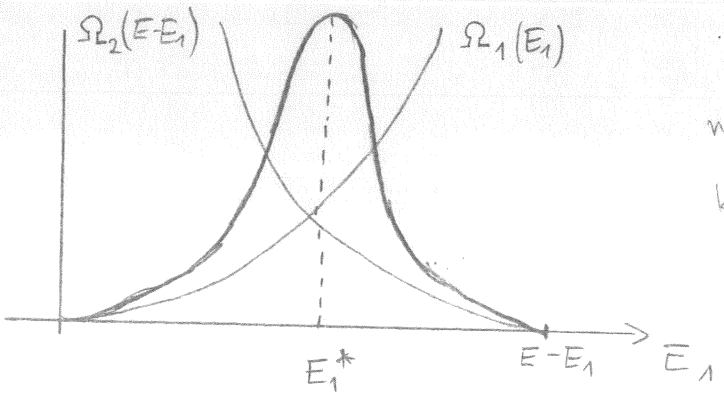
$$\left(\frac{\partial S}{\partial X}\right) = \frac{X_k}{T} \quad \Rightarrow \quad X_k^{(1)} = X_k^{(2)}$$

X_k az X-hez tartozó intenzív mennyiség (konjugált)

Az egyensúlyi pontra mindig igaz ez az összefüggés

$$dS = \frac{\partial S}{\partial E} dE + \frac{\partial S}{\partial N} dN + \frac{\partial S}{\partial V} dV + \frac{\partial S}{\partial X} dX$$

$$dS = \frac{dE}{T} - \frac{\mu}{T} dN + \frac{p\,dV}{T} + \frac{X_k}{T} dX$$



Az entrópia mindig nő, ha kinyitom a falat

II. főtétel

Adiabatikus változásnál (lassú) a korábbi egyenlet felírható mindig.

Hirtelen változásnál (fal kinyitása pl.) csak annyit mondhatunk, hogy a rendszer be fog menni gyorsan az új egyensúlyi állapotába, az entrópia nő.

(II. főtétel)

III. főtétel:

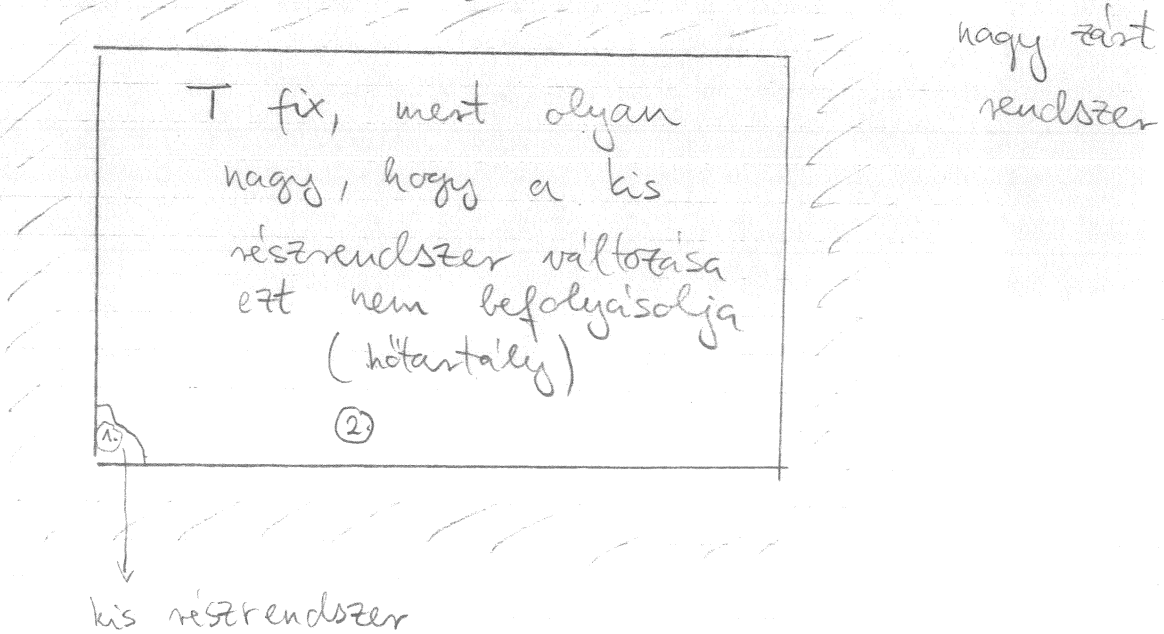
$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right) = \frac{1}{T} \qquad S = k_B \ln \Omega(E)$$

$T \to 0$, alapállapotba kerül a rendszer,

1 állapot van $\Rightarrow \ln \Omega(E) = \ln 1 = 0$, $S = 0$

Ha az alapállapot degenerált, akkor nem

Fix hőmérsékleten érvényes egyenletek:



$$f(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1)\,\Omega_2(E-E_1)}{\Omega(E)}$$

hőtartály: $\Omega_2(E) \approx \Omega(E)$

$\ln\Omega_1 \ll \ln\Omega$ $\qquad S = k_B \ln\Omega(E)$

$S_1 \ll S$ $\qquad \Omega(E) = e^{S/k_B}$

$E_1 \ll E$

$$\Rightarrow f(E_1) \approx \frac{\Omega(E-E_1)}{\Omega(E)} = e^{\frac{1}{k_B}[S(E-E_1)-S(E)]} =$$

$$= e^{\frac{1}{k_B}\left[S(E) - \underbrace{\frac{\partial S(E)}{\partial E}}_{\frac{1}{T}} E_1 + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 S(E)}{\partial E^2} E_1^2 + \ldots - S(E)\right]} \approx$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{T^2}\frac{\partial T}{\partial E} = -\frac{1}{T^2}\cdot\frac{1}{C}$$

C: hőkapacitás

$$\approx e^{-\frac{E_1}{k_B T}} \qquad f(E_1) \sim e^{-\frac{E_1}{k_B T}}$$

A sorfejtés második tagjának és elsőnek az aránya:

$$\frac{E_1^2}{2k_B T^2 C} \Big/ \frac{E_1}{k_B T} \Rightarrow \frac{E_1}{2TC} \ll 1$$

kell, hogy elhanyagolhassuk

oké, hisz C nagyon nagy (hőtartály)

$$f(E_1) = N e^{-\frac{E_1}{k_B T}}$$

normálási faktor

$$\sum_{E_1} f(E_1) = Z \quad , \Rightarrow \quad \boxed{f(E_1) = \frac{e^{-\frac{E_1}{k_B T}}}{Z}}$$

kanonikus sokaság

Kvantummechanikailag

$$p_e = \frac{e^{-\beta E_e}}{Z} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$Z = \sum_e e^{-\beta E_e}$$

Klasszikusan:

$$f(q,p) = \frac{1}{\prod_i N_i! \, h^{3N}} \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(q,p)} \, d\Gamma}{Z} \qquad d\Gamma = dq_1 \ldots dq_f dp_1 \ldots dp_f$$

$$Z = \frac{1}{\prod_i N_i! \, h^{3N}} \int d\Gamma \, e^{-\beta \mathcal{H}(q,p)}$$

Állapotsűrűséget felhasználva:

$$Z = \int_0^\infty e^{-\beta E} \Omega(E) \, dE \qquad \text{(Laplace-transzformált)}$$

kvantumosan: $\Omega(E) = \sum_e \delta(E - E_e)$

Teljes állapotsűrűség volt:

$$\Omega(E) = \int \Omega_1(E_1) \, \Omega_2(E - E_1) \, dE_1 \qquad \text{(konvolúció)}$$

$$Z = \int_0^\infty \Omega(E) \, e^{-\beta E} \, dE = \int_0^\infty e^{-\beta E} \int \Omega_1(E_1) \, \Omega_2(E - E_1) \, dE_1 \, dE$$

$$= \int e^{-\beta (E_1 + E_2)} \, \Omega_1(E_1) \, \Omega_2(E_2) \, dE_1 \, dE_2 = Z_1 \, Z_2$$

$\Rightarrow \quad Z = \prod_i Z_i$

Z - teljes állapotösszeg

Z_i - részrendszerek állapotösszege

A Laplace-transzformáltak szorzódnak

kanonikus sokaság ugyanazt mondja ki, mint a mikrokanonikus sokaság, csak itt bevezettünk egy fix T hőmérsékletet.

Kanonikus sokaságban:

Kvantumosan számolunk, határértékben ugyis ki kell adnia a klasszikust.

$$\overline{E} = \sum_e p_e E_e = \frac{1}{Z} \sum_e e^{-\beta E_e} E_e = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \underbrace{\sum_e e^{-\beta E_e}}_{Z} =$$

$$= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta F) = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta}$$

$$F := -k_B T \ln Z \qquad \text{szabadenergia}$$

$$Z = e^{-\frac{F}{k_B T}}$$

$\Rightarrow f(E) = e^{\beta(F-E)}$ a szabadenergiát felhasználva

$\overline{E}$-ra gyakran csak azt mondjuk, hogy az a rendszer (belső) energiája:

$$E = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta}$$

extenzív — intenzív

$$E_\ell(x) \qquad X = \frac{\partial E_\ell(x)}{\partial x}$$

$$\overline{X} = \sum_\ell X_\ell p_\ell = \sum_\ell \frac{\partial E_\ell}{\partial x} \frac{e^{-\beta E_\ell}}{Z} = -\frac{1}{Z\beta} \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\sum_\ell e^{-\beta E_\ell}}_{Z}$$

$$\overline{X} = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\ln Z}{\beta} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(k_B T \ln Z\right) = \frac{\partial F}{\partial x}$$

Különböző termodinamikai erők (pl. nyomás) így származtathatóak.

pl.: $\quad p = \frac{\partial F}{\partial V}$

Újdra

II. 23.

$$F = -k_B T \ln Z$$

$$e^{-\beta F(\beta)} = \sum_\ell e^{-\beta E_\ell}$$

$$\overline{E} = \langle \mathcal{H} \rangle = E = \sum_\ell E_\ell p_\ell = \frac{1}{Z} \sum_\ell E_\ell e^{-\beta E_\ell} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z($$

$$p_\ell = e^{-\beta E_\ell + \beta F(\beta)}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{T^2 C_v}$$

$$dS = \frac{d\bar{E} + p dV - \mu dN + \dots}{T}$$

extenzív — intenzív

$E_e(x)$ $\qquad X = \frac{\partial E_e(x)}{\partial x}$

$$\overline{X} = \sum_e X_e p_e = \sum_e \frac{\partial E_e}{\partial x} \frac{e^{-\beta E_e}}{Z} = -\frac{1}{Z\beta} \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\sum_e e^{-\beta E_e}}_{Z}$$

$$\overline{X} = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\ln Z}{\beta} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(k_B T \ln Z\right) = \frac{\partial F}{\partial x}$$

Különböző termodinamikai erők (pl. nyomás) így származtathatók.

pl.: $\qquad p = \frac{\partial F}{\partial V}$

Újdra

II. 23.

$$F = -k_B T \ln Z$$

$$e^{-\beta F(\beta)} = \sum_e e^{-\beta E_e}$$

$$\overline{E} = \langle \mathcal{H} \rangle = E = \sum_e E_e p_e = \frac{1}{Z} \sum_e E_e e^{-\beta E_e} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z($$

$$p_e = e^{-\beta E_e + \beta F(\beta)}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{T^2 C_v}$$

$$dS = \frac{dE + pdV - \mu dN + \ldots}{T}$$

intenzív mennyiségek fixálva $\left.\begin{matrix}\lambda E,\ \lambda V,\ \lambda N\end{matrix}\right\} \Rightarrow \lambda S$

$$\lambda E = E(\lambda S, \lambda V, \lambda N, \ldots) \quad / \frac{\partial}{\partial \lambda}$$

$$E = \frac{\partial E}{\partial S} S + \frac{\partial E}{\partial V} V + \frac{\partial E}{\partial N} N$$

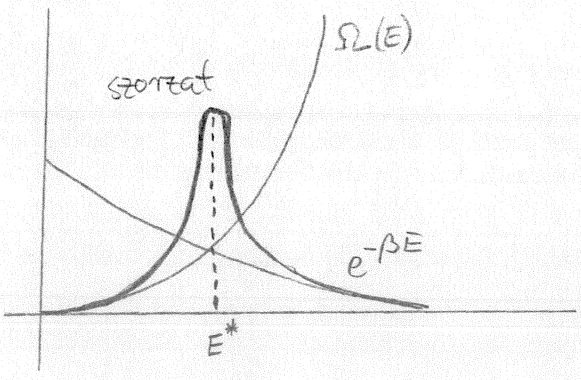
$$\underbrace{+T} \qquad \underbrace{-p} \qquad \underbrace{+\mu}$$

$$E = TS - pV + \mu N$$

S, V, N változók esetén az E függvényt kell használni

$$e^{-\beta F(\beta)} = \sum_e e^{-\beta E_e} = \int_0^\infty dE\ e^{-\beta E}\, \Omega(E) =$$

Tudjuk: $\Omega(E) \sim E^{\alpha f}$ $\quad f$ - szabadsági fokok



$$\Omega(E) \cong e^{S(E)/k_B}$$

$$= \int_0^\infty dE\ e^{-\beta E + S(E)/k_B}$$

$$\text{max.}: \quad \frac{\partial}{\partial E}\left(-\beta E + S(E)/k_B\right)\Big|_{E^*} = 0 \quad \Rightarrow -\beta + \frac{\partial S(E^*)}{k_B \partial E} = 0$$

$$\frac{\partial S(E^*)}{\partial E} = \frac{1}{T}$$

Az integrál csak a maximum környékén számít, máshol elhanyagolható. Tehát:

$$e^{-\beta F(\beta)} = \int_0^\infty dE\, e^{-\beta E + S(E)/k_B} =$$

$$= \int_0^\infty dE\, e^{-\beta(E - E^* + E^*) + S(E - E^* + E^*)/k_B} =$$

$$= \int_0^\infty dE\, e^{-\beta E^* - \beta(E-E^*) + \frac{S(E^*)}{k_B} + \frac{S'(E^*)}{k_B}(E-E^*) + \frac{1}{2}\frac{S''(E^*)}{k_B}(E-E^*)}$$

együtt kiesnek

$$\cong e^{-\beta E^* + S(E^*)/k_B} \int_0^\infty e^{\frac{1}{2k_B} S''(E^*)(E-E^*)^2} dE \cong$$

$S''(E^*) \to -\frac{1}{T^2 C_V}$

úgyis kicsi ott a fv. értéke, mert E^* nagy, makroszkopikus, így az alsó határt nyugodtan veheted $-\infty$-nek

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \qquad \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi}\sigma \right)$$

$$\cong e^{-\beta E^* + S(E^*)/k_B} \sqrt{2\pi T^2 C_V k_B}$$

Az energia szórása, egy T hőmérsékletű rendszerben

$$\sigma_E^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = T^2 C_V k_B$$

(A Gauss-fv. alapján)

$$\Rightarrow \quad -\beta F(\beta) = -\beta E + S(E)/k_B$$

$E = E^*$

($\sqrt{2\pi T^2 C_V k_B}$ része kiesi, az exponenciális mellett elhagyható)

$$-\frac{F}{T} = -\frac{E}{T} + S(E)$$

$$F = E - TS$$

$$S(E) = \frac{E - F}{T}$$

$$dS = \frac{1}{T}dE - \frac{\mu}{T}dN + \frac{p}{T}dV \quad \Longrightarrow$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V,\ldots} = \frac{1}{T}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V,\ldots} = -\frac{\mu}{T}, \quad \ldots$$

$$F(T, V, N) = E - TS = E(T,V,N) - TS(T,V,N)$$

!

$$S(E,N,V), \quad \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T} \Rightarrow E(T)$$

$$S'(E(T)) = \frac{1}{T}$$

$$dF = dE - TdS - SdT = \mu dN - pdV - SdT$$

$$dE = TdS + \mu dN - pdV$$

elből a parciális deriváltak rögtön leolvashatóak

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T,\ldots} = \mu, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{N,T,\ldots} = -p, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V,\ldots} = -S$$

Mikrokanonikus sokaságnál kijöttek az ideális gáz egyenletei. Lássuk most kanonikus sokaságra is:

$$Z = \sum_e e^{-\beta E_e} \quad , \quad \int e^{\beta \mathcal{H}(q,p)} \, d\Gamma \cdot \frac{1}{h^{3N} N!}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 \qquad i = 1, 2, \dots 3N$$

Az integrál: $\frac{V^N}{h^{3N} N!} \int e^{-\frac{\beta}{2m} \sum_{i=1}^{3N} p_i^2} \, dp_1 \dots dp_{3N}$

$$= \frac{V^N}{h^{3N} N!} \prod_{i=1}^{3N} \int e^{-\frac{\beta p_i^2}{2m}} dp_i = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3N}{2}}$$

$$Z(\beta) = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3N}{2}}$$

a klasszikus ideá gáz állapotösszeg

$$Z = \frac{1}{N!} \left[(2\pi m T k_B)^{1/2} \frac{V^{1/3}}{h} \right]^{3N}$$

Stirling: $\ln N! \approx N \ln N - N$

$$N! \approx e^{N \ln N - N} = N^N e^{-N} = \left(\frac{N}{e} \right)^N$$

$$Z = \left[\frac{(2\pi m T k_B)^{1/2}}{h} \cdot \left(\frac{eV}{N} \right)^{1/3} \right]^{3N}$$

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \left[N \ln V + \dots \right]$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T,\dots} = kTN \frac{1}{V} \quad \Rightarrow \quad pV = NkT$$

mikrokanonikus $\Rightarrow$ belső energia

kanonikusnál T a fontos paraméter $\Rightarrow$ állapot-egyenlet

Bitekkel kódolok karaktereket

$p_i \approx 2^{-l_i}$ így kell a kódolást megválasztani

l_i a kódolandó karakterek hossza

p_i a kódolandó jelek felbukkanási valószínűsége

$$\sum_i p_i l_i = \langle e \rangle$$

$$\sum p_i = \sum 2^{-l_i} = 1$$

Shannon-információ: $I = \sum_i p_i \log_2 p_i$

Shannon-féle entrópia: $S = -\sum_i p_i \log_2 p_i$

Nem diszkrét eloszlás esetén

$$S = -\int s(x) \log_2 s(x)\, dx$$

anonikus sokaság:

$$p_e = \frac{e^{-\beta E_e}}{Z}$$

$$\ln p_e = -\beta E_e - \ln Z$$

$$-\sum_e p_e \ln p_e = \beta \underbrace{\sum_e p_e E_e}_{E} + \ln Z \underbrace{\sum_e p_e}_{1} = \beta E + \ln Z =$$

$= \beta(E-F) = S/k_B$

termodinamikai entrópia

Shannon-entrópia

$$\Rightarrow S = -k_B \sum_\ell p_\ell \ln p_\ell$$

(Ha bitben kell, akkor még egy $\ln 2$-es faktor is kell.)

Az az állapot valósul meg, melynek az információtartalma a legkisebb.

új óra

II.28

$$S = -k_B \sum_\ell p_\ell \log p_\ell \qquad \sum_\ell p_\ell = 1$$

Entrópiának mikor van maximuma a fenti mellékfeltétellel

$$\frac{\partial}{\partial p_k}\left[-k_B \sum_\ell p_\ell \log p_\ell + \lambda \sum_\ell p_\ell\right] = 0$$

λ: Lagrange-multiplikátor

$$\Longrightarrow \quad -k_B \log p_k - k_B + \lambda = 0$$

$\forall p_k$-ra $\Rightarrow p_k = p$

$$\sum_{\ell=1}^{k} p_\ell = \sum_{\ell=1}^{k} p = k \cdot p = 1$$

$p = \frac{1}{k}$, ahol k az állapotok száma

$\Rightarrow$ mikrokanonikus sokaság!

Két egymástól független rendszer

$\ell_1 = 1, \dots k_1$ □ □ $\ell_2 = 1, \dots k_2$

p_{ℓ_1} p_{ℓ_2}

$(\ell_1, \ell_2) \Rightarrow p_{\ell_1,\ell_2} = p_{\ell_1} p_{\ell_2}$

$$S = -k_B \sum_{\ell_1,\ell_2} p_{\ell_1,\ell_2} \log p_{\ell_1,\ell_2} = -k_B \sum_{\ell_1,\ell_2} p_{\ell_1} p_{\ell_2} \log(p_{\ell_1} p_{\ell_2}) =$$

$$= -k_B \sum_{\ell_1,\ell_2} \left(p_{\ell_1} p_{\ell_2} \log p_{\ell_1} + p_{\ell_1} p_{\ell_2} \log p_{\ell_2} \right) =$$

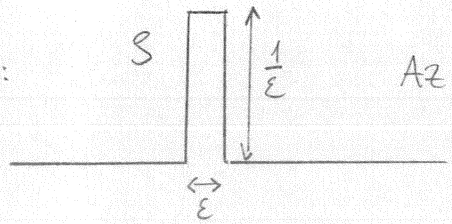
↙ először ℓ_2-re
↘ másodikat ℓ_1-re összegezzük

$$= -k_B \sum_{\ell_1} p_{\ell_1} \log p_{\ell_1} - k_B \sum_{\ell_2} p_{\ell_2} \log p_{\ell_2} = S_1 + S_2$$

két független rendszer esetén az entrópiák összegződnek

Folytonos eset: $S = -k_B \int \varrho \log \varrho \, d\Gamma$

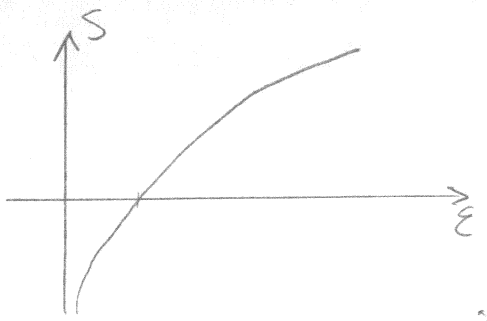
pl.:



Az integrál csak a megengedett területen fusson
(Nem foglalkozunk log 0 -kkal)

$$S = -\frac{1}{\varepsilon} \log \frac{1}{\varepsilon} \cdot \varepsilon = \log \varepsilon$$

$\Rightarrow$



pl.: $g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ Gauss-eloszlás

x^2 várhatóértéket adja: σ ($\langle x \rangle = 0$)

$$S = -\int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \left(-\frac{x^2}{2\sigma^2} - \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma\right) \right) =$$

$$= \frac{1}{2} + \log\left(\sqrt{2\pi}\sigma\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \log\left(2\pi\sigma^2\right)\right)$$

Ismét: ha a szélesség nő, az entrópia nő

Ha nem tudunk az entrópiáról semmit, akk
láttuk, hogy az egyenletes eloszlás jött k
Most tudjuk azt, hogy a rendszer E
(átlag)energiával rendelkezik

$$S = -k_B \sum_e p_e \log p_e \; ; \; \sum_e p_e = 1 \; ; \; E = \sum_{p_e} p_e E_e$$

Két Lagrange-multiplikátor kell!

$$\frac{\partial}{\partial p_k}\left[-k_B \sum_e p_e \log p_e + \lambda_1 \sum_e p_e + \lambda_2 \sum_e p_e E_e\right] = 0$$

$$-k_B \log p_k - k_B + \lambda_1 + \lambda_2 E_k = 0$$

$$\log p_k = -\frac{1}{k_B}\left[k_B - \lambda_1 - \lambda_2 E_k\right] := -\tilde{\lambda}_1 -$$

$$p_k = \underbrace{e^{-\tilde{\lambda}_1 - \tilde{\lambda}_2 E_k}}_{\text{ez a konstans csak normálja az eloszlást, nevezzük } Z^{-1}\text{-nek}} \hookrightarrow \text{nevezzük } \beta\text{-nak}$$

$$e^{\check{\lambda}_1} = Z \qquad p_k = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_k}$$

$$1 = \sum_e p_e = \frac{1}{Z} \sum_e e^{-\beta E_e} \Rightarrow Z = \sum_e e^{-\beta E_e}$$

$$\langle E \rangle = \sum_e \frac{1}{Z} e^{-\beta E_e} E_e = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_e e^{-\beta E_e} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$$

Ez nem más, mint a kanonikus eloszlás leírása. Az itteni β és Z ugyanaz, mint a kanonikus eloszlásnál (ezért is nevezték így)

Nézzünk példaként ismét az ideális gázt!

$$Z = \int \frac{d\Gamma}{h^{3N} N!} = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \int e^{-\sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} \beta} dp_i = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left(\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \right)^{3N} =$$

$$= \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left(2\pi m k_B T \right)^{3N/2} \sim \frac{1}{\beta^{3N/2}}$$

$$e^{+\beta F(\beta)} = \frac{1}{Z} \Rightarrow +\beta F(\beta) = -\log Z$$

$$F(\beta) = -k_B T \log Z$$

$$F(T, N, V) = -k_B T \ln Z$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = -p = \frac{\partial}{\partial V} \left(-k_B T N \log V + \dots \right) = -k_B T N \frac{1}{V}$$

$$pV = NkT$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = -S = \frac{\partial}{\partial T} \left[-k_B T \log \left(\frac{V^N}{h^{3N} N!} \dots \right) \right] =$$

$$= -k_B \log Z - k_B T \frac{3N}{2} \frac{\partial}{\partial T} \log T = -k_B \log Z - \frac{3}{2} N k_B$$

$$S = k_B \log Z + \frac{3}{2} N k_B$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[-\frac{3N}{2} \log \beta \right] = \frac{3}{2} N k_B T$$

$$\frac{\partial E}{\partial T} = C_V = \frac{3}{2} N k_B$$

Az energia fluktuációi:

$$\sigma_E^2 = \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 = k_B T^2 C_V = k_B T^2 \frac{3}{2} N k_B =$$

$$= (k_B T)^2 \cdot \frac{3N}{2}$$

$$\sigma_E^2 \sim N$$

$$\sigma_E \sim \sqrt{N} \quad ; \quad E \sim N \Rightarrow \frac{E}{\sigma_E} \sim \sqrt{N}$$

Akkor lesz éleselb az eloszlás, ha N minél nagyobb.

$$S = + k_B \ln Z + \frac{3N k_B}{2}$$

$$S = k_B \ln \frac{Z_{ke}}{N!} + \frac{3N k_B}{2} = k_B \ln Z_{ke} + \frac{3N k_B}{2} - k_B$$

klasszikus Z

$$= S_{ke} - k_B (N \ln N - N)$$

$$F = -k_B T \ln Z = -kT\{ N \log V + \frac{3N}{2} \log(2\pi m k_B T) - 3N \log h - N \log N + N \}$$

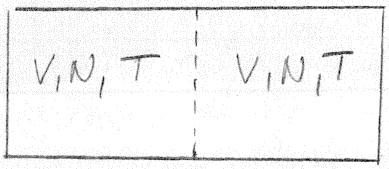
$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = -k_B T \left[\log V + \frac{3}{2} \log(2\pi m k_B T) - 3 \log h - \log N - 1 + 1\right] =$$

$= \mu$ kémiai potenciál

$$\mu = -k_B T \ln \left\{ \frac{V}{N h^3} (2\pi m k_B T)^{3/2} \right\}$$

$$F = N\mu - N k_B T$$

Gibbs - paradoxon:



Két ugyanolyan rendszer közül kiveszem a falat

entrópia additív

$$2S(T,N,V) - S(T,2N,2V) = 0 \; ?$$

$$S_{ke} = k_B \ln Z_{ke} + \frac{3 k_B N}{2}$$

$$S = k_B \ln Z_{ke} + \frac{3 k_B N}{2} - k_B (N \ln N - N)$$

Mindkét esetre nézzük meg mi lesz a különbség eredménye.

$$S = k_B \left[N \ln V + \frac{3N}{2} \ln(2\pi m k_B T) - 3N \ln h - N \ln N + N \right] + \frac{3 k_B N}{2}$$

$$S(T, 2V, 2N) = 2S(T, V, N) + 2k_B N \ln 2 - 2N k_B \ln 2$$

Tehát $N!$ miatt igaz, hogy $S(T, 2V, 2N) = 2S(T, V, N)$

Ha nem vesszük figyelembe $N!$-t:

$$S_{ke}(T, 2V, 2N) = 2S(T, V, N) + \boxed{2k_B N \ln 2}$$

keveredési entrópia

$k_B \ln(2^{2N})$

↓

állapotszám, ennyivel több állapota lenne a rendszernek, ha megkülö biztethetőek a részecske

---

új óra

III. 2.

Ekvipartíció tétel

Ha a potenciál homogén függvény: $\lambda^\alpha U(x) = U(\lambda x$

$U(q) \sim q^\alpha$

$$\frac{p^2}{2m} + U(\lambda x) = E$$

$$\frac{\lambda^2 m}{\lambda^{2-\alpha}} \left(\frac{dv}{dt}\right)^2 + \lambda^\alpha U(x) = \lambda^\alpha E$$

Időt átskálázva: $t \to \sqrt{\lambda^{2-\alpha}}\, t$

Az eredetihez hasonló rendszert kapunk.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}' + ax^2$$

(ap^2 is lehet, px is)

$$\langle ax^2 \rangle = \frac{\int e^{-\beta\mathcal{H}} ax^2 d\Gamma / h^f N!}{\int e^{-\beta\mathcal{H}} d\Gamma / h^f N!} = \frac{\int e^{-\beta(\mathcal{H}'+ax^2)} ax^2 d\Gamma' dx}{\int e^{-\beta(\mathcal{H}'+ax^2)} d\Gamma' dx} =$$

$$= \frac{\int e^{-\beta a x^2} ax^2 dx}{\int e^{-\beta a x^2} dx} = \frac{-\frac{\partial}{\partial\beta}\int e^{-\beta a x^2} dx}{\int e^{-\beta a x^2} dx \longrightarrow Z(\beta)} =$$

Ennek a szabadsági fokra a statisztikus fizikája olyan, mintha a rendszer többi része nem is lenne (T hőmérsékletű hőtartállyal állna kapcsolatba)

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\frac{1}{2}\ln\beta + \dots\right) = \frac{1}{2\beta} = \boxed{\frac{1}{2} k_B T}$$

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{\pi}{\beta a}}$$

Magas hőmérsékletű gázokat ez mindig jól írja le (✓ kvantumkorrekciósok)

Ha a potenciál ax^α jellegű:

$$\langle ax^\alpha \rangle = \dots = \frac{-\frac{\partial}{\partial\beta}\int e^{-\beta a x^\alpha} dx}{\int e^{-\beta a x^\alpha} dx} =$$

$$\beta x^\alpha = y \Rightarrow x = \left(\frac{y}{\beta}\right)^{1/\alpha} \Rightarrow dx = \frac{\frac{1}{\alpha} y^{\frac{1}{\alpha}-1}}{\beta^{1/\alpha}} dy$$

Ezzel: $\int e^{-\beta a x^\alpha} dx = \frac{1}{\beta^{\frac{1}{\alpha}}} \underbrace{\int e^{-ay} \frac{1}{\alpha} y^{\frac{1}{\alpha}-1} dy}$

konstans, ha létezik (nem vizsgáljuk, hogy létezik-e)

$$\Rightarrow \boxed{\langle a x^\alpha \rangle = \frac{1}{\alpha} k_B T}$$

$\alpha > 0$ -ra mindenképp igaz

Ideális gázban $3N$ szabadsági fok 2-es kitevővel

$$\Rightarrow E = 3N \frac{1}{2} k_B T = \frac{3}{2} N k_B T$$

Oszcillátorrendszernél: $E = 6N \frac{1}{2} k_B T = 3N k_B T$

Maxwell-féle sebességeloszlás

$$f(x_1 \dots x_f, p_1 \dots p_f) d\Gamma = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}} \frac{d\Gamma}{h^f N!}$$

↑ eloszlásfv.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \frac{p^2}{2m}$$

$$d\Gamma = d\Gamma' dp$$

integráljunk:

$$f(p)dp = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} dp}{\int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} dp} = \frac{e^{-\beta \frac{m}{2} v^2} m dv}{\int e^{-\beta \frac{m}{2} v^2} m dv}$$

$\tilde{f}(v) dv$

$p = mv$ változócserével

$$\frac{e^{-\beta \frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}} dp_x dp_y dp_z}{\int e^{-\beta \frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}} dp_x dp_y dp_z} \Rightarrow \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} p^2 dp}{\int e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} p^2 dp}$$

↑ ki integrálom szögekre

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

$$p = mv$$

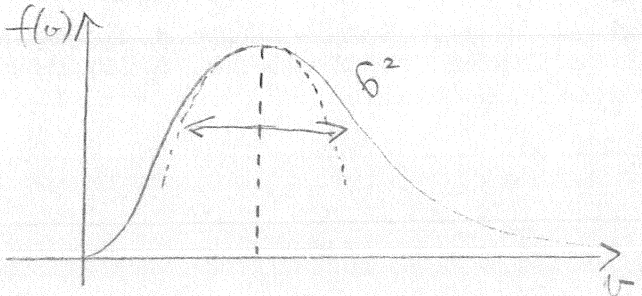
$$\Rightarrow \frac{e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} v^2 dv}{\int e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} v^2 dv} = \frac{\beta^{3/2} m^{3/2}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\beta m v^2}{2}} v^2 dv$$

$$-\frac{2}{m} \frac{\partial}{\partial \beta} \int e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} dv = -\frac{2}{m} \frac{\partial}{\partial \beta} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m}} =$$

$$= -\frac{2}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{m}} \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{1}{\beta^{3/2}}$$

kT - vel átírva

$$f(v)\,dv = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{m}{k_B T}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} v^2 dv$$



$$e^{-\frac{mv^2}{2kT} + \ln v^2} dv$$

! [illegible] maximumot keresünk

$$= -\frac{m}{kT} v + \frac{2}{v} \Rightarrow v^* = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$$

Ekvipartició:

$$\frac{3}{2} kT = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{3kT}{m}$$

Átlag | nem ugyanaz, mint a maximum.

A sebesség nem éles eloszlás (csak az energia) így itt a maximum nem egyenlő az átlaggal

↘

mégegy deriválás:

$$-\frac{m}{kT} - \frac{2}{v^2} = -\frac{m}{kT} - \frac{2m}{2kT} = -\frac{2m}{kT}$$

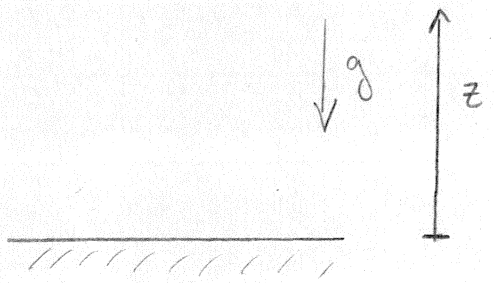
↑ maximumnál (v^*)

$$f(v) = (..) e^{-\frac{mv^{*2}}{2}} v^{*2} e^{-\frac{m}{kT}(v-v^*)^2}$$

$\Rightarrow$ Az eloszlás karakterisztikus mérete (szórásnégyzete):

$$\sigma^2 = \frac{kT}{2m}$$

Gázrészecskék magasság szerinti eloszlása



$$U = -mgz$$

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i mgz_i$$

$$N f(z) = N \frac{e^{-\beta mgz}}{\int_0^\infty e^{-\beta mgz}\, dz}$$

Ez nagyszerű, de rossz eredményre vezet!

⇓

A hőmérséklet felfelé drasztikusan változik

Ha ω szögsebességgel forgatunk vmit, akk

$$f(r) = N e^{-\beta \frac{m}{2} r^2 \omega^2}$$ eloszlás lesz

(hőmérséklet itt nem változik)

klasszikus dipól beállása elektromos térben

$$\mathcal{H} = -pE\cos\vartheta$$

Ha dipólok között nincs kölcsönhatás:

$$f(\vartheta) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\int e^{-\beta\mathcal{H}}\, d\vartheta} = \frac{e^{\beta pE\cos\vartheta}}{\int_{-\pi}^{+\pi} e^{\beta pE\cos\vartheta}\, d\vartheta}$$

Dipólmomentum átlaga adott T-n:

$$\langle p \rangle = \frac{\int_{-\pi}^{+\pi} e^{\beta p E \cos\vartheta} \, p \cos\vartheta \, d\vartheta}{\int_{-\pi}^{+\pi} e^{\beta p E \cos\vartheta} \, d\vartheta} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E} \ln \int_{-\pi}^{+\pi} e^{\beta p E \cos\vartheta} \, d\vartheta$$

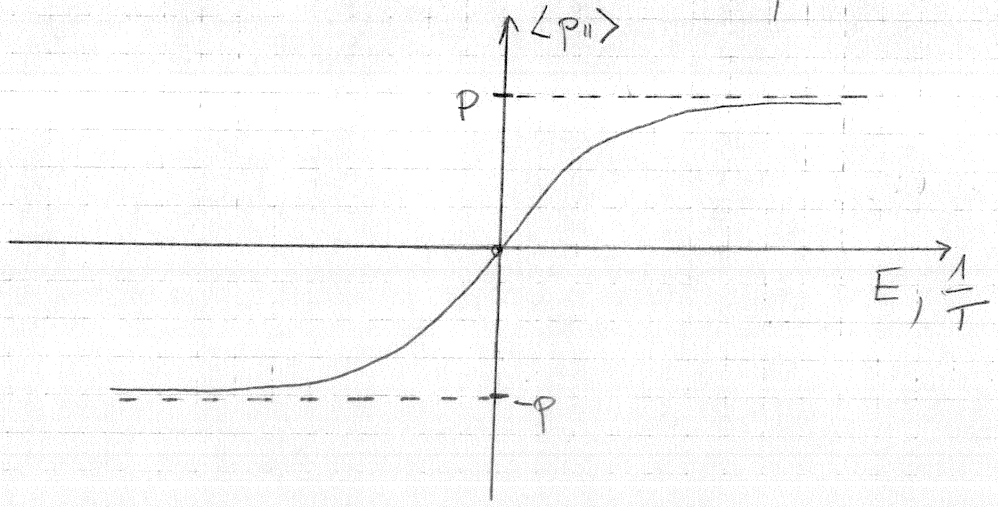
$$\int_{-\pi}^{0} e^{\beta p E \cos\vartheta} \, d\vartheta = \int_{-1}^{1} e^{\beta p E x} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \dots$$

$x = \cos\vartheta$

$dx = -\sin\vartheta \, d\vartheta$

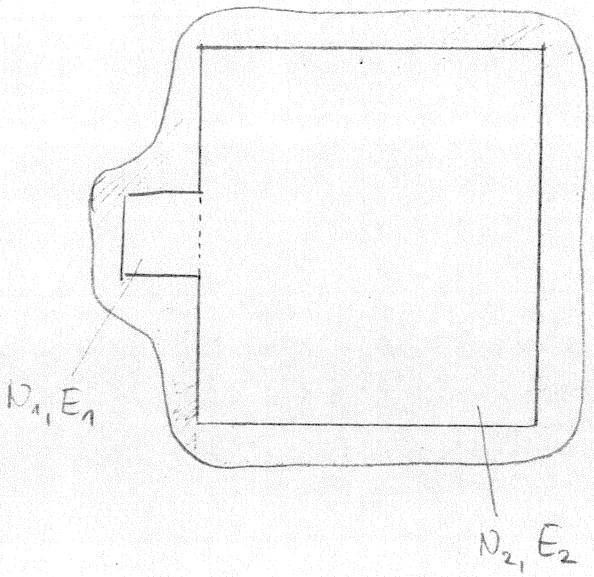
$d\vartheta = -\frac{dx}{\sin\vartheta} = -\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$

$$\langle p_{\parallel} \rangle = p \left[\operatorname{cth}\left(\frac{E_p}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{E_p} \right]$$



Nagykanonikus sokaság

Részecskeszám nem rögzített (valóságban ez a gyakoribb)



$$E = E_1 + E_2$$

$$N = N_1 + N_2$$

$$N_1 << N_2 \approx N$$

$$E_1 << E_2 \approx E$$

$$f_1(E_1, N_1) = \frac{\Omega_1(E_1, N_1)\,\Omega_2(E_2, N_2)}{\Omega(E, N)}$$

$$\Omega_1 << \Omega_2 \approx \Omega$$

$$\rightarrow f_1(E_1, N_1) \approx \frac{\Omega(E - E_1, N - N_1)}{\Omega(E, N)}$$

$$f_1(E_1, N_1) = e^{-S(E,N)/k_B + S(E-E_1, N-N_1)/k_B} =$$

$$= e^{\left(-\frac{\partial S}{\partial E}E_1 - \frac{\partial S}{\partial N}N_1\right)/k_B + \dots} \approx e^{-\frac{E_1}{k_B T} + \frac{\mu N_1}{k_B T} + \dots}$$ ... további ...

$$\frac{1}{2}\frac{1}{k_B}\frac{\partial^2 S}{\partial E^2}E_1^2 + \frac{1}{2}\frac{1}{k_B}\frac{\partial^2 S}{\partial E \partial N}E_1 N_1 + \frac{1}{2}\frac{1}{k_B}\frac{\partial^2 S}{\partial N^2}N_1^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T_2} = \frac{1}{T}$$

$$\frac{\partial S}{\partial N} = -\frac{\mu}{T}$$ ez is ...

(a cseppfolyós rendszerek)

A sorfejtés további tagjai határozzák majd meg az eloszlás élességét.

$$f(E,N) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H} + \beta\mu N}\, d\Gamma_N / h^{3N} N!}{\sum_N \int e^{-\beta\mathcal{H} + \beta\mu N}\, d\Gamma_N / h^{3N} N!} = Z$$

Kvantummechanikailag:

E_ℓ, N_ℓ

$$p_\ell = \frac{e^{-\beta E_\ell + \mu\beta N_\ell}}{Z}$$

mellékfeltételek:

$$S = -k_B \sum_\ell p_\ell \log p_\ell \,, \quad \sum p_\ell = 1, \quad \sum E_\ell p_\ell = E$$

$$\sum_\ell N_\ell p_\ell = N$$

$$\frac{\partial}{\partial p_k}\left[-k_B \sum_\ell p_\ell \log p_\ell + \lambda_1 \sum_\ell p_\ell + \lambda_2 \sum_\ell E_\ell p_\ell + \lambda_3 \sum_\ell N_\ell p_\ell\right] =$$

$$-k_B \log p_k - k_B + \lambda_1 + \lambda_2 E_k + \lambda_3 N_k = 0$$

$$p_\ell = \underbrace{e^{-\tilde{\lambda}_1}}_{1/Z} \; e^{-\tilde{\lambda}_2 E_\ell} \; e^{-\tilde{\lambda}_3 N_\ell}$$

$\tilde{\lambda}_2 \to \beta$, $\tilde{\lambda}_3 \to -\mu\beta$

Kevésbé boldog fejezetek

$$p_e \sim e^{-\beta E_e - \alpha N_e} \qquad \alpha := -\frac{\mu}{k_B T}$$

$$1 = \sum_e p_e = \sum_e \frac{1}{Z} e^{-\beta E_e - \alpha N_e}$$

$$Z = \sum_e e^{-\beta E_e - \alpha N_e} = \sum_N Z_N e^{\alpha N} =$$

↑ N részecske esetén a kanonikus állapotösszeg

$$Z_N = \frac{1}{N!\, h^{3N}} \int e^{-\beta H_N(q,p)}\, d\Gamma$$

$$Z_N = \int_0^\infty \Omega(E,N)\, e^{-\beta E}\, dE$$

$$= \sum_N e^{-\alpha N} \int_0^\infty dE\, \Omega(E,N)\, e^{-\beta E}$$

nagykanonikusnál bővül egy ilyen résszel (kanonikushoz képest)

kanonikusnál nyeregpontmódszer volt:

$$\Omega(E) = e^{S(E)/k_B}$$

$$\int_0^\infty e^{-\beta E} e^{S(E)/k_B}\, dE \approx e^{-\beta E^* + S(E^*)/k_B} \cdot \int e^{\frac{1}{2}\frac{S''(E^*)}{k_B}(E-E^*)^2} dE$$

↑

$$\frac{d}{dE}\left\{-\beta E^* + S(E^*)/k_B\right\} = 0 \Rightarrow -\beta + S'(E^*)/k_B = 0 \Rightarrow \left.\frac{\partial S}{\partial E}\right|_{E^*} = \frac{1}{T}$$

Ezt általánosítjuk:

$N \sim 10^{23}$ nagyságrendű $\quad \frac{\Delta N}{N} \sim 10^{-23}$

lehet itt is integrálgatni

$$\Omega(E,N) = e^{S(E,N)/k_B}$$

$$Z \approx \int dN\, e^{-\alpha N} \int dE\, e^{-\beta E}\, e^{S(E,N)/k_B} \approx$$

$$\frac{\partial}{\partial E}\left\{-\alpha N^* - \beta E^* + S(E^*,N^*)/k_B\right\} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial N}\left\{-\alpha N^* - \beta E^* + S(E^*,N^*)/k_B\right\} = 0$$

$$-\beta + \frac{1}{k_B}\frac{\partial S}{\partial E} = 0 \quad \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$$

$$-\alpha + \frac{1}{k_B}\frac{\partial S}{\partial N} = 0 \quad \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial N} = \alpha k_B = -\frac{\mu}{T}$$

$$\approx e^{-\alpha N^* - \beta E^* + S(E^*,N^*)/k_B} \int dN\, dE \ldots$$

↑ második deriváltak eloszlás szélességét mutatják

$$\ln Z = -\alpha N^* - \beta E^* + S(E^*,N^*)/k_B$$

$$-k_B T \ln Z = -\mu N + E - TS(E,N) := \phi(T,\mu,V)$$

↖ E, N-t a legvalószínűbb E^*, N^*-gal helyettesítettük

$\phi(T,\mu,V)$ nagykanonikus potenciál
(~ kanonikusban ilyesmi a szabadenergia)

$$\phi(T,\mu,V) = E - TS - \mu N$$

Euler-azonosság:

$$E(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda E(S,V,N) \qquad / \frac{\partial}{\partial \lambda}\Big|_{\lambda=1}$$

$$E = TS - pV + \mu N \qquad \text{Euler-egyenlet}$$

$$\phi = E - TS - \mu N = -pV$$

$$\boxed{\phi = -pV}$$

Ez döbbenetes!

(kotnok)

$$d\phi = dE - SdT - TdS - \mu dN - Nd\mu$$

fundamentális egyenlet:

$$dS = \frac{\partial S}{\partial E} dE + \frac{\partial S}{\partial N} dN + \frac{\partial S}{\partial V} dV =$$

$$= \frac{1}{T} dE - \frac{\mu}{T} dN + \frac{p}{T} dV$$

$$TdS = dE - \mu dN + pdV$$

$$-pdV = dE - TdS - \mu dN$$

$$d\phi = -p\,dV - S\,dT - N\,d\mu$$

⇓ a deriváltak levonásával

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial T}\right)_{\mu,N} = -S \qquad \left(\frac{\partial \phi}{\partial \mu}\right)_{T,V} = -N$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial V}\right)_{\mu,T} = -p$$

COOL !

A deriváltak egy csoportba gyűjtése

$$d\phi = -pdV - Vdp$$

$$dp = -\frac{p}{V}dV - \frac{d\phi}{dV} = \frac{S}{V}dT + \frac{N}{V}d\mu$$

fajlagos mennyiségek

Erről ennyit ...

Klasszikus ideális gáz

$$Z = \sum_N e^{-\alpha N} Z_N = \sum_N e^{-\alpha N} \frac{V^N}{h^{3N} N!} \left(2\pi m k_B T\right)^{\frac{3N}{2}} =$$

$$= \sum_N \frac{1}{N!} \left[\frac{V e^{\alpha}}{h^3}\left(2\pi m k_B T\right)^{3/2}\right]^N = \exp\left(\frac{V e^{-\alpha}}{h^3}\left(2\pi m k_B T\right)^{3/2}\right)$$

$$\ln Z = \frac{V e^{-\alpha}}{h^3}\left(2\pi m k_B T\right)^{3/2}$$

$$\phi = -k_B T \frac{V e^{\alpha}}{h^3}\left(2\pi m k_B T\right)^{3/2} = -k_B T \frac{V e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{h^3}\left(2\pi m k_B T\right)^{3/2}$$

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \boxed{N = \frac{V e^{-\frac{\mu}{k_B T}}}{h^3} \left(2\pi m k_B T\right)^{3/2}}$$

$$e^{\frac{\mu}{k_B T}} = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T}\right)^{3/2} \approx \frac{\lambda^3}{r_0^3}$$

$\frac{N}{V} \sim r_0^{-3}$ r_0: gáz részecskék közti átlagos távolság

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3} r_0^3$$

$$\left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T}\right)^{1/2} = \frac{h}{\left(4\pi m \frac{1}{2} k_B T\right)^{1/2}} \approx \lambda$$

kb. részecske hullámhossza

↑ „nevező": kb. impulzus

ritka vagy magas hőmérsékletű gáz esetén

$\frac{\lambda^3}{r_0^3}$ kicsi $\Rightarrow$ μ negatív kell, hogy legyen

Addig klasszikus a gáz, amíg a fenti feltétel

Új óra

Fels spin energiafelhasadása

H mágneses tér, μ mágneses momentum

$+\mu$ $-\mu$

$$\varepsilon_+ = +\mu H \qquad -\mu H = \varepsilon_-$$

Részecskeszám rögzített · kanonikus

$$Z_1 = \sum_\ell e^{-\beta E_\ell} = e^{-\beta\varepsilon_+} + e^{-\beta\varepsilon_-} = e^{\mu H\beta} + e^{+\mu H\beta} =$$

$$= 2\,\mathrm{ch}\,(\mu H/\beta)$$

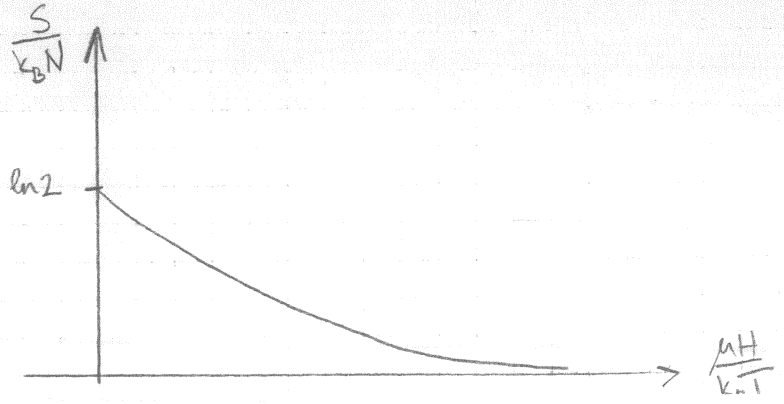
$$Z_N = Z_1^N = \left[2\,\mathrm{ch}(\mu H\beta)\right]^N$$

$$F = -k_B T \ln Z_N = -k_B T N \ln\left[2\,\mathrm{ch}(\beta\mu H)\right]$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B N \ln\left[2\,\mathrm{ch}(\beta\mu H)\right] +$$

$$- k_B T N \frac{1}{2\,\mathrm{ch}(\beta\mu H)} 2\,\mathrm{sh}(\beta\mu H)\cdot\frac{\mu H}{k_B T^2} =$$

$$= N k_B \left\{ \ln\left(2\,\mathrm{ch}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)\right) - \frac{\mu H}{k_B T}\,\mathrm{th}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)\right\}$$



magas hőmérsékleten $S = N k_B \ln 2 = k_B \ln 2^N$

$\Rightarrow$ mindegyik beállás egyforma valószínű
2^N különböző konfiguráció

$$= -k_B T N \ln\left[2\operatorname{ch}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)\right] = -k_B T N \ln\left[e^{\frac{\mu H}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu H}{k_B T}}\right] =$$

$$= -k_B T N \ln\left[e^{\frac{\mu H}{k_B T}}\left(1 + e^{-\frac{2\mu H}{k_B T}}\right)\right] = -k_B T N \left\{\frac{\mu H}{k_B T} + \ln\left(1 + e^{-\frac{2\mu H}{k_B T}}\right)\right\}$$

$$= -\mu H N - k_B T N \ln\left(1 + e^{-\frac{2\mu H}{k_B T}}\right) =$$

$\uparrow$
$T \to 0$ sorfejtés

$\ln(1+x) = x + \dots$, $x \ll 1$

$$= F = -\mu H N - k_B T N e^{-\frac{2\mu N}{k_B T}} \qquad T \to 0$$

$\uparrow$
alapállapoti energia

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B N e^{-\frac{2\mu H}{k_B T}} + k_B T N e^{-\frac{2\mu H}{k_B T}} \cdot \frac{2\mu H}{k_B T^2} =$$

$$= k_B N e^{-\frac{2\mu H}{k_B T}} \left\{1 + 2\frac{\mu H}{k_B T}\right\} \qquad T \to 0$$

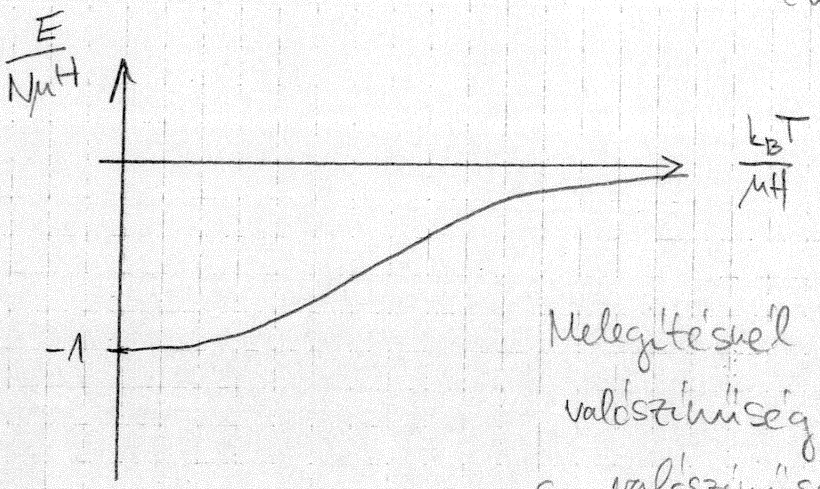
$$E = F + TS = \mu H N \operatorname{th}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)$$

$+\mu H \sim p_+ = \dfrac{e^{-\beta\mu H}}{e^{-\beta\mu H} + e^{\beta\mu H}}$

$\cdot e^{\beta\mu H}$

$-\mu H \sim p_- = \dfrac{e^{\beta\mu H}}{e^{-\beta\mu H} + e^{\beta\mu H}}$

$$\overline{E} = N(\mu H p_+ - \mu H p_-) = -\mu H N \underbrace{\frac{-e^{-\beta\mu H} + e^{\beta\mu H}}{e^{-\beta\mu H} + e^{\beta\mu H}}}_{th(\beta\mu H)}$$



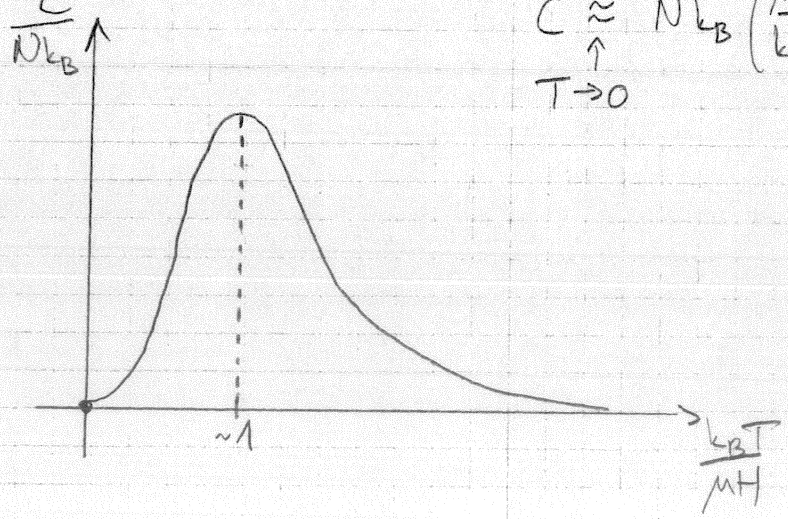
Melegítéskor az egyforma valószínűség felé tartanak a valószínűségek, így

$\overline{E} \to 0$

Melegítéssel nem érhető el a pozitív átlagenergia.

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = N k_B \left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)^2 ch^{-2}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)$$

$$C \underset{T \to 0}{\approx} N k_B \left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)^2 4 e^{-\frac{\mu H}{k_B T}}$$

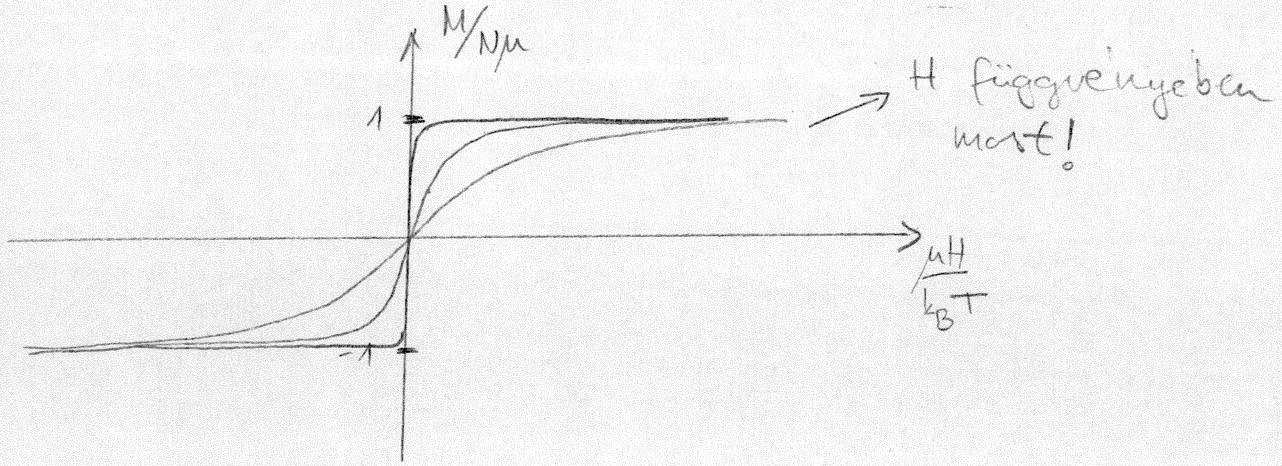


$$M = N\{p_+ \mu - p_- \mu\}$$

Ugyanakkor:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = N k_B T \frac{1}{2\,\mathrm{ch}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)} 2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right) \frac{\mu}{k_B T} =$$

$$= N\mu\, \mathrm{th}\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)$$



Minél alacsonyabb a hőmérséklet annál lépcsőszerűbb a függvény.

óra III. 16.

N db μ momentum E elektromos térben

polarizáció: $P = \frac{N\mu}{V}\left[\mathrm{cth}\left(\frac{\mu E}{kT}\right) - \frac{kT}{\mu E}\right]$ $\mu E \ll kT$

végösszeg a dielektromos állandó: $\varepsilon = 1 + 4\pi \frac{N}{V} \frac{\mu^2}{3kT}$

Ezeket akarjuk most kihozni.

$U = -\mu E \cos\vartheta$ energia (dipólé)

$f(\vartheta, \varphi) = C e^{-U/k_B T}\, d\omega$

$d\omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$

$$\overline{\mu\cos\vartheta} = \frac{\int \mu\cos\vartheta\, e^{-U/k_BT}\, d\omega}{\int e^{-U/k_BT}\, d\omega} = \frac{\mu\int e^{+\frac{E\mu}{kT}\cos\vartheta}\cos\vartheta\sin\vartheta\, d\vartheta}{\int e^{+\frac{E\mu}{kT}\cos\vartheta}\sin\vartheta\, d\vartheta}$$

$$Z =$$

$$= +kT\cdot\frac{\partial}{\partial E}\ln Z$$

$$Z = \int_0^{\pi} e^{+\frac{E\mu}{kT}\cos\vartheta}\sin\vartheta\, d\vartheta = \left[\frac{e^{+\frac{E\mu}{kT}\cos\vartheta}}{-\frac{E\mu}{kT}}\right]_0^{\pi} =$$

$$= \frac{e^{\frac{E\mu}{kT}} - e^{-\frac{E\mu}{kT}}}{\frac{E\mu}{kT}} = 2\frac{kT}{E\mu}\,\mathrm{sh}\left(\frac{E\mu}{kT}\right)$$

$$\ln Z = \ln 2 + \ln \mathrm{sh}\left(\frac{E\mu}{kT}\right) - \ln\left(\frac{\mu E}{kT}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial E}\ln Z = \frac{\mathrm{ch}\left(\frac{E\mu}{kT}\right)}{\mathrm{sh}\left(\frac{E\mu}{kT}\right)}\cdot\frac{\mu}{kT} - \frac{1}{\frac{\mu E}{kT}}\cdot\frac{\mu}{kT} = \mu L\left(\frac{\mu E}{kT}\right)$$

Langevin-fv. $L(x) = \mathrm{cth}(x) - \frac{1}{x}$

$$P = \frac{N}{V}\mu L\left(\frac{\mu E}{kT}\right)$$

$$D = \varepsilon E = E + 4\pi P$$

$\mu E \ll kT$

$$L(x) = \mathrm{cth}(x) - \frac{1}{x} = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} - \frac{1}{x} =$$

$$= \frac{1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \ldots + 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \ldots}{1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} - 1 + x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \ldots} - \frac{1}{x} =$$

$$= \frac{2 + x^2 + \ldots}{2x + \frac{x^3}{3} + \ldots} - \frac{1}{x} \approx \frac{1 + \frac{x^2}{2}}{x + \frac{x^3}{6}} - \frac{1}{x} = \frac{1 + \frac{x^2}{2}}{x\left(1 + \frac{x^2}{6}\right)} - \frac{1}{x} =$$

$$= \frac{1}{x}\left[\frac{1 + \frac{x^2}{2}}{1 + \frac{x^2}{6}} - 1\right] \approx \frac{1}{x}\left[\left(1 + \frac{x^2}{2}\right)\left(1 - \frac{x^2}{6}\right) - 1\right] =$$

sorfejtve kis rendig

$$= \frac{1}{x}\left[1 + \frac{x^2}{2} - \frac{x^2}{6} - 1\right] = \frac{x}{3} \quad \left(+ \frac{x^3}{45} \text{-tel folytatódik}\right)$$

$$D = \varepsilon E = E + 4\pi \cong E + 4\pi \frac{\mu N}{V} \frac{1}{3} \frac{\mu E}{kT} =$$

$$= E\left(\underbrace{1 + 4\pi \frac{\mu^2 N}{3VkT}}_{\varepsilon}\right)$$

Most másképp:

$$P = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial F}{\partial E}\right)_{T,N,V}$$

$$F = k_B T \ln Z$$

$$Z = Z_1^N / N! \qquad Z_1 = \int e^{-\beta\left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}\right) - \beta E \mu \cos\vartheta} \frac{d\Gamma}{h^3}$$

$$d\Gamma = dp_x\, dp_y\, dp_z\, dx\, dy\, dz$$

$$Z_1 = Z_{tr}\, Z_{rot}$$

$$Z_{tr} = V\left(2\pi m kT/h^2\right)^{3/2}$$

$$\mathcal{H}_{rot} = \frac{p_\vartheta^2}{2\Theta} + \frac{p_\varphi^2}{2\Theta \sin^2\vartheta} - \mu E \cos\vartheta$$

$$Z_{rot} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \int_{-\infty}^{+\infty} dp_\vartheta \int_{-\infty}^{+\infty} dp_\varphi \; e^{-\mathcal{H}_{rot}/k_B T} \Big/ h^2 =$$

$$= 2\pi \int_0^{\pi} d\vartheta \sqrt{\pi 2 k_B T \Theta} \cdot \sqrt{\pi 2 k_B T \Theta \sin^2\vartheta} \Big/ h^2$$

ez meg ugyanaz az integrál, amit korábban számoltunk
(... remélhetőleg ...)

Most kvantumosan, mágneses térbe mágneses momentumokat:

$$E = -MH = -g\mu_B H \sum_{i=1}^{N} m_i$$

$m_i = J, J-1, \ldots -J+1, -J$
lehet $\forall$ i-re
mágneses kvantumszám

$$Z = \sum_{m_1=-J}^{J} \cdots \sum_{m_N=-J}^{J} \exp(+\beta M H) = \prod_{j=1}^{N} \left[\sum_{m_j=-J}^{J} \exp\left(\beta g \mu_B m_j\right) \right]$$

$$\sum_{k=-n}^{n} x^k = x^{-n} \sum_{\ell=0}^{2n} x^\ell = \frac{x^{2n+1}-1}{x^n(x-1)} = \frac{x^{n+\frac{1}{2}} - x^{-(n+\frac{1}{2})}}{x^{1/2} - x^{-1/2}}$$

$$Z = \left[\frac{\mathrm{sh}\left(\beta g \mu_B \frac{2J+1}{2}\right)}{\mathrm{sh}\left(\frac{\beta g \mu_B}{2}\right)} \right]^N$$

Brillouin-fv. $B_j(x) = \frac{d}{dx} \ln\left[\mathrm{sh}\left(x \frac{2J+1}{2J}\right) / \mathrm{sh}\left(\frac{x}{2J}\right) \right]$

$$\bar{M} = k_B T \frac{\partial}{\partial H} \ln Z = N g \mu_B J B_J\left(\frac{g \mu_B J H}{k_B T}\right)$$

$$B_j(x) = \frac{2j+1}{2j} \mathrm{cth}\left(\frac{2j+1}{2j} x\right) - \frac{1}{2j} \mathrm{cth} \frac{x}{2j}$$

$$B_j(x) = \frac{2j+1}{2j} \left\{ \frac{e^{\frac{2j+1}{2j}x} + e^{-\frac{2j+1}{2j}x}}{e^{\frac{2j+1}{2j}x} - e^{-\frac{2j+1}{2j}x}} \right\} - \frac{1}{2j} \left\{ \frac{e^{\frac{x}{2j}} + e^{-\frac{x}{2j}}}{e^{\frac{x}{2j}} - e^{-\frac{x}{2j}}} \right\}$$

$$B_j(x) \underset{x \ll 1}{\approx} \frac{2j+1}{2j} \left[\frac{\left[2 + \left(\frac{2j+1}{2j} x\right)^2\right]}{2\frac{2j+1}{2j} x + \left(\frac{2j+1}{2j}\right)^3 \frac{x^3}{3}} \right] - \frac{1}{2j} \frac{2 + \frac{x^2}{4j^2}}{2\frac{x}{2j} + \frac{x^3}{3(2j)^3}} \approx$$

$$\approx \frac{2j+1}{2j} \frac{1 + \frac{1}{2}\left(\frac{2j+1}{2j} x\right)^2}{\frac{2j+1}{2j} x \left[1 + \frac{1}{6}\left(\frac{2j+1}{2j} x\right)^2\right]} - \frac{1}{2j} \frac{1 + \frac{1}{2}\left(\frac{x}{2j}\right)^2}{\frac{x}{2j}\left(1 + \frac{1}{6}\left(\frac{x}{2j}\right)^2\right)} =$$

$$= \frac{1}{x}\left[1 + \frac{1}{3}\left(\frac{2j+1}{2j} x\right)^2 - 1 - \frac{1}{3}\left(\frac{x}{2j}\right)^2\right] = x \frac{1}{3 \cdot 4J^2} \left\{4J^2 + 4J\right\} =$$

$$= \frac{x}{3}\,\frac{J+1}{J} \approx B_J(x)$$

$x \ll 1$

$$H \ll \frac{kT}{g\mu_B J}$$

kvantum

$$\Rightarrow \overline{M} \approx N g\mu_B J \frac{J+1}{3J} \cdot \frac{g\mu_B J H}{k_B T} = N \frac{g^2\mu_B^2}{kT} J(J+1) H$$

elektromos esetben $\mu \sim g\mu_B J$

$B_\infty(x) = L(x) \Rightarrow$ klasszikus határeset

Új óra

III. 21.

ψ_k hullámfv.-ek, p_k valószínűséggel

A fizikai mennyiség: $\hat{A}$

$$\sum_k p_k \left(\psi_k, \hat{A}\psi_k\right) = \langle A \rangle \qquad \Sigma p_k = 1$$

Áttérés bázisfv.-ek másik rendszerére

$$\psi_k = \sum_e a_{ke}\,\psi_e'$$

$$\langle A \rangle = \sum_{e,m} \underbrace{\sum_k p_k a_{ke}^* a_{km}}_{\varrho_{me}} \overbrace{\left(\psi_e', \hat{A}\psi_m'\right)}^{A_{em}} =$$

sűrűségmátrix

$$= \mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\hat{A}\right) = \sum_{l,m} \varrho_{ml} A_{lm}$$

Eredeti rendszerben a sűrűségmátrix diagonális

Entrópia továbbra is: $S = -k_B \sum_k P_k \log P_k =$

$$= -k_B \,\mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho} \ln \hat{\varrho}\right)$$

Mikrokanonikus sokaságban:

$$P_k = \frac{1}{\Omega(E)}$$

$$S = -k_B \,\Omega \cdot \frac{1}{\Omega} \ln \frac{1}{\Omega} = k_B \ln \Omega(E)$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$$

pl. N db harmonikus oszillátor, ω frekvenciával

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right)$$

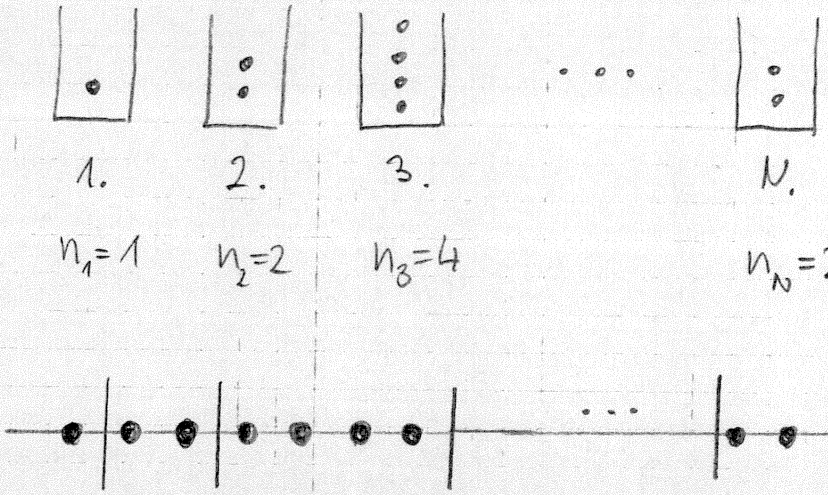
$k = 1, 2, \ldots N$ -ig leszámozzuk az oszillátorokat

Rögzített voltuk miatt megkülönböztethetőek!

$$E = \sum_{k=1}^{N} \hbar\omega\left(n_k + \tfrac{1}{2}\right) = \underbrace{N\frac{\hbar\omega}{2}}_{E_0} + \hbar\omega \sum_{k=1}^{N} n_k$$

$$\frac{E - E_0}{\hbar\omega} = \sum_k n_k := \mathcal{E}$$

Hány állapota lehet ennek a rendszernek?



$\mathcal{E}$ golyó, $N-1$ elválasztó fal

Hányféle különböző módon pakolhatjuk le ezeket?

$$\frac{(\mathcal{E}+N-1)!}{(N-1)!\,\mathcal{E}!} = \Omega = \binom{\mathcal{E}+N-1}{\mathcal{E}}$$

$$S = k_B \ln\Omega = k_B\left[\ln(\mathcal{E}+N-1)! - \ln\mathcal{E}! - \ln(N-1)!\right] =$$

Stirling

$$\cong k_B\left[(\mathcal{E}+N-1)\ln(\mathcal{E}+N-1) - \mathcal{E} - N + 1 - \mathcal{E}\ln\mathcal{E} + \mathcal{E} - (N-1)\ln(N-1) + N - 1\right]$$

$$= k_B\left[(\mathcal{E}+N-1)\ln(\mathcal{E}+N-1) - \mathcal{E}\ln\mathcal{E} - (N-1)\ln(N-1)\right]$$

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial \mathcal{E}}\cdot\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial E} = \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\partial S}{\partial \mathcal{E}} = \frac{k_B}{\hbar\omega}\left[\ln(\mathcal{E}+N-1) - \ln\mathcal{E}\right] = \frac{1}{T}$$

$$\ln\frac{\mathcal{E}+N-1}{\mathcal{E}} = \hbar\omega\beta$$

$$\varepsilon = \frac{N-1}{e^{\hbar\omega\beta}-1} \approx \frac{N}{e^{\hbar\omega\beta}-1}$$

$$E = N\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{N\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta}-1}$$

$T \to \infty : \beta \to 0 : e^{\hbar\omega\beta} - 1 \approx \hbar\omega\beta$

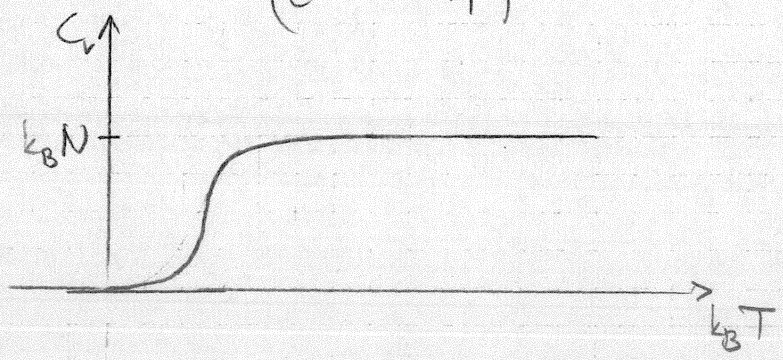
$$E \approx \frac{N\hbar\omega}{2} + Nk_BT$$

↑ kvantumból kapjuk csak

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = Nk_B$$

$$C_v = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{N\hbar\omega}{\left(e^{\hbar\omega\beta}-1\right)^2} e^{\hbar\omega\beta}\hbar\omega\frac{1}{k_BT^2} =$$

$$= Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_BT}}{\left(e^{\hbar\omega/k_BT}-1\right)^2}$$



$T \to 0 : \beta \to \infty$

$$C_v \approx Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 e^{-\hbar\omega/k_BT}$$

Kanonikus sokaságban:

$$p_\ell = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\ell} \qquad Z = \sum_\ell e^{-\beta E_\ell}$$

pl. itt is harmonikus oszcillator

$$E_\ell = N\frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \sum_{k=1}^{N} n_k \qquad \ell \{n_1, \dots n_N\} \text{ sorozat}$$

$$Z = \sum_{\{n_1 \dots n_N\}} e^{-\beta\left(N\hbar\omega/2 + \hbar\omega \sum_{k=1}^{N} n_k\right)} =$$

$$= e^{-\beta N \hbar\omega/2} \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{\hbar\omega n_1}\right)\left(\sum_{n_2=0}^{\infty} e^{\hbar\omega n_2}\right) \cdots \left(\sum_{n_N=0}^{\infty} e^{\hbar\omega n_N}\right)$$

$$Z = e^{-\frac{\beta N \hbar\omega}{2}} Z_1^N \qquad Z_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$F = -k_B T \ln Z = N\frac{\hbar\omega}{2} - k_B T N \ln Z_1 =$$

$$= N\frac{\hbar\omega}{2} + k_B T N \ln\left(1 - e^{-\hbar\omega/\beta}\right)$$

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\hbar\omega N}{2} + N\frac{e^{-\hbar\omega\beta}(-\hbar\omega)}{\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)} =$$

$$= \frac{\hbar\omega N}{2} + \frac{N\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1}$$

remek...

Körülbelül 23-adéstor számoltuk ki...

Oszillátorrendszer szabadenergiája általánosan:

$$F = F_0 + k_B T \sum_k \ln\left(1 - e^{-\hbar\omega_k \beta}\right)$$

Nagykanonikus sokaságnál:

Figyelni kell, mert a hamiltoni változik a részecskeszám fv.-ében

$$\langle A \rangle = \sum_{\ell, N} p_\ell^{(N)} \left(\psi_\ell^{(N)}, \hat{A} \psi_\ell^{(N)}\right) \qquad \sum_{\ell, N} p_\ell^{(N)} = 1$$

$$p_\ell^{(N)} = \frac{1}{Z} e^{-\beta\left(E_\ell^{(N)} - \mu N\right)} \qquad Z = \sum_{\ell, N} e^{-\beta\left(E_\ell^{(N)} - \mu N\right)}$$

$$\phi = -k_B T \ln Z = -pV$$

Oszillátorrendszerrel itt nem játszunk, mert ott fix a „részecskeszám"

N részecskéből álló, nem kölcsönható rendszer nagykanonikus leírása:

ε_r energiaszint, n_r db részecske ezeken a szinteken

$$E = \sum_r \varepsilon_r n_r$$

$$N = \sum_r n_r$$

$$Z = \sum_{n_0, n_1 \ldots n_\infty} e^{-\beta \sum_{r=0}^{\infty} \varepsilon_r n_r + \beta\mu \sum_{r=0}^{\infty} n_r} =$$

$$\sum_{n_0 n_1 \ldots n_\infty} e^{-\beta \sum_r (\varepsilon_r - \mu) n_r} = \prod_{r=0}^{\infty} \left(\sum_{n_r} e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu) n_r} \right) =$$

$$= \begin{cases} F_0 \nearrow \text{fermion: } n_r = 0, 1 & \prod_{r=0}^{\infty} \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}\right) \\ B_0 \searrow \text{bozon } n_r = 0, 1, \ldots, \infty & \text{feltéve, hogy konvergál a } \Sigma: \\ & \left| e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} \right| < 1 \end{cases}$$

$$\prod_{r=0}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}}$$

Állhat elő olyan eset (a kémiai potenciál miatt), amikor az összegzés nem konvergál.

III. 28.

új óra

DGY doktori védése

KIRÁLY VOLT!

Jegyzet Levitől!

n_r, ε_r

(r-edik állapotban)

$$\langle n_r \rangle = \sum_{n_r} \frac{1}{Z} e^{-\beta \sum_r n_r (\varepsilon_r - \mu)}$$

$$\langle n_k \rangle = \sum_{n_r} \frac{1}{Z} e^{-\beta \sum_r n_r (\varepsilon_r - \mu)} \, n_k = -\frac{1}{Z\beta} \sum_{n_r} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} e^{-\beta \sum_r n_r (\varepsilon_r - \mu)} =$$

$$= -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} Z = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon_k} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \pm \sum_r \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}\right)$$

$+$ – D, β – ε

$$\langle n_k \rangle = -\frac{1}{\beta} \pm \frac{1}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \pm e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} (-\beta)$$

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \pm 1}$$

... statisztika (faktor)

$$N = \sum_r \langle n_r \rangle = \sum_r \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} \pm 1}, \quad E = \sum_r \varepsilon_r \langle n_r \rangle$$

sokcsor a spektrum ~ fénytan, integrál ("sűrű")

egyszerűsítés (nagy rendszereknél)

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1}$$

($f(\varepsilon)$ – Fermi-eloszlás)



$V, \; s, \; (2s+1)$

$$\sum_{\varepsilon_r < \varepsilon} 1 = (2s+1) \frac{1}{h^3} \int_{\mathcal{H} < \varepsilon} d\Gamma = (2s+1) \frac{1}{h^3} V \int_{\varepsilon(p) < \varepsilon} d^3p$$

$$= \int_0^{\varepsilon} D(\varepsilon) \, d\varepsilon$$

$$\frac{(2s+1)V}{h^3} \; \frac{4\pi}{3} |p|^3$$

$\varepsilon(|p|) = \varepsilon$

$p \sim \frac{p^2}{2m} = \varepsilon$

$p = \sqrt{2m\varepsilon}$

$$D(\varepsilon) = \frac{d}{d\varepsilon} (2s+1) \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} (2m\varepsilon)^{\frac{3}{2}}$$

$|p| = \varepsilon$ (ultrarel.)

$s = \frac{1}{2}$ (elektron)

$$D(\varepsilon) = 2 \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} \frac{3}{2} (2m\varepsilon)^{\frac{1}{2}} 2m = \frac{V 4\pi (2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

("i.d.g. $s=0$")

$$N = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) \, n(\varepsilon) \, d\varepsilon$$

$$E = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) \, n(\varepsilon) \, \varepsilon \, d\varepsilon$$

$$\Phi = -pV$$

$$-k_B T \ln Z$$

$\ln Z = \frac{1}{r} \ldots$

$= \left[\pm \frac{D_0 \varepsilon^{\alpha+1}}{\alpha+1} \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right) \right]_0^\infty - \int \frac{D_0 \varepsilon^{\alpha+1}}{\alpha+1} \frac{1}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} (-\beta)$

parc. $\quad 0 \qquad\qquad n(\varepsilon)$

$D(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^\alpha$

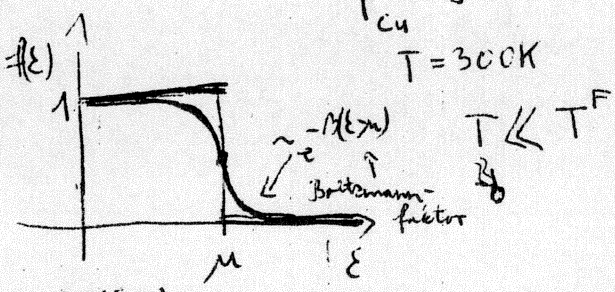
$$= \beta \int_0^\infty \frac{D_0 \varepsilon^{\alpha+1}}{\alpha+1} n(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{\beta}{\alpha+1} \int_0^\infty D(\varepsilon)\, \varepsilon\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{\beta E}{\alpha+1}$$

$$pV = kT \ln Z = \frac{E}{\alpha+1}$$

$$pV = \frac{2}{3} E \qquad \left(\alpha = \tfrac{1}{2}\right)$$

$$p = \frac{2}{3} \frac{E}{V}$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$



$T_{Cu}^F = 80000\,K$

$T = 300\,K$

$T \ll T^F$

β_0

regoshom. (fartok) $\quad f(\varepsilon) = \frac{e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \approx e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} - e^{-2\beta(\varepsilon-\mu)} + \ldots$

$\mu(T=0) = \varepsilon_F$ (amíg be vannak töltve az állapotok)

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^{\mu=\varepsilon_F} D(\varepsilon)\, d\varepsilon = 2 \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3$$

$$\frac{p_F^2}{2m} = \varepsilon_F$$

$(\!(f(\varepsilon) = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \ldots)\!)$

$$\frac{N}{V} = \frac{8\pi}{3} \frac{p_F^3}{h^3}$$

$$\left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{V} h^3\right)^{\frac{1}{3}} = p_F$$

$$\frac{h}{r_0} \sim p_F$$

$\frac{4\pi}{3} r_0^3 N = V$ — kisgömbök

$$r_0 = \left(\frac{V}{N} \frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$N = \frac{2V}{h^3} \frac{4\pi}{3} \left(2m\varepsilon_F\right)^{\frac{3}{2}}$$

Ezzel kiszámolhatnánk $T=0$-nál, ε_F-et

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{N}{V} \frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} h^2 = \varepsilon_F$$

$$E = \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon\, D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{2V}{h^3} 2m^{\frac{3}{2}} \frac{4\pi}{5} \varepsilon^{\frac{5}{2}} =$$

$$= \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{5}\varepsilon_F$$

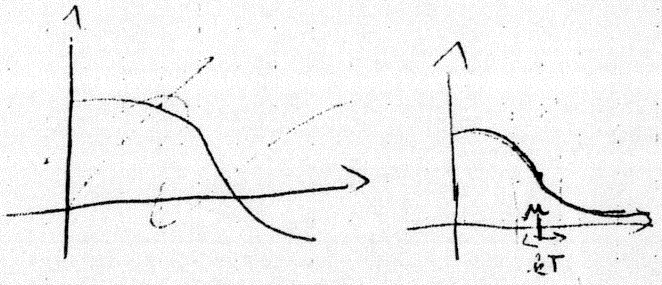
$$\frac{3}{5}\varepsilon_F \cdot N = E$$

$$P_F = \frac{2}{5}\varepsilon_F \frac{N}{V} = \frac{2}{5}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} h^2 \frac{1}{2m}$$

nyomás — szabadmozgás (nullpontú-energiával)

$k_B T_F = \varepsilon_F$

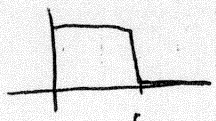
$T_F \sim 10^5\,K$



$T/T_F \ll 1$

extben sorfejtés

$$\int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon)\, f(\varepsilon)\, d\varepsilon =$$



$\Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$

$$I = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} f(\varepsilon)\, d\varepsilon =$$

$\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sim \delta(\varepsilon_F - \varepsilon)$ (közelítő delta)

$$f(\varepsilon) f(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon_0}^{\infty} - \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f(\varepsilon)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}\, d\varepsilon$$

$f(\varepsilon_0) = 0$

$f(\infty) = 0$ ~~feltétellel~~

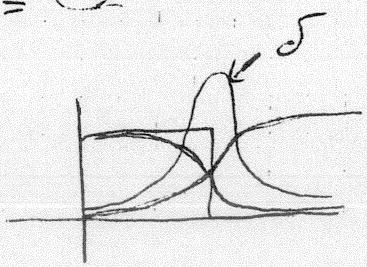
feltételekkel

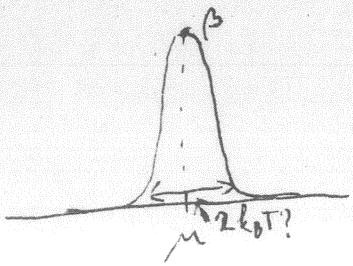
$$\frac{df}{d\varepsilon} = g$$

$$f(\varepsilon) = \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon} g(\varepsilon')\, d\varepsilon'$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \quad | \quad f'(\varepsilon) = \frac{-\beta e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{\left(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1\right)^2} =$$

$$= \frac{-\beta}{\left(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1\right)\left(e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}+1\right)}$$



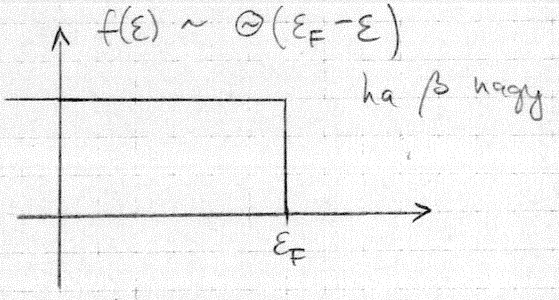


új óra

$T/T_F \ll 1$

$$\int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon)\, f(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

↑ Fermi-eloszlás



$$\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sim \delta(\varepsilon_F - \varepsilon)$$

ha $\varphi(\varepsilon_0) = 0$ ⇓

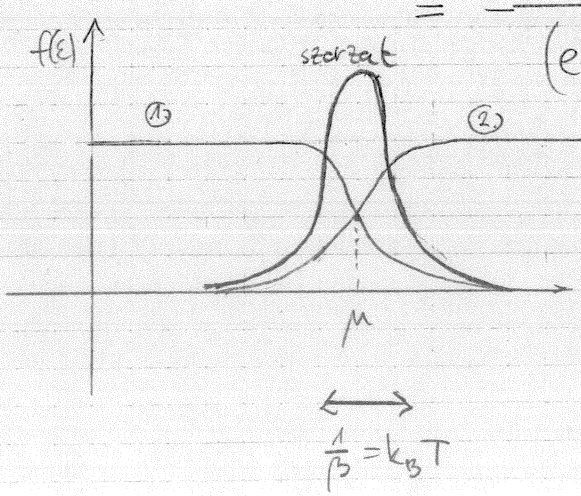
$$I = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{d\varphi}{d\varepsilon} f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \cancel{f(\varepsilon)\varphi(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon_0}^{\infty}} - \int \varphi(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}\, d\varepsilon$$

$$\frac{d\varphi}{d\varepsilon} = g(\varepsilon) \qquad \varphi(\varepsilon) = \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon} g(\varepsilon')\, d\varepsilon'$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \quad ; \quad \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} = -\frac{\beta e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{\left(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1\right)^2} =$$

$$= -\frac{\beta}{\left(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1\right)\left(e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} + 1\right)}$$

(1) (2)



⇒ sorfejtés μ körül

$$\varphi(\varepsilon) = \varphi(\mu) + (\varepsilon-\mu)\varphi'(\mu) + \frac{1}{2}(\varepsilon-\mu)^2\varphi''(\mu) + \dots$$

$$I = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} d\varepsilon \left[\varphi(\mu) + (\varepsilon-\mu)\varphi'(\mu) + \frac{1}{2}(\varepsilon-\mu)^2\varphi''(\mu) + \dots + \frac{1}{n!}(\varepsilon-\mu)^n\varphi^{(n)}(\mu)\right]\frac{df}{d\varepsilon} =$$

$$= \varphi(\mu)\cdot\underbrace{\int_{\varepsilon_0}^{\infty}\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon}_{f(\infty)-f(\varepsilon_0)} + \varphi'(\mu)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}(\varepsilon-\mu)^n d\varepsilon +$$

$f(\infty) = 0$, $f(\varepsilon_0) \approx +1$

kézdítés

$= 0$ ha n páratlan

$$+ \frac{1}{2}\varphi''(\mu)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{df}{d\varepsilon}(\varepsilon-\mu)^2 d\varepsilon$$

n = páros

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{df}{d\varepsilon}\underbrace{(\varepsilon-\mu)^n}_{x}d\varepsilon = -\int_{-\infty}^{+\infty}x^n dx\,\frac{\beta}{(e^{\beta x}+1)(e^{-\beta x}+1)} =$$

$\beta x := y$

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{y^n dy}{\beta^n}\,\frac{1}{(e^{y}+1)(e^{-y}+1)}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy\,\frac{y^n}{(e^{y}+1)(e^{-y}+1)} = 2n!\left(1-2^{-n+1}\right)\zeta(n)$$

ahol $\zeta(n) = \sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{1}{\ell^n}$

Tehát:

$$I = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f(\varepsilon)\frac{d\varphi}{d\varepsilon}d\varepsilon = -\int_{\varepsilon_0}^{\infty}\varphi(\varepsilon)\frac{df}{d\varepsilon}d\varepsilon =$$

$$= \varphi(\mu) + \sum_{k=1}^{\infty} 2\left(1-2^{1-2k}\right)\zeta(2k)\left(k_B T\right)^{2k} \varphi^{(2k)}(\mu)$$

Igazából ez pontosan akkor igaz, ha $\varepsilon_0 \to -\infty$

De igazából lényegesen ez csak az első tagjait számít.

$$\int_{\varepsilon_c}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_{\varepsilon_0}^{\mu} g(\varepsilon)\, d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}\left(k_B T\right)^2 g'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360}\left(k_B T\right)^4 g'''(\mu)$$

$g(\varepsilon) := D(\varepsilon)$ - állapotsűrűség

$$N = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\, d\varepsilon =$$

$$= 4\pi V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2}\, d\varepsilon = \frac{8\pi}{3} V \left(\frac{2m}{h^2}\varepsilon_F\right)^{3/2}$$

$T = 0$

$$\mu_0 = \varepsilon_F = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{2/3}$$

$T = 0$ hőmérsékleten

$$\Rightarrow D(\varepsilon) = \frac{3}{2} N \varepsilon_F^{-3/2} \varepsilon^{1/2}$$

$$D_0 \varepsilon^{1/2} = D(\varepsilon)$$

$$\frac{2}{3} D_0 \varepsilon_F^{3/2} = N$$

Most $T \neq 0$, de kicsi, a sorfejtés magasabb tagjait nem vesszük figyelembe.

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^\mu D(\varepsilon)\, d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D'(\varepsilon) =$$

$$= \frac{2}{3} D_0 \mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{12}(k_B T)^2 D_0 \mu^{-1/2}$$

$$N = \frac{2}{3} D_0 \mu^{3/2} \left(1 + \frac{(k_B T)^2 \pi^2}{8\mu^2} + \dots\right)$$

elosztjuk $N|_{T=0}$-t és $N|_{T\neq 0}$-t ... Persze természete a részecskeszám a két esetben ugyanaz:

$$1 = \left(\frac{\mu}{\varepsilon_F}\right)^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots\right)$$

$$1 = \frac{\mu}{\varepsilon_F} \left(1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots\right)^{2/3} =$$

ez kicsi

$$(1+x)^\alpha \approx 1 + \alpha x + \dots$$

$$= \frac{\mu}{\varepsilon_F} \left(1 + \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots\right)$$

$$\mu = \frac{\varepsilon_F}{1 + \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots} \approx \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots\right)$$

$$\approx \varepsilon_F\left(1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 + \dots\right) = \mu$$

↑

$\varepsilon_F \approx \mu$, így másodrendben helyettesíthetem

Ha negyedrendig végigszámolnánk:

$$\mu = \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 - \frac{\pi^4}{80}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^4 + \dots\right]$$

$$E = \int_0^\infty \underbrace{D(\varepsilon)}_{g(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^{3/2}} \varepsilon f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{2}{5} D_0 \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4}(k_B T)^2 D_0 \mu^{1/2} + \dots =$$

$$= \frac{2}{5} D_0 \mu^{5/2}\left[1 + \frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots\right]$$

↑ ide kell másodrendig

↑ ide elég ε_F

$$E = \frac{2}{5} D_0 \varepsilon_F^{5/2}\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 + \dots\right]^{5/2}\left[1 + \frac{5}{8}\pi^2\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 + \dots\right] \approx$$

$$\approx \frac{2}{5} D_0 \varepsilon_F^{5/2}\left[1 - \frac{5\pi^2}{24}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right]\left[1 + \frac{5}{8}\pi^2\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \approx$$

$$\approx \underbrace{\frac{2}{5} D_0 \varepsilon_F^{5/2}}_{E_0}\left[1 + \left(\frac{5}{8} - \frac{5}{24}\right)\pi^2\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right] = E_0\left[1 + \frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right]$$

E_0 ($T=0$ esetén Fermi-gáz energiája)

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{5}{6}\pi^2 \frac{E_0}{\varepsilon_F} \underbrace{\frac{k_B T}{\varepsilon_F}}_{\frac{T}{T_F}} k_B = \frac{5}{6}\pi^2 \frac{E_0}{\varepsilon_F} \frac{T}{T_F} k_B =$$

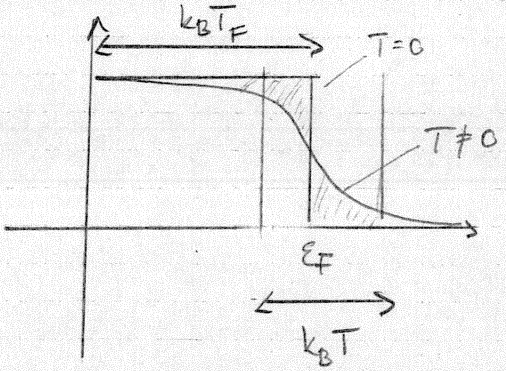
$$E_0 = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

$$= k_B \cdot \frac{\pi^2}{2} N \left(\frac{T}{T_F}\right)$$

↑

nagyon pici

ideális gázzal ilyen nincs



„mozgékony e⁻-ok a Fermi-energia környéki nanmale."

Most általánosan még:

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\mu D(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} k_B T D'(\mu)$$

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon$$

⊖

$$0 = \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\,d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 D'(\mu) =$$

$$= \int_{\varepsilon_F}^{\mu} D(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 D'(\mu) \approx$$

$$\approx (\mu - \varepsilon_F) D(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 D'(\varepsilon_F) + \dots$$

$$\Rightarrow \mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}$$

Ez az általános képlet a kémiai potenciál megváltozására

$$E = \int_0^{\infty} D(\varepsilon)\,\varepsilon\, f(\varepsilon)\,d\varepsilon = \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\,\varepsilon\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \left[\varepsilon D(\varepsilon)\right]'_{\varepsilon=\varepsilon_F}$$

$$E_0 = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\,\varepsilon\,d\varepsilon$$

$$E - E_0 = \int_{\varepsilon_F}^{\mu} D(\varepsilon)\,\varepsilon\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \left[D(\varepsilon_F) + \varepsilon_F D'(\varepsilon_F)\right]$$

$$E - E_0 \approx (\mu - \varepsilon_F) D(\varepsilon_F)\,\varepsilon_F + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \left[D(\varepsilon_F) + \varepsilon_F D'(\varepsilon_F)\right]$$

$$E - E_0 = -\frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)} D(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \left[D(\varepsilon_F) + \varepsilon_F D'(\varepsilon_F)\right]$$

$$E = E_0 + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D(\varepsilon_F) \Rightarrow C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T D(\varepsilon_F)$$

fermionok fajhője

új óra

$\varepsilon_n + \mu_B H \quad N_-$

ε_n

$\varepsilon_n - \mu_B H \quad N_+$

Fermi-rendszer energiaszintje mágneses tér hatására felhasadnak

$$M = -\mu_B (N_+ - N_-)$$

$$N_- = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu_B H - \mu)} + 1}$$

$$N_+ = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n + \mu_B H - \mu)} + 1}$$

fordított előjelek, mert csak

$$M = -\mu_B (N_+ - N_-) = \mu_B \left[\int \frac{D(\varepsilon)\, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu_B H - \mu)} + 1} - \right.$$

$$\left. \int \frac{D(\varepsilon)\, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon + \mu_B H - \mu)} + 1} \right] = \mu_B \int \left[D(\varepsilon + \mu_B H) - D(\varepsilon - \mu_B H) \right] f(\varepsilon,$$

$$\chi \overset{\chi = \frac{\partial M}{\partial H}}{=} \mu_B \int 2D'(\varepsilon) \cdot \mu_B f(\varepsilon)\, d\varepsilon = 2\mu_B^2 \int D'(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

$T = 0$

$$\chi = 2\mu_B^2 \int_0^{\varepsilon_F} D'(\varepsilon)\, d\varepsilon = 2\mu_B^2 D(\varepsilon_F) =$$

$$= 2\mu_B^2 \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon_F^{1/2}$$

$$N = \int D(\varepsilon) f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{V}{h^3} \frac{8\pi}{3} (2m\varepsilon_F)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \quad \chi = 2\mu_B^2 \frac{3}{2} \frac{N}{\varepsilon_F} = 3\frac{\mu_B^2 N}{k_B T_F}$$

$\varepsilon_F = k_B T_F$

$T \to \infty$

$T \gg T_F$ $\qquad f(\varepsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \approx e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$ klasszikus Boltzmann-faktor

$$\chi = 2\mu_B^2 \int_0^\infty D'(\varepsilon)\, e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} d\varepsilon \overset{\text{parc. int}}{=}$$

$$= 2\mu_B^2 \Big\{ \underbrace{\left[D(\varepsilon) e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} \right]_0^\infty}_{0} + \beta \underbrace{\int_0^\infty D(\varepsilon)\, e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} d\varepsilon}_{N \text{ (magas hőmérsékletű)}} =$$

$$= 2\mu_B^2 \beta N = \frac{2\mu_B^2 N}{k_B T}$$

magas hőmérsékletű ideális gáz szuszceptibilitása

$T \neq 0$, $T \ll T_F$

Sommerfeld sorfejtés

$$\chi = 2\mu_B^2 \int_0^\infty D'(\varepsilon) f(\varepsilon) = 2\mu_B^2 \left[\int_0^\mu D'(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \cdot D''(\mu) \right] =$$

$$= 2\mu_B^2 \left[D(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D''(\mu) \right] =$$

$$D(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^{1/2}, \quad D'(\varepsilon) = D_0 \frac{1}{2} \varepsilon^{-1/2}, \quad D''(\varepsilon) = -D_0 \frac{1}{4} \varepsilon^{-3/2}$$

$$= 2\mu_B^2 \left[D_0 \mu^{1/2} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D_0 \frac{1}{4} \mu^{-3/2} + \dots \right] =$$

$$= 2\mu_B^2 D_0 \mu^{1/2} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right\} =$$

$$\mu = \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right)$$

$$= 2\mu_B^2 D_0 \varepsilon_F^{1/2} \left(1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right) \left(1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right) =$$

$$= \underbrace{2\mu_B^2 D_0 \varepsilon_F^{1/2}}_{\chi(0)} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots \right\} = \chi(T)$$

Bozonok

$$n_B(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \qquad \text{Bose - eloszlás}$$

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1} \qquad \varepsilon_0 = 0$$

$$Z = \prod_{k=0}^{\infty} \left(1 + e^{-(\varepsilon_k - \mu)\beta} + e^{-(\varepsilon_k - \mu)\beta \cdot 2} + \dots \right)$$

Ez divergál, ha $\varepsilon_0 = 0$ -nál $\mu \to 0$

$\Rightarrow$ nem lesz igaz a bozonokra fennálló eloszlásképlet

Bose - kondenzáció

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1} = \underbrace{\frac{g_0}{e^{-\beta\mu} - 1}}_{N_0} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)} - 1}}_{N'}$$

Azt várjuk, hogy $N_0 \ll N'$, $N' \approx N$

$$N' = \int_0^{\infty} n_B(\varepsilon) D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^{\infty} \frac{D_0 \varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}\, d\varepsilon =$$

$-\beta\mu =: \alpha$

$\beta\varepsilon =: x$

$$= \int_0^{\infty} \frac{D_0 x^{1/2} \beta^{-1/2}}{e^{x+\alpha} - 1} \frac{dx}{\beta} = (k_B T)^{3/2} D_0 \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha} - 1}\, dx$$

$$\frac{1}{1-q} = 1 + q + q^2 + \dots$$

$$\frac{1}{e^{x+\alpha} - 1} = \frac{1}{e^{x+\alpha}\left(1 - e^{-x-\alpha}\right)} = \underbrace{e^{-(x+\alpha)}\left(1 + e^{-(x+\alpha)} + e^{-2(x+\alpha)} + \dots\right)}_{\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n(x+\alpha)}}$$

Ezt visszaírva:

$$N' = (k_B T)^{3/2} D_0 \int_0^{\infty} dx\, x^{1/2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n(x+\alpha)} = (k_B T)^{3/2} D_0 \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \underbrace{x^{1/2} e^{-nx}}_{y}\, dx\, e^{-n\alpha} =$$

$$= (k_B T)^{3/2} D_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\alpha}}{n^{3/2}} \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-y} y^{1/2}\, dy}_{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}}$$

$$F_{3/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha} - 1}\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\alpha}}{n^{3/2}}$$

$$N' = (k_B T)^{3/2} D_0 F_{3/2}(\alpha) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \qquad \alpha = -\mu/\beta$$

$$F_{3/2}(0) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \cong 2{,}61$$

$F_{3/2}(\alpha)$ α-ban monoton csökkenő fv., mely maximumát a 0-ban veszi fel

$$\Rightarrow N'_{max} = (k_B T)^{3/2} D_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$N - N' = N_0$$

Ha $N > N'_{max}$, akkor a kiáramló részecskék csak a nullenergiás állapotban lehetnek

Ha $N = N'_{max}$, még éppen el tudom helyezni az összes részecskét a nem nullánkra

$$N = N'_{max} = (k_B T_c)^{3/2} D_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

↑ kritikus hőmérséklet

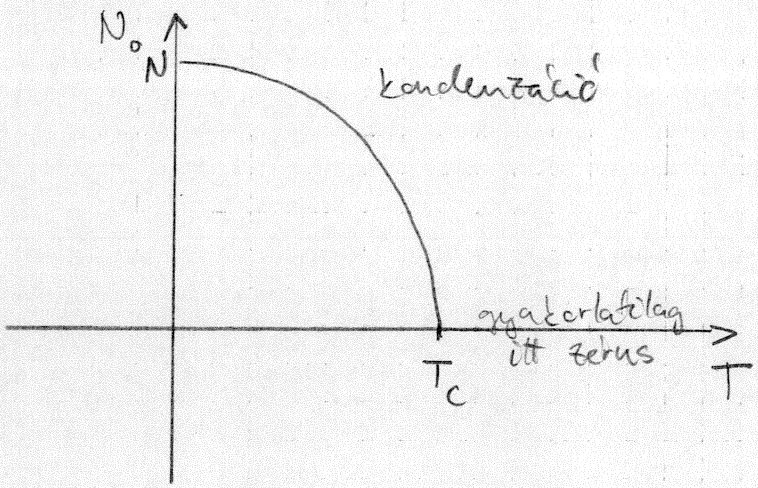
$T < T_c$

$N' = (k_B T)^{3/2} D_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$ marad, mert $F_{3/2}$ már elérte a maximumát

μ nullává válik

$$\Rightarrow \quad N_0 = N - N' = \left(T_c^{3/2} - T^{3/2}\right) k_B^{3/2} D_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) =$$

$$= N\left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right)$$



$T = 0$ -nál az összes bozon a nullenergiás állapotba gyűlik

$\Rightarrow$ Olyan nagy kvantumállapot lesz, ami már makroszkópikus

A makroszkopikus kvantumjelenségeknek általában ez az alapja

új óra

IV. 6.

^4He volt az első, aminél Bose-kondenzációt figyeltek meg. $T = 2{,}17\ K$

$$E = \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) n_B(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^\infty D_0 \varepsilon^{1/2} \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}\, d\varepsilon =$$

↑ a nullenergiájú részecskék energiája nulla

$$= D_0 \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}\, d\varepsilon = D_0 (k_B T)^{5/2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}\, dx}{e^{x+\alpha}-1} =$$

$$x := \beta\varepsilon$$

$$\alpha := -\mu\beta$$

$$e^{-(x+\alpha)} \frac{1}{1-e^{-(x+\alpha)}} = \sum_{n=1}^\infty e^{-n(x+\alpha)}$$

$$= D_0 (k_B T)^{5/2} \sum_n e^{-n\alpha} \int_0^\infty x^{3/2} e^{-nx}\, dx \quad (y = nx) = D_0 (k_B T)^{5/2} \sum_n \frac{e^{-n\alpha}}{n^{5/2}} \underbrace{\int_0^\infty y^{3/2} e^{-y}\, dy}_{\Gamma(\frac{5}{2})}$$

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

$$F_{5/2}(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\frac{5}{2})} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}\, dx}{e^{x+\alpha}-1} = \sum_{n=1}^\infty e^{-\alpha n} \frac{1}{n^{5/2}}$$

$$= \boxed{D_0 (k_B T)^{3/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) F_{5/2}\left(-\frac{\mu}{k_B T}\right) = E}$$

Ha $E\,(T < T_c) \Rightarrow E = D_0 (k_B T)^{5/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) F_{5/2}(0)$

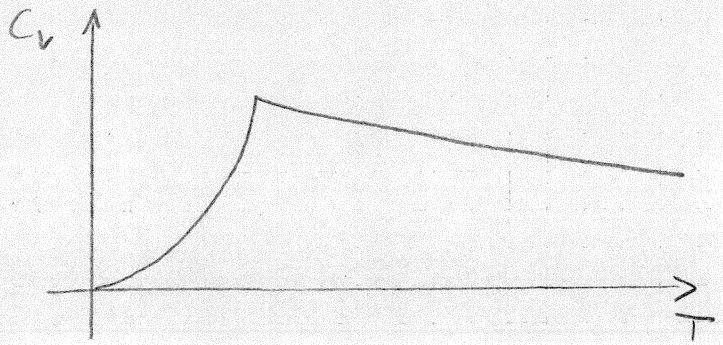
$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = D_0 k_B (k_B T)^{3/2} \frac{5}{2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) F_{3/2}(0) =$$

$$N = D_0 (k_B T_c)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) F_{3/2}(0)$$

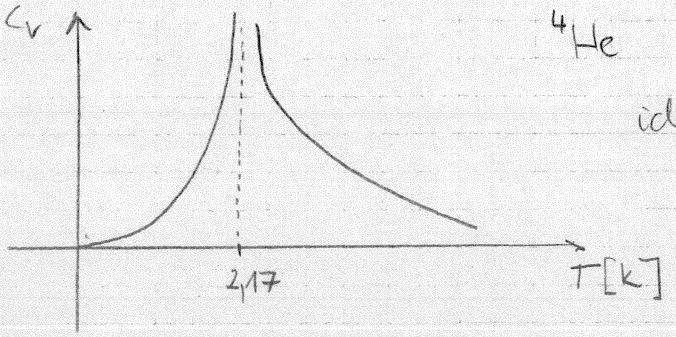
$$= k_B N \frac{(k_B T)^{3/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) F_{5/2}(0) \frac{5}{2}}{(k_B T_c)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) F_{3/2}(0)} = k_B N \underbrace{\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}}_{N'} \cdot \underbrace{\frac{15}{4} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}}_{C}$$

constans

$$C_V = k_B N' \cdot C$$



^4He -re



^4He nem tekinthető ideális Bose-kondenzációnak

=

$$\phi = -pV = -k_B T \ln Z$$

$$Z = \prod_n \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_n - \mu)}\right)^{-1}$$ Bose-Einstein

$$\ln Z = -\sum_n \ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_n - \mu)}\right) = -\int_0^\infty D(\varepsilon) \ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right) d\varepsilon =$$

$$f' \qquad g$$

$$= [fg]_0^\infty - \int_0^\infty fg' = \left[-D_0 \frac{\varepsilon^{\alpha+1}}{\alpha+1} \ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right)\right]_0^\infty +$$

$$= 0$$

$$D(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^\alpha$$

$$+\beta \int_0^\infty \frac{D_0 \varepsilon^{\alpha+1}}{\alpha+1} n_B(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

$$\Rightarrow \quad \phi = -\frac{E}{\alpha+1} = -pV$$

$$\alpha = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \quad pV = \frac{2}{3} E = \frac{2}{3} D_0 (k_B T)^{5/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) F_{5/2}(\alpha)$$

$$D_0 = 4\pi (2m)^{3/2} \frac{V}{h^3}$$

$$\Rightarrow p = \frac{2}{3} 4\pi (2m)^{3/2} \frac{1}{h^3} (k_B T)^{5/2} F_{5/2}(\alpha) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)$$

Ha $T < T_c$: $F_{5/2}(0) = \zeta\left(\frac{5}{2}\right)$

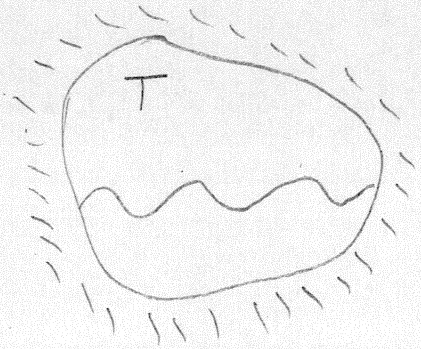
Nincs térfogatfüggés a nyomásnál. Normál gáznál az ilyesmi pl. telített vízgőznél fordul elő (~ ott is tudnak kondenzálódni a részecskék... eleve innen a név...)

$$S = \frac{\partial \phi}{\partial T} = \frac{1}{\alpha+1}\frac{\partial E}{\partial T} = \frac{2}{3} C_V \sim T^{3/2}$$

$T=0$ -ban $S=0$

Azaz 0 hőmérsékleten 1 állapotban van az összes bozon, nem egy többszörösen degenerált állapot.

Fotonok / fononok rendszere



fotonok dobozban

ω_k, $\hbar\omega_k$

diszperzió $\omega = c|\underline{k}|$

$$\varepsilon = \hbar\omega = \underbrace{\hbar|\underline{k}|}_{|\underline{p}|} c = |\underline{p}| c$$

Néhány órával ezelőtt nézegettük az oszcillátorokat:

ie: kanonikus $$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = e^{-\beta\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\hbar\omega\beta}}$$

$$Z = \prod_k Z_k = \prod_k \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_k \frac{1}{2}}}{1-e^{-\hbar\omega_k\beta}} \right) =$$

$$F = -k_B T \ln Z = \sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k + \sum_k k_B T \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega_k}\right)$$

$\varepsilon_k = \hbar\omega_k$

$$\phi = -k_B T \ln \mathcal{Z} = k_B T \sum_k \ln\left(1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right) \qquad \mu = 0$$

nagykanonikus

oszillátorrendszerek

$\varepsilon_k = \hbar\omega_k$

$\mu = 0$ miatt egy különleges állapotban lévő bozonként fogható fel

foton spinje is stimmel $s = 1$, egész

$s_z = 0$ állapotát az elején miatt ezt nem veszi fel $\Rightarrow$ csak két állapota van

két polarizációja

$$\int_{\mathcal{H}<E} d\Gamma / h^3 = \frac{1}{h^3} \frac{4\pi}{3} |p|^3 V = \frac{4\pi}{3} \frac{\varepsilon^3}{c^3} \frac{V}{h^3}$$

$$D(\varepsilon) = 2 \frac{4\pi V \varepsilon^2}{h^3}$$

↑ polarizáció miatt

$$D(\varepsilon) d\varepsilon = g(\omega) d\omega$$

$$\frac{8\pi V \varepsilon^2}{h^3 c^3} d\varepsilon = g(\omega) d\omega \quad , \quad \varepsilon = \hbar\omega$$

$$\frac{8\pi V \hbar^2 \omega^2}{h^3 c^3} \hbar d\omega = g(\omega) d\omega$$

$$g(\omega) = \frac{8\pi V \omega^2}{c^3 (2\pi)^3} = \frac{V\omega^2}{c^3 \pi^2}$$

$$F - F_0 = k_B T \int_0^\infty g(\omega) d\omega \ln\left(1 - e^{-\beta \hbar \omega}\right)$$

F_0: nullpont tag

$$-S = \frac{\partial F}{\partial T} = k_B \int_0^\infty g(\omega) d\omega \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) +$$

$$- k_B T \int_0^\infty d\omega\, g(\omega) \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} e^{-\beta\hbar\omega} \hbar\omega \frac{1}{k_B T^2}$$

$$F = E - TS \quad \Rightarrow \quad E = F + TS = E_0 + \int_0^\infty d\omega\, g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

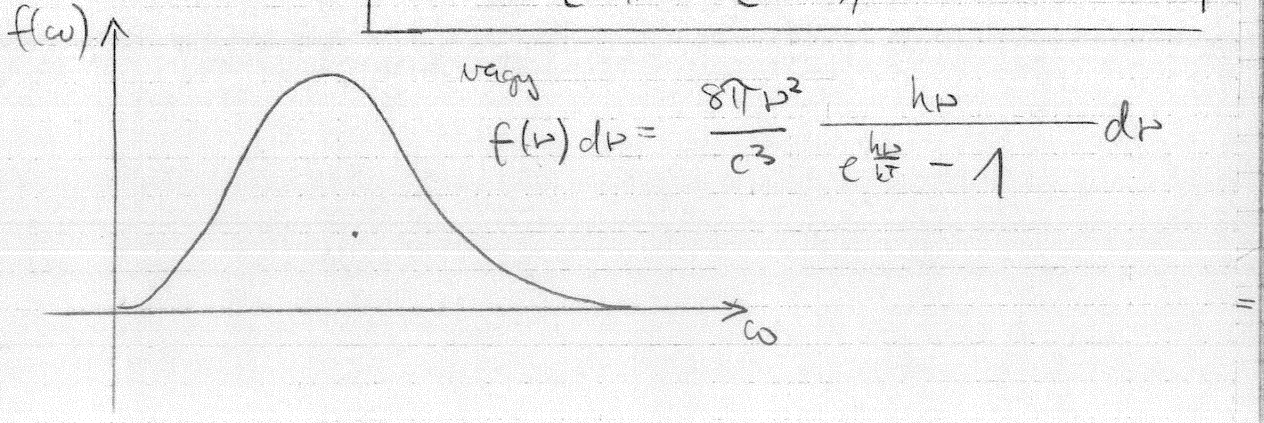
$\hbar\omega$: 1 oszcillátor energiája

$g(\omega)$: oszcillátorok száma

$\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$: Bose-Einstein statisztika ($\varepsilon = \hbar\omega$, $\mu = 0$)

$\frac{E}{V} \sim \int f(\omega) d\omega$: energiasűrűség $(\omega, \omega + d\omega)$ között

$$f(\omega) = \frac{\omega^2}{c^3 \pi^2} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$ Planck-fv.



vagy

$$f(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = -\frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) d\omega = \ldots = \frac{E/V}{(\alpha + 1)}$$

parciál

$D(\varepsilon) = D_0 \varepsilon^{\alpha} = D_0 \varepsilon^2$ fotongáz

$$\Rightarrow \quad p = \frac{1}{3}\frac{E}{V}$$

$$p = \frac{1}{3}\int_0^\infty \frac{\omega^2}{c^3\pi^2}\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\,d\omega =$$

$$x := \beta\hbar\omega$$

$$= \frac{1}{3\beta}\frac{1}{\beta^3\hbar^3}\int_0^\infty \frac{x^2}{c^3\pi^2}\frac{x}{e^x-1}\,dx = (k_B T)^4 \frac{1}{3\hbar^3 c^3\pi^2}\int_0^\infty \frac{x^3\,dx}{e^x-1}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}\,dx = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty e^{-\overset{y}{\tilde{x}}n} x^3\,dx = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4}\underbrace{\int_0^\infty e^{-y} y^4\,dy}_{\Gamma(5)} =$$

$$= \zeta(4)\Gamma(5)$$

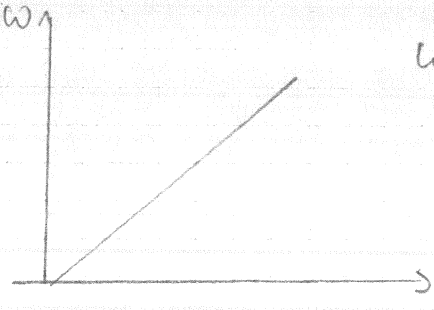
$$= (k_B T)^4 \frac{1}{3\hbar^3 c^3\pi^2}\, 8\,\zeta(4) \qquad \boxed{p \sim T^4}$$

látszik $p \sim T^3$ (he?) mint ált. a Bose-gázoknál

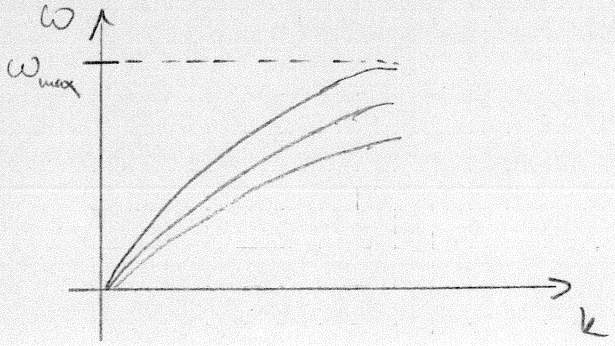
új dia

IV. 11.

fotan:



fononok



$$\frac{1}{c^3} := \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_{tr}^3}$$

fononoknál így vesszük össze a módusokat, hogy a fotonokéhoz hasonló képletet kapjunk

$$k_B T_D = \hbar \omega_{max}$$

↑ Debye-hőmérséklet (fotonoknál ez végtelen, fononoknál nem)

$$\int_0^{\omega_{max}} d\omega\, g(\omega) = \int_0^{\omega_{max}} \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega \overset{!}{=} \underbrace{3L}_{\text{atomok koordinátáinak száma}}$$

$$\frac{V \omega_{max}^3}{\pi^2 c^3 3} = 3L$$

$$E = E(0) + \int_0^{\omega_{max}} d\omega\, g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = E(0) + \int_0^{\omega_{max}} d\omega \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} =$$

$$x := \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

$$= E(0) + \frac{V}{\pi^2 c^3} (k_B T)^4 \frac{1}{\hbar^3} \int_0^{T_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} =$$

ha $T_D/T \gg 1 \quad \Rightarrow T \ll T_D$

felső határba a végtelen beírható

$$\Rightarrow E = E(0) + \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{(kT)^4}{\hbar^3} \frac{\pi^4}{15} \qquad E \sim T^4 \qquad C \sim T^3$$

ha $T_D/T \ll 1 \quad \Rightarrow T \gg T_D$

$$e^x - 1 \approx x$$

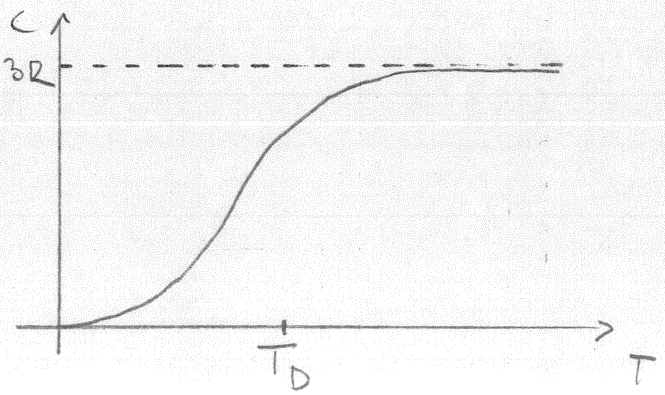
$$\frac{x^3}{x} = x^2$$

$$\Rightarrow E = E(0) + \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{(kT)^4}{\hbar^3} \int_0^{T_D/T} dx\, x^2 =$$

$$= E(0) + \frac{V}{3\pi^2 c^3} \frac{(kT)^4}{\hbar^3} \cdot \left(\frac{T_D}{T}\right)^3 =$$

$$= \frac{1}{3} kT \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega_{max}^2 = kT \cdot 3L \quad \Rightarrow C = 3L \cdot k_B$$

Magas hőmérsékleten gyakorlatilag gáznak látjuk, ekvipartíció



Ezek voltak a fononok.

Véget is vetünk most az ideális kvantumgázoknak.

Malcolm Godwell: Tipping Point

Spinrendszerek

A statisztikus fizika paradigmaja

$$\mathcal{H} = -H \sum_{i=1}^{N} s_i \qquad s_i = \pm 1$$

H: külső mágneses tér; s_i: spin

Ez csak egy egyszerű kép (ø giromágneses faktor + egyebek)

N_+, N_- — N_+ ↑, N_- ↓

$$E = -HN_+ + HN_- = -HM = -HNm$$

m: fajlagos mágnesezettség

$$N = N_+ + N_-$$

$$\varepsilon = \frac{E}{NH} = -m$$

$$N_+ = \frac{-E/H + N}{2} = \frac{N}{2}(1-\varepsilon)$$

$$N_- = \frac{N + E/H}{2} = \frac{N}{2}(1+\varepsilon)$$

Mikrokanonikusan:

$$\Omega = \frac{N!}{N_+!\,N_-!}, \quad \ln\Omega = N\ln N - N - N_+\ln N_+ + N_+ - N_-\ln N_- + N_- =$$

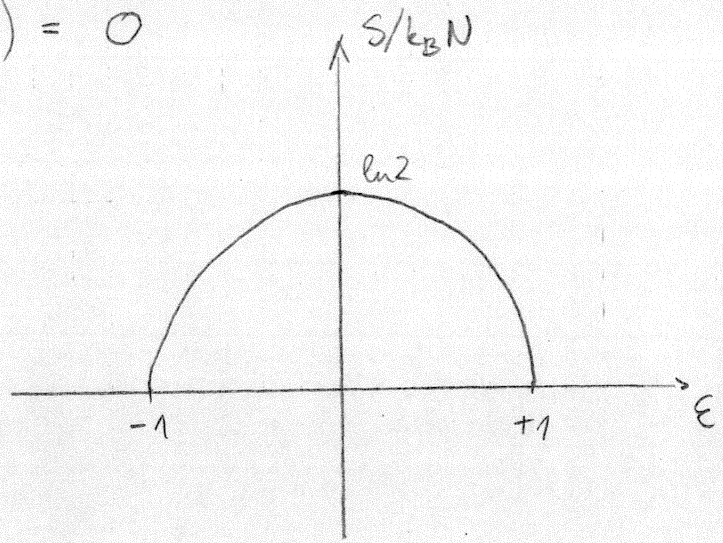
$$= N\ln N - \frac{N}{2}(1-\varepsilon)\ln\frac{N}{2}(1-\varepsilon) - \frac{N}{2}(1+\varepsilon)\ln\frac{N}{2}(1+\varepsilon)$$

$$S = k_B N\left[\ln 2 - \frac{1}{2}(1-\varepsilon)\ln(1-\varepsilon) - \frac{1}{2}(1+\varepsilon)\ln(1+\varepsilon)\right]$$

$$-1 \le \varepsilon \le 1$$

$$S(\varepsilon=0) = k_B N \ln 2 = k_B \ln(2^N)$$

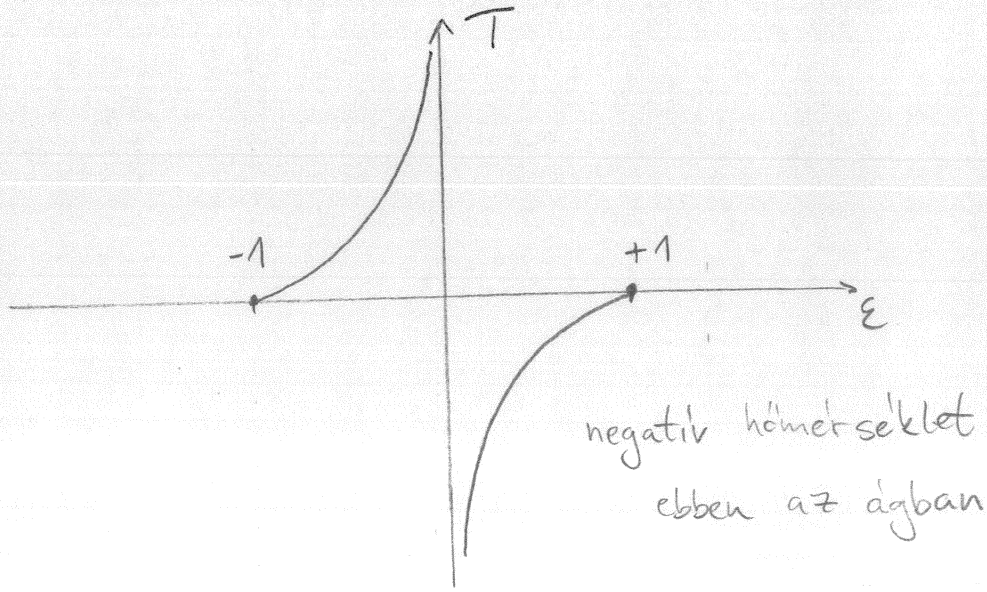
$$S(\varepsilon=\pm 1) = 0$$



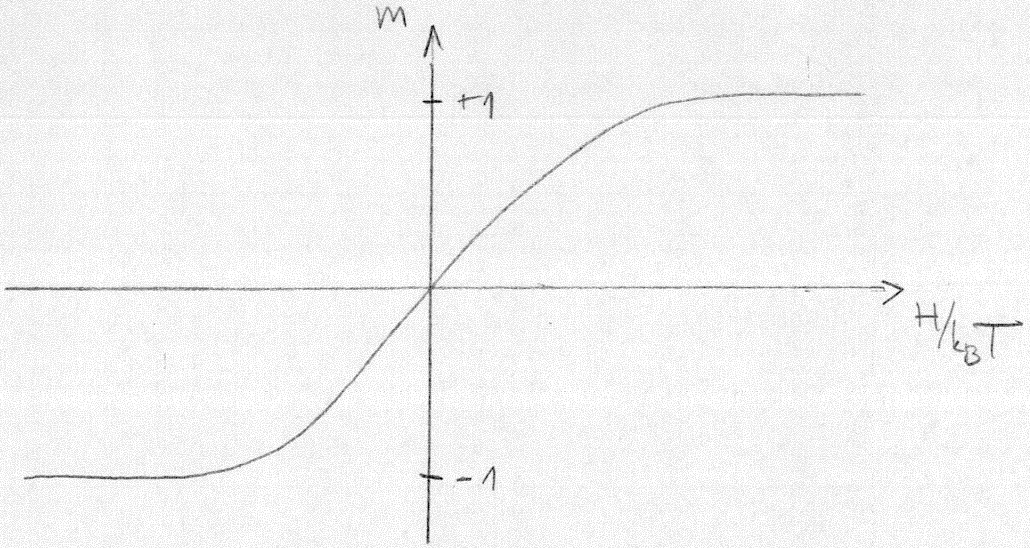
$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{NH}\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} =$$

$$= \frac{N k_B}{NH}\left[\frac{1}{2}\ln(1-\varepsilon) + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\ln(1+\varepsilon) - \frac{1}{2}\right].$$

$$\frac{1}{T(\varepsilon)} = \frac{k_B}{2H}\ln\left(\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right) = \frac{k_B}{2H}\ln\left(\frac{1+m}{1-m}\right)$$



$$\Rightarrow \varepsilon = -m = -\text{th}\left(\frac{2H}{k_B T}\right)$$



Mivel kapcsolatos a negatív hőmérséklet?

- Ha $\Omega \sim E^{\alpha f}$ f - szabadsági fokok száma

$$\Rightarrow S \sim \alpha f k_B \ln E$$

$$\Rightarrow \frac{1}{T} \sim \frac{\alpha f k}{E} \Rightarrow T \sim \frac{E}{k_B \alpha f}$$ ez a szokásos viselkedés

- Ha $\Omega \sim E^{\alpha f} e^{E/E_0}$

$$\ln \Omega \sim \alpha f \ln E + \frac{E}{E_0}$$

$$\frac{1}{k_B T} \sim \frac{\alpha f}{E} + \frac{1}{E_0} \Rightarrow k_B T \sim \frac{E}{\alpha f + E/E_0} \xrightarrow{\text{ha } E \text{ nagy}} E_0$$

$\Rightarrow$ kapunk egy maximális hőmérsékletet $k_B T_{max} \sim E_0$

- Negatív hőmérséklet dai: korlátos energia, energia növelésével csökken az állapotok száma

spinrendszereket emiatt hűtésre lehet használni

kanonikus sokaságban ugyanezt

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{s_i\}} e^{\beta H \sum_{i=1}^{N} s_i} = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^{N} e^{\beta H s_i} =$$

↑ összes lehetséges spinkonfigurációra

$$= \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{s_i = \{-1,+1\}} e^{\beta H s_i} \right) = \prod_{i=1}^{N} 2\mathrm{ch}(\beta H) = \left(2\mathrm{ch}(\beta H)\right)$$

$$F = -k_B T N \ln\left(2\mathrm{ch}(\beta H)\right)$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -NH\,\mathrm{th}\left(H/k_B T\right)$$

$$M = \frac{\partial}{\partial (H\beta)} \ln Z = \frac{\frac{\partial}{\partial(\beta H)} Z}{Z} = \frac{\sum_{\{s_i\}} \sum_i s_i e^{\beta H \sum_i s_i}}{\sum_i e^{\beta H \sum_i s_i}} =$$

$$= N\,\mathrm{th}\left(H/k_B T\right)$$

De láttuk a mikrokanonikusból, hogy negatív T-ket is beírhatunk, amit alapból nem gondolnái

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = k_B N \frac{\left(H/k_B T\right)^2}{\mathrm{ch}^2\left(H/k_B T\right)}$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{N}{k_B T} \frac{1}{ch^2(H/k_B T)} \qquad \chi \sim \frac{N}{k_B T}$$

~ Curie - tv.

A szuszceptibilitás a hőmérséklet reciprokával változik.

Korábbról tudjuk:

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z = \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 = -\frac{\partial E}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial E}{\partial T} = kT^2 C \sim N$$

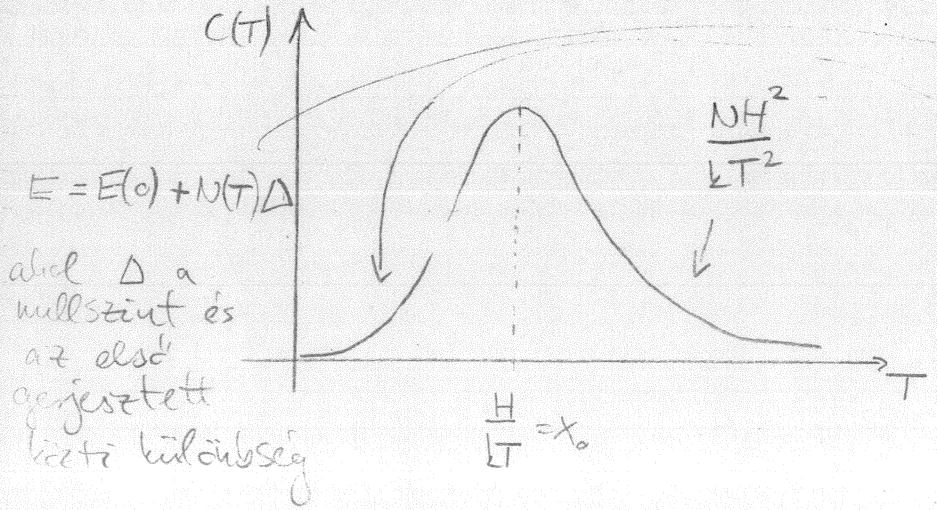
Ha a fajhő divergál, azt észrevesszük
⇒ fázisátalakulásnál lesz fontos

$$\frac{\partial^2}{\partial (H\beta)^2} \ln Z = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = kT \frac{\partial M}{\partial H} = kT\chi \sim N$$

C és χ "örködnek" a termodinamika stabilitásán

szórás $\sim N^{1/2}$

Ha nem így történik, akkor termodinamikailag nem írható le a rendszer



$E = E(0) + N(T)\Delta$

ahol Δ a nullszint és az első gerjesztett szint különbség

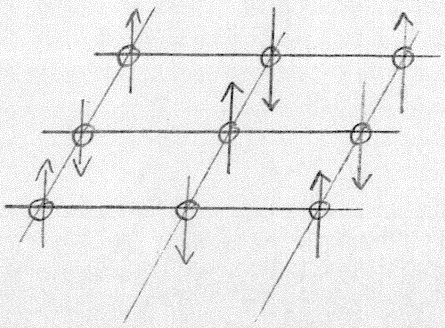
$$E - E_0 = N e^{-\Delta/kT} \Delta$$

$$\Rightarrow C = \frac{N\Delta^2}{kT} e^{-\Delta/kT}$$

ahol x_0: $x_0 = cth(x_0)$

Ising modell (1 dimenziós)

Rácsunk van, a rácspontokon spinek állnak.



$\mathcal{J}_{ij} S_i S_j$

$\mathcal{J}_{ij}$ csatolási mátrix

S_i	S_j	$S_i S_j$
+1	+1	+1
−1	+1	−1
+1	−1	−1
−1	−1	+1

$$H = \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} S_i S_j$$

$\mathcal{J}_{ij} > 0 \Rightarrow$ Jobban szereti, ha ellentétesen állnak a spinek

$\mathcal{J}_{ij} < 0 \Rightarrow$ Jobban szereti, ha azonosan állnak a spinek.

Ferromágnes: $H = -\sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J} S_i S_j$

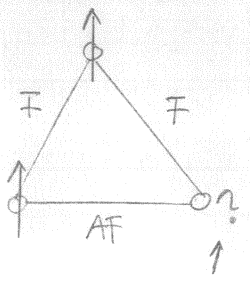
↳ Csak a szomszédokra szummázunk

$\mathcal{J}$-től függ, hogy ferromágneses vagy antiferromágneses modell

Antiferromágnes: $H = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J} S_i S_j$

Spinüveg: frusztrált állapot, pl.:

Nagyobb rendszerre nagyon sok kb. azonos energiájú állapot van.

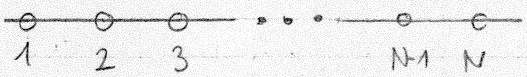


Semmi sem jó igazán

Elég univerzális modell, pl. emberek vélemények

1 dimenziós modell:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}$$



Lehet periodikus a határfeltétel.

$N \to \infty$ esetén határfeltételtől függetlenül ugyanolyan termodinamikai viselkedést kell mutatniuk.

$$Z = \sum_{\{S_1 \dots S_N\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}} = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}} =$$

2^N db konfiguráció

$$= \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta J \left[\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+1} + S_{N-1} S_N\right]}$$

$$Z_N = \underbrace{\sum_{\{S_1 \dots S_N\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+1}}}_{Z_{N-1}} \underbrace{\left(e^{\beta J S_{N-1}} + e^{-\beta J S_{N-1}} \right)}_{\text{Független } S_{N-1} \text{ értékétől (+1-re és -1-re ugyanaz)}} = Z_{N-1}\, 2\,\mathrm{ch}(\beta J)$$

$$Z_1 = 2 \quad \Rightarrow \quad Z_N = 2^N \,\mathrm{ch}^{N-1}(\beta J)$$

Olyan, mint a független spinekből álló rendszer állapotösszege.

$$E(T) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(N \ln 2 + (N-1) \ln \mathrm{ch}(\beta J) \right) = -(N-1) J \,\mathrm{th}(\beta J)$$

$T \to 0 \qquad E(T) = -(N-1)J$

$T \to \infty \qquad E(T) = 0$

$$S = k_B \ln Z + \frac{1}{T} E = N k_B \ln 2 + (N-1) k_B \ln \mathrm{ch}(\beta J) - (N-1) k_B \beta J \,\mathrm{th}($$

$T \to 0 \qquad S \approx k_B \ln 2$

↑

2 alapállapot van: mindenki vagy fölfele vagy lefele áll. (Degenerált alapállapot, nem igaz a III. főtt étel)

$T \to \infty \qquad S \approx (N-1) k_B \ln 2$

Korrelációs függvény: $C_k(r) = \langle S_k S_{k+r} \rangle =$

$$= \sum_{\{S_1, \dots S_N\}} S_k S_{k+r} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}} \Big/ Z_N$$

$$Z_N = \sum_{\{S_1, \dots, S_N\}} e^{\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1}} \Big|_{J_i = J} = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \mathrm{ch}(\beta J_i)$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_k} \sum_{\{S_1, \dots S_N\}} e^{\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1}} = \sum_{\{S_1, \dots S_N\}} S_k S_{k+1} e^{\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1}}$$

Mégegyszer deriválva J_{k+1} szerint:

S_{k+1}^2 lesz, ami 1 $\Rightarrow$ $S_k S_{k+2}$ marad.

Sok deriválással $\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}}$ - ig:

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} \cdot \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_{k+r-2}} \cdot \dots \cdot \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \cdot \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_k} Z_N$$

Ugyanakkor: $\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial J_k} Z_N = \text{th}(\beta J_k) Z_N$

Sok deriválással: $\prod_{i=k}^{k+r-1} \text{th}(\beta J_i)\, Z_N$

J_i-ket egyenlővé téve: $\text{th}^r(\beta J)$

$$C_k(r) = e^{r \ln \text{th}(\beta J)} := e^{-r/\xi} \qquad \xi: \text{korrelációs hossz}$$

$$\xi = \frac{1}{|\ln \text{th}(\beta J)|}$$

$$\left.\begin{aligned} \beta J \to 0 &\Rightarrow \xi = 0 \\ \beta J \to \infty &\Rightarrow \xi \to \infty \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

Magas hőmérsékleten össze-vissza állhat a spinek, alacsonyon pedig ugyanúgy

1D-s Ising modell nem 0 mágneses térben

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} + h \sum_{i=1}^{N} S_i \qquad \text{ahol } S_{N+1} := S_1 \text{ ciklikus határfeltétel}$$

$$Z_N = \sum_{\{S_1,\dots S_N\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} + \frac{\beta h}{2} \sum_{i=1}^{N} (S_i + S_{i+1})}$$

Transzfermátrix:

$$T_{SS'} = e^{\beta J S S' + \frac{\beta h}{2}(S+S')} \qquad \begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}$$

$$Z_N = \sum_{\{S_1,\dots S_N\}} T_{S_1 S_2} T_{S_2 S_3} \cdots T_{S_i S_{i+1}} \cdots T_{S_N S_{N+1}} =$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} T_{S_1 S_2} \cdot T_{S_2 S_3} \cdots T_{S_N S_{N+1}} = \sum_{S_1} \left(T^N\right)_{S_1 S_2} =$$

$$= \mathrm{Sp}\, T^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+h)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda^2 - (T_{++} - T_{--})\lambda + (T_{++}T_{--} - T_{-+}T_{+-}) = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda e^{\beta J} 2\,\mathrm{ch}(\beta J) + 2\,\mathrm{sh}(2\beta J) = 0$$

$$\lambda_{12} = \frac{2\,\mathrm{ch}\, e^{\beta J} \pm \sqrt{4e^{2\beta J}\,\mathrm{ch}^2(\beta h) - 2\,\mathrm{sh}(2\beta J)}}{2}$$

ez mindig pozitív

$$Z_N = \left(e^{\beta J} + e^{-\beta J}\right)^N + \left(e^{\beta J} - e^{-\beta J}\right)^N =$$

$$= 2^N \mathrm{ch}^N(\beta J) + 2^N \mathrm{sh}^N(\beta J) = 2^N \mathrm{ch}^N(\beta J)\left(1 + \mathrm{th}^N(\beta J)\right)$$

$N \to \infty$

0

λ_2 ?

$$\ln Z = N \ln \lambda_1 = N \ln\left\{e^{\beta J}\,\mathrm{ch}(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J}\,\mathrm{sh}^2(\beta J) + e^{-2\beta J}}\right\}$$

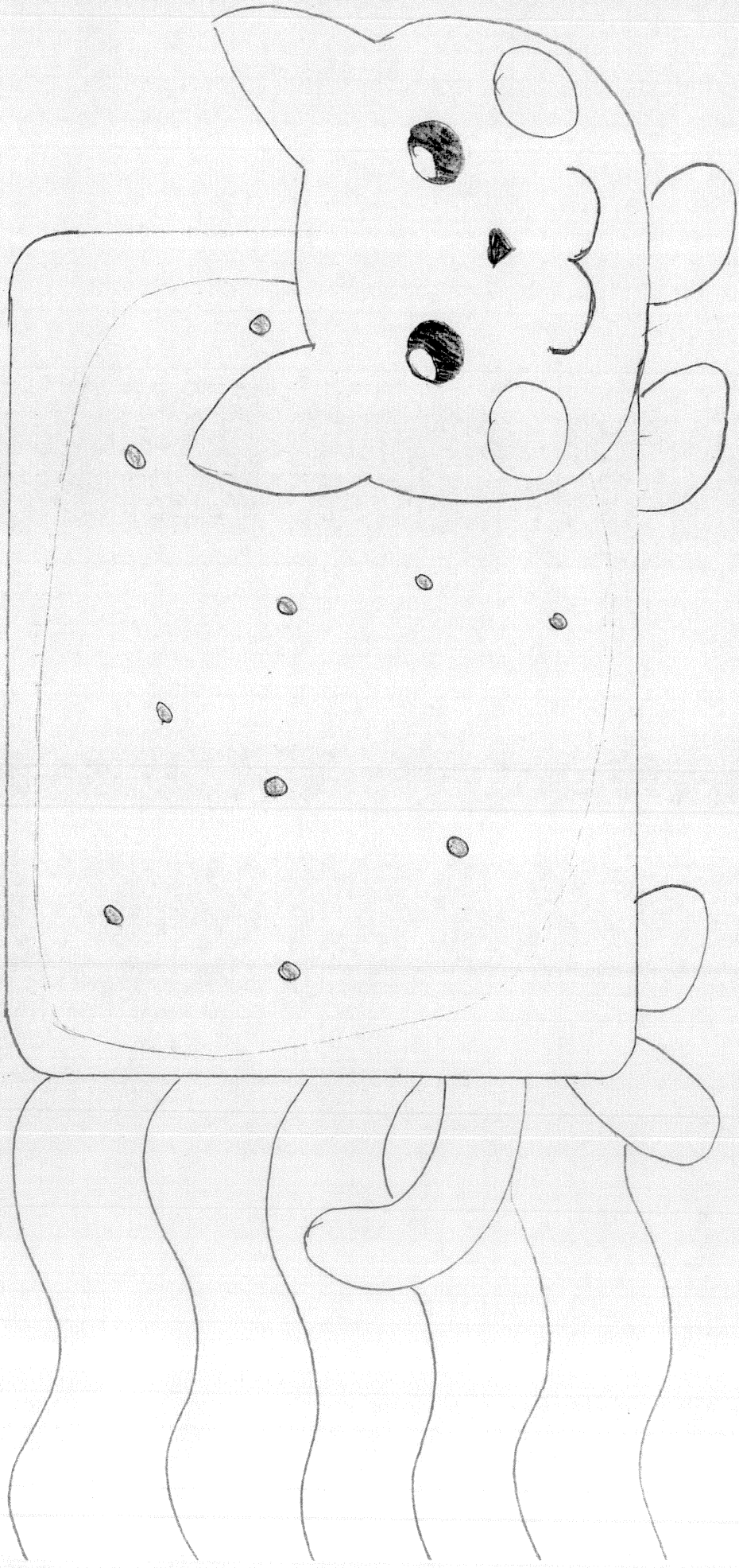
Mágnesezettség:

$$M = \frac{\partial \ln Z}{\beta\, \partial h} = N \frac{e^{\beta J}\,\mathrm{sh}(\beta h) + \dfrac{e^{2\beta J}\,\mathrm{sh}(\beta h)\,\mathrm{ch}(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J}\,\mathrm{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}}{e^{\beta J}\,\mathrm{ch}(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J}\,\mathrm{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}$$

$\beta J \to 0 \Rightarrow M = N\,\mathrm{th}(\beta h)$

$h \to 0 \quad M(T, h \to 0) = 0$

$\beta J \to \infty \Rightarrow M(T \to 0, h) = N\,\mathrm{sgn}(h)$



új óra

külső tér

$$\chi(T,h) = \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{\partial}{\partial h}\left(N \frac{e^{\beta J} \operatorname{sh}(\beta h) + \frac{e^{2\beta J}\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{ch}(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}}{e^{\beta J}\operatorname{ch}(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial h}\left(N \frac{e^{\beta J}\operatorname{sh}(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \right) = N \frac{e^{\beta J}\operatorname{ch}(\beta h)\beta}{\sqrt{\quad}} +$$

$$+ N \frac{e^{\beta J}\operatorname{sh}(\beta h)}{(\quad)^{3/2}} \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot e^{2\beta J} 2\operatorname{sh}(\beta h)\operatorname{ch}(\beta h)\beta =$$

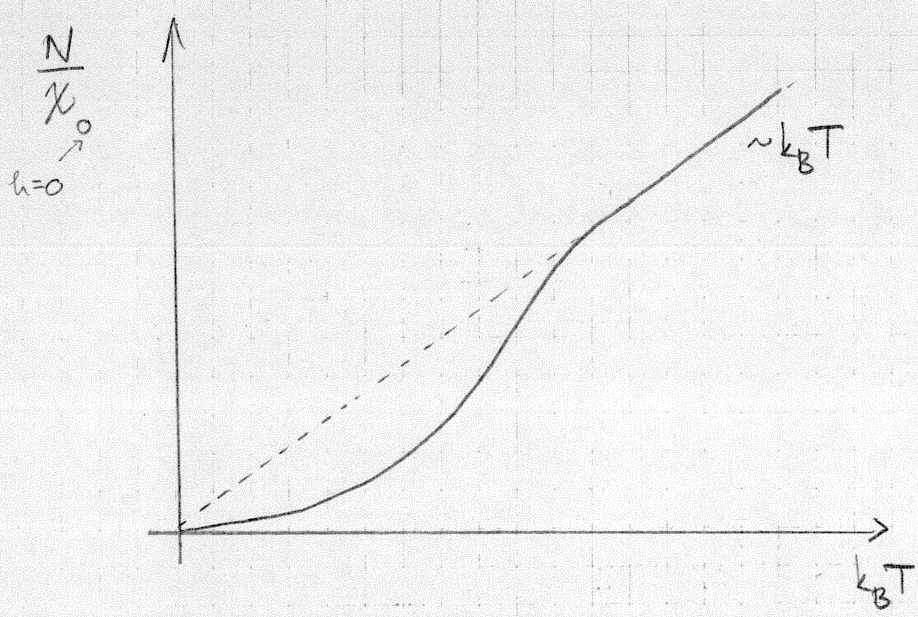
$$= \frac{N}{k_B T} \left\{ \frac{e^{\beta J}\operatorname{ch}(\beta h)\left(e^{2\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}\right) - e^{3\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h)\operatorname{ch}(\beta h)}{\left(e^{2\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}\right)^{3/2}} \right\}$$

$$= \frac{N}{k_B T} \frac{e^{-\beta J}\operatorname{ch}(\beta h)}{\left(e^{2\beta J}\operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{-2\beta J}\right)^{3/2}}$$

$$\Rightarrow \chi(T, h=0) = \frac{N}{k_B T} \frac{e^{-\beta J}}{e^{-3\beta J}} = \frac{N}{k_B T} e^{2\beta J}$$

$T \to 0$ $(\beta \to \infty)$ esetben ez elszáll

(esszenciális szingularitás



$\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$ számolása:

$$M = \frac{\partial F}{\partial H} = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle$$

$dE = \ldots + M\,dH$

$$\frac{\partial M}{\partial H} = \chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} = \frac{\partial^2 kT \ln Z}{\partial h^2}$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{+\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta h \sum_i S_i}$$

összes spinkonfigurációra összegzünk

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial h} Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta h \sum_i S_i} \beta \sum_i S_i$$

$$\Rightarrow M = \frac{\partial\, k_B T \ln Z}{\partial h} = k_B T \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial h} Z \Big|_{h=0} = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle$$

$$\frac{\partial M}{\partial h} = \frac{\partial^2}{\partial h^2} F = \frac{\partial^2}{\partial h^2} k_B T \ln Z = \frac{\partial}{\partial h}\left(k_B T \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \right) =$$

$$= k_B T \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} - k_B T \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial h} \right)^2 = k_B T \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} - \frac{1}{k_B T} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle^2$$

$$\frac{\partial^2}{\partial h^2} Z = \sum_{[S_i]} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta h \sum_i S_i} \cdot \beta^2 \left(\sum_i S_i \right)^2$$

$$= \frac{1}{k_B T} \left[\left\langle \left(\sum_i S_i \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_i S_i \right\rangle^2 \right] = \chi$$

$$k_B T \chi = \left\langle \left(\sum_i S_i \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_i S_i \right\rangle^2 =$$

$$= \left\langle \sum_{i,j} S_i S_j \right\rangle - \left(\sum_i \langle S_i \rangle \right)^2 =$$

$$= \sum_{i,j} \langle S_i S_j \rangle - \sum_{i,j} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = k_B T \chi$$

$\chi \to N \cdot \frac{e^{\frac{2J}{kT}}}{kT}$

korelációk és a szuszceptibilitás összefügg

↑ mikroszkopikus ↑ makroszkopikus

Hosszú távú rend meglátszik a szuszceptibilitáson

külső hatásra a rendszer válaszol, ezek jellemzik a választ

$\chi h \approx m$ — spin korelációk $\propto \chi$

$\sigma E \approx j$ — töltések sebességeinek korelációja $\propto \sigma$

fluktuáció – disszipáció tétel:

korelációk és a rendszer válasza összefüggésl

Általánosságban tehát spinmodellek esetén:

$\mathcal{H}$ tetszőleges: $\sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} S_i S_j + \sum_{ijk} \mathcal{J}_{ijk} S_i S_j S_k + \dots$

$\mathcal{H}(S_1, \dots, S_N)$

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\}) + \beta \sum_j h_j S_j}$$

i. hely mágnesezettsége

$$m_i = \langle S_i \rangle = \frac{\partial F}{\partial h_i} = \frac{\partial\, k_B T \ln Z}{\partial h_i} = k_B T \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\}) + \beta \sum_j h_j S_j} \beta S_i$$

$$= \langle S_i \rangle$$

$$\frac{\partial m_i}{\partial h_j} = \frac{\partial^2 k_B T \ln Z}{\partial h_i \partial h_j} = \frac{\partial}{\partial h_j} \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\}) + \sum_k h_k S_k} S_i =$$

$$= -\frac{\beta}{Z^2} \left(\sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\}) + \beta \sum_k h_k S_k} S_i \right) \left(\sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\}) + \beta \sum_k h_k S_k} S_j \right) +$$

$$+ \frac{\beta}{Z} \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S\}) + \beta \sum_k h_k S_k} S_i S_j$$

$$\chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} = \frac{1}{k_B T} \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right)$$

$$m_i \approx \sum_j \chi_{ij} h_j$$

A teljes rendszerre érvényes szuszceptibilitás:

$$M = \sum_i m_i = \frac{1}{k_B T} \sum_i \sum_j \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right) h_j$$

kis $h_j \to 0$ körül-körül

Ha $h_j \equiv h$

$$\Rightarrow \frac{1}{k_B T} \sum_{i,j} \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right) h = M$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{1}{k_B T} \sum_{i,j} \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right)$$

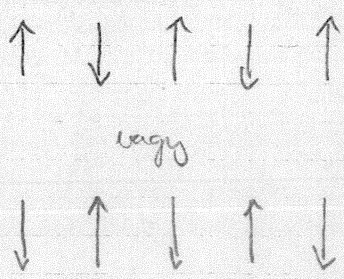
A Hamilton-fv. konkrét alakját nem használtuk fel, ezért olyan általános érvényű a fluktuáció-disszipáció tétele

Tekintsünk egy 1D-s antiferromágneses spinláncot (továbbra is az Ising-modell keretében)

$$\mathcal{H} = |J| \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - H \sum_i S_i$$

↑ csak azért, hogy ez mindenképpen pozitív legyen (az antiferromágneses csatolás érdekében)

$H = 0$



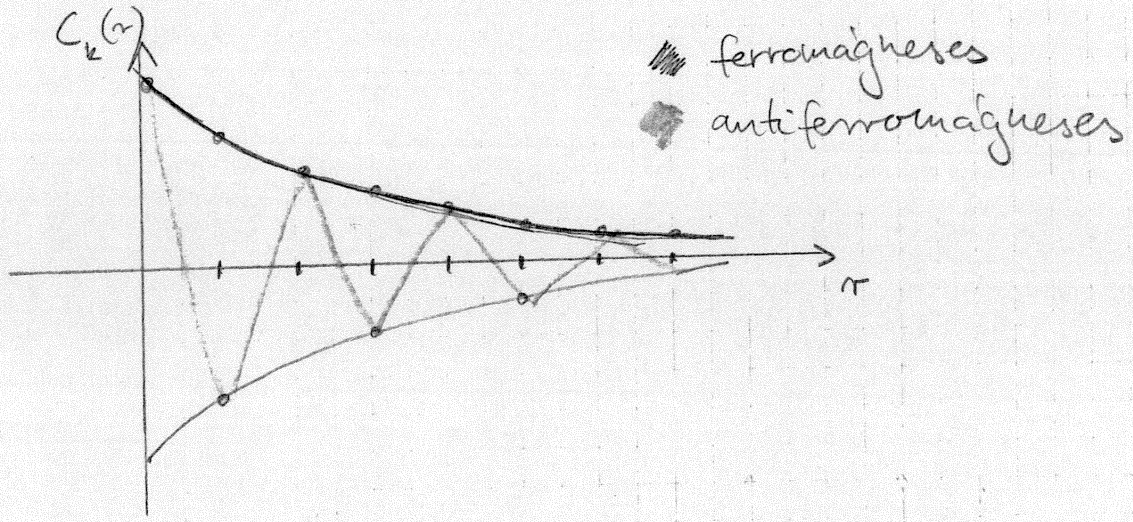
vagy

Ezt már végigszámoltuk, csak J előjele más
$J \to -J$ transzformációval megkapjuk a képleteket

$$C_k(r) = \langle S_k S_{k+r} \rangle = (-1)^r \tanh^r(\beta|J|) = (-1)^r e^{-r|\ln\tanh(\beta|J|)|}$$

korelációs fv.
k. helyen és a tőle r távolságra lévő spin között

ξ a korrelációs hossz : $1/\xi = |\ln\tanh(\beta|J|)|$



Nulla hőmérsékleten ∞ a korrelációs hossz
A hő mozgás egyre rontja, nagyon magas hőmérsékleten $\xi \to 0$, azaz gyakorlatilag teljesen össze-vissza állnak

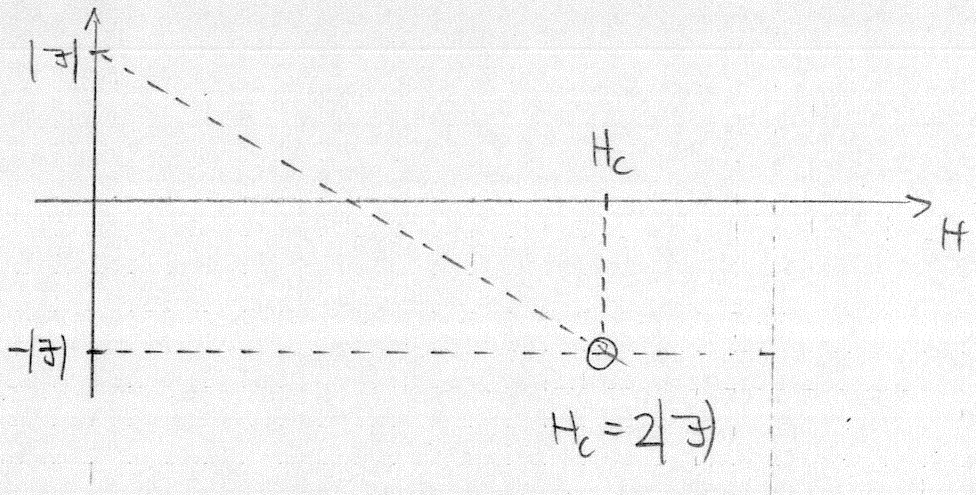
$H = 0$

Az alapállapot energiája : $E = -N|J|$

spinek szorzata $\neq -1$ ↑ ↓ ↑ ↓ ↑ ↓

$H \neq 0$ a mágneses tér ezt akarja : ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

$E = N(|J| - H)$



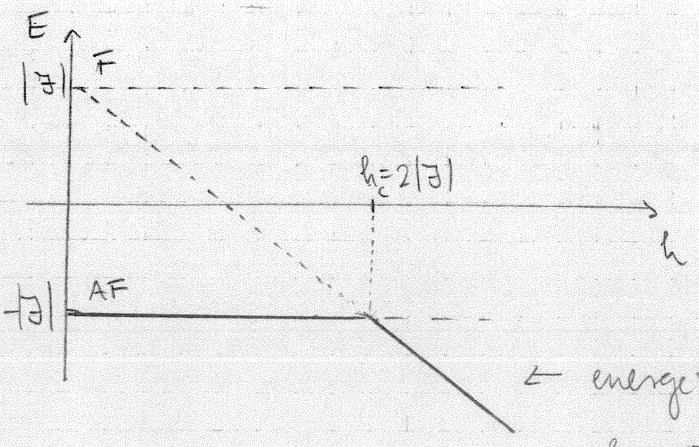
új óra

V. 9.

↑ ↓ ↑ ↓ ↑ ↓ ... $-|J|N$

antiferromágneses Ising-modell

↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ... $|J|N - hN$



← energetikailag itt már a ferromágneses lesz a jó!

egy spin fordulása:

↑ ↑ ↑ ↑ ⟶ ↑ ↑ ↓ ↑

Az energiaváltozás: $-4|J| + 2h > 0$, ha

$h > 2|J| = h_c$

$h > h_c$ az energiaváltozás egy flip esetén $+2|J|$

$h < h_c$ az energiaváltozás egy flip esetén $-2|J|$

$\Rightarrow$ $h > h_c$ esetén ferromágneses a kedvezőbb, alatta pedig az antiferromágneses

$h > h_c$

$T \to 0 \Rightarrow \frac{S}{N} \to 0$ (mivel csak egy állapota van)

$(S = k_B \ln 1)$

$h < h_c$

$T \to 0 \Rightarrow \frac{S}{N} \to 0$

$(S = k_B \ln 2$, de $N \to \infty)$

$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ vagy $\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$

$h = h_c$

$T \to 0 \Rightarrow S = k_B \ln Z + \frac{E}{T} = ?$

$$\ln Z = N \ln \lambda_2 = N \ln \left\{ e^{-\beta|J|} \operatorname{ch}(\beta h) + \sqrt{e^{-2\beta|J|} \operatorname{sh}^2(\beta h) + e^{+2\beta|J|}} \right\}$$

(előző képletből $J \to -|J|$ helyettesítéssel)

$$\ln Z = N \ln \left\{ \frac{1}{2} e^{\beta|J|} + \sqrt{\frac{1}{4} e^{2\beta|J|} + e^{2\beta|J|}} \right\} =$$

$\uparrow$

$\beta \to \infty$

$h = 2|J|$

$$= N \ln \left\{ \frac{1}{2} e^{\beta|J|} + \sqrt{\frac{5}{4} e^{2\beta|J|}} \right\} = N \ln \left\{ \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2} \right) e^{\beta|J|} \right\} =$$

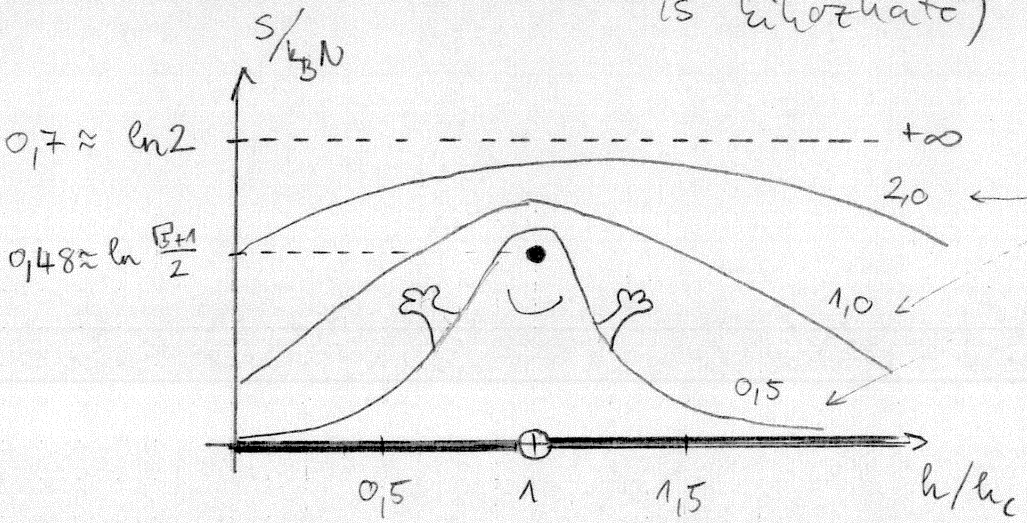
$$= N \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2} \right) + N\beta|J|$$

$$E = -N|\mathcal{J}| \quad \Rightarrow \quad \frac{E}{T} = -\frac{N|\mathcal{J}|}{T} = -k_B N|\mathcal{J}|\beta$$

$$\Rightarrow S = k_B \ln Z + \frac{E}{T} = k_B N \ln\left(\frac{\sqrt{5}+1}{2}\right) =$$

$$= k_B \ln \Omega \quad \Rightarrow \quad \Omega := \left(\frac{\sqrt{5}+1}{2}\right)^N$$ az állapotok száma. (Ennyiszeresen degenerált)

(Fibonacci-arány, kombinatorikailag is kihozható)



$\frac{T k_B}{|\mathcal{J}|}$ arány a különböző görbék

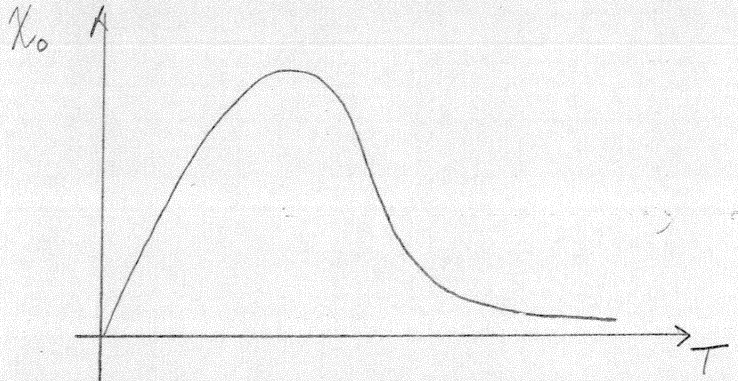
$$\frac{1}{\beta|\mathcal{J}|} \sim \frac{T k_B}{|\mathcal{J}|} \to \infty \quad \Rightarrow$$ hőmérsékleti zaj minden kimos, $S \to k_B N \ln 2$

$$M = N \frac{e^{-\beta|\mathcal{J}|}\, sh(\beta h)}{\sqrt{e^{-2\beta|\mathcal{J}|} sh^2(\beta h) + e^{+2\beta|\mathcal{J}|}}}$$

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \frac{e^{+\beta|\mathcal{J}|}\, ch(\beta h)}{\left(e^{-2\beta|\mathcal{J}|} sh^2(\beta h) + e^{+2\beta|\mathcal{J}|}\right)^{3/2}}$$

($\mathcal{J} \to -|\mathcal{J}|$ helyettesítést megtették

$h=0$, $T \to 0$: $\chi_0 = \frac{1}{k_B T} e^{-2\frac{|J|}{k_B T}}$



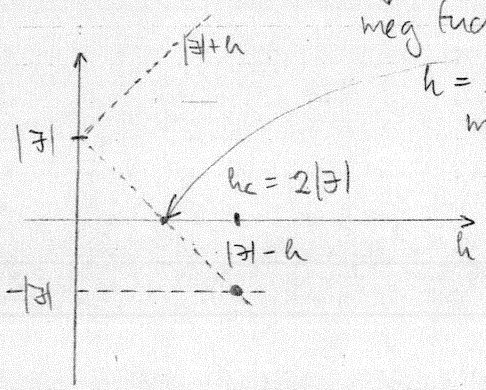
$$\frac{1}{N} M(T=0,h) = \frac{\frac{1}{2} e^{-\beta(|J|-h)} + \frac{1}{2} e^{-\beta(|J|+h)}}{\sqrt{\frac{1}{4} e^{-2\beta(|J|-h)} + e^{-2\beta|J|} + \frac{1}{4} e^{-2\beta(|J|+h)} + e^{2\beta|J|}}}$$

számlálóban ez dominál

→ ez kihal

$\beta \to \infty$

kihalnak



meg tud fordulni, $h = h_c$ esetén már ugyanolyan gyorsan nőhet, mint $e^{2\beta|J|}$-s tag, pedig d dominál

$h < h_c$ esetén d a dominánsa

$$< h_c: \frac{1}{N} M(T\to 0, h) \approx \frac{\frac{1}{2} e^{-\beta(|J|-h)}}{e^{\beta|J|}} \approx \frac{1}{2} e^{-\beta(2|J|-h)} \to 0$$

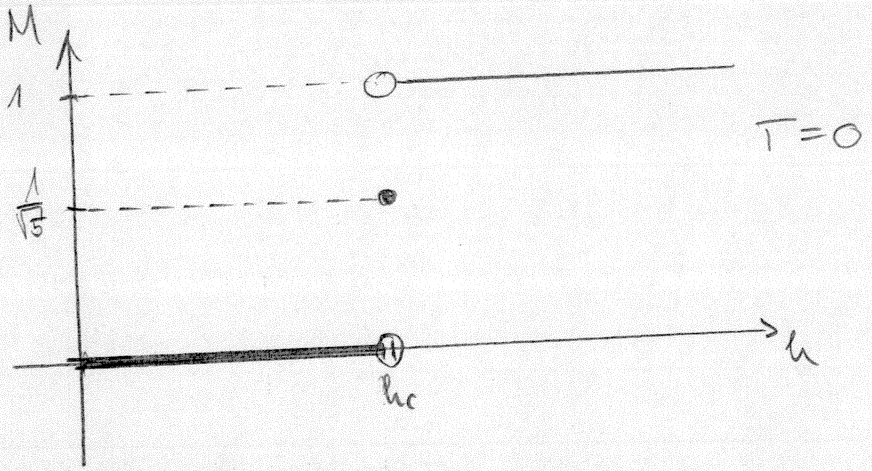
⇓ antiferromágneses

$> h_c: \frac{1}{N} M(T\to 0, h) \to 1$

⇓ ferromágneses

· Ez nem meglepő, az előbb is ezeket a következtetéseket vontuk le.

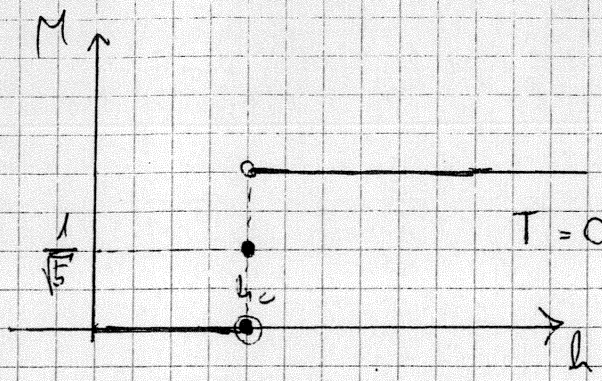
$$= h_c: \frac{1}{N} M(T\to 0, h_c) = \frac{1/2}{\sqrt{\frac{1}{4}+1}} = \frac{1}{\sqrt{5}}$$



$\Rightarrow$ elméletileg $\chi(T \to 0, h)$ majdnem mindenhol zérus.

$$\frac{1}{N} M(T, h_c) = \frac{\frac{1}{2}\left(e^{\beta \frac{h_c}{2}} - e^{-\beta h_c 3/2}\right)}{\sqrt{\frac{1}{4} e^{\beta h_c} + e^{-\beta h_c} + \frac{1}{4} e^{-3\beta h_c/2} + e^{\beta h}}}$$

$T \neq 0$



$$\frac{1}{N}M(T,h_c) = \frac{\frac{1}{2}\left(e^{\beta\frac{h_c}{2}} - e^{-\beta\frac{3}{2}h_c}\right)}{\sqrt{\frac{1}{4}e^{-\beta h_c} + e^{\beta h_c} + \frac{1}{4}e^{\frac{-3\beta h_c}{2}} + e^{3\beta}}}$$

2011.05.11.

Utolsó előadás, de kétfős gyakorlat lesz.

Tételek: Kondor Imre jegyzetben az alábbiakból egy tétel. Kicsit beszélni róla, adott gyakorlatszerű feladatot megoldani. Kulcsból jó esélyel lesz feladat.

~~Bolzmann~~ Magyarországi létet folytat Lassúlás (3D-ről több órában tanárok, itt és most nem.)

1907 Weiss (Weiss) – „Belső tér"

S_i Ferromágneses Ising-modell.

„Bérítünk" m-mel.

$$\langle S_i \rangle = m$$

$$\mathcal{H} = -J\sum_{(ij)} S_i S_j - H\sum_i S_i = -J\sum_{(ij)} \big((S_i - m) + m\big)\big((S_j - m) + m\big) -$$

Első szomszédok.
Adjuk hozzá dimenziós rácsban.
Szélsőfajta rács

$$- H\sum_i \big[(S_i - m) + m\big]$$

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}Jm^2 qN - Jm\sum_{(ij)}(S_j - m) - \frac{1}{2}J\sum_{(ij)}(S_i - m)(S_j - m) -$$

Koordinációs szám
Hány szomszédunk van?

$$-H\sum_i S_i$$

Közelítés: Csak a fluktuációk $(S_i - m)$, ezek négyzetét elhanyagoljuk.

$$H_{MF} = \frac{1}{2} J m^2 q N - \left(J m q + H \right) \sum_i S_i$$

mean field

A 2. tag m-es része $\pm \frac{J}{2}$ eltérés a $\pm$-től.

Már nincs benne spin-spin kölcsönhatás.

$$\langle m \rangle - S_i - \langle m \rangle \qquad -J S_i m q \leftarrow \text{Weiss-féle belső tér.}$$

$$\langle m \rangle \quad q\text{-db.}$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H_{MF}} = \sum_{S_1 \dots S_N} e^{-\beta \frac{1}{2} J m^2 q N + \beta H_{eff} \sum S_i} =$$

Külön összegezhetünk, mert nem hatnak kölcsön.

$$H_{eff} = H + J m q$$

$$= e^{-\beta \frac{1}{2} J m^2 q N} \left(\sum_{S = \pm 1} e^{\beta H_{eff} S} \right)^N = e^{-\beta \frac{1}{2} J m^2 q N} \left[2 \operatorname{ch} (\beta H_{eff}) \right]^N$$

$$\ln Z = N \left\{ -\frac{1}{2} \beta J m^2 q + \ln 2 + \ln \operatorname{ch} (\beta H_{eff}) \right\}$$

$$M = N \cdot m = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \left(\sum_i S_i \right) e^{-\frac{1}{2} \beta J m^2 q N + \beta H_{eff} \sum_i S_i} =$$

$$= \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \frac{\partial}{\partial H_{eff}} e^{[\dots]}$$

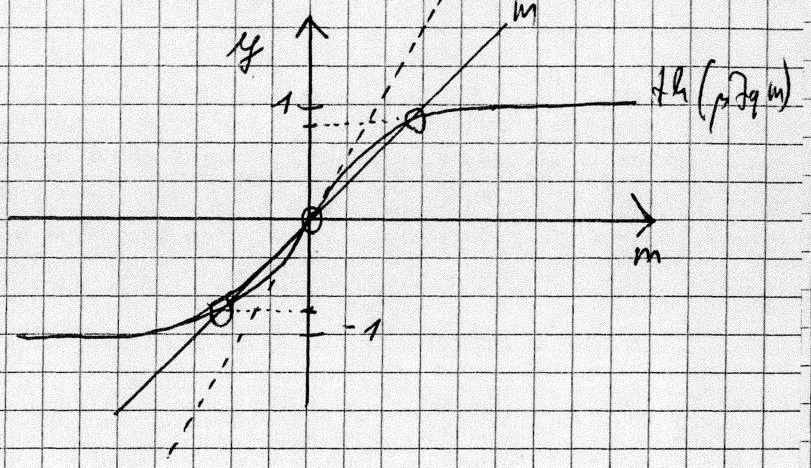
$$M = \frac{\partial}{\partial H_{eff}} k_B T \ln Z = N \cdot \underbrace{th(\beta \cdot H_{eff})}_{m}$$

$$\Downarrow$$

$$m = th\left[\beta \cdot \left(\mathcal{J} m q + H\right)\right]$$

Önkonzisztens egyenlet oldani.

Hegyre is megoldható, de nem ezt keressük.



- $H = 0$

$$m = th(\beta \mathcal{J} q \cdot m)$$

$$th\, x \approx x - \frac{x^3}{3} + \dots$$

Ha $\beta \mathcal{J} q > 1$, 3 megoldás

van. $\beta_c \mathcal{J} q = 1 = \frac{\mathcal{J} q}{k_B T_c}$

$T > T_c$: 1 megoldás $\qquad \mathcal{J} q = \frac{1}{\beta_c}$ $\qquad m = th\left(\frac{T_c}{T} m\right)$

$T < T_c$: 3 megoldás.

T_c közelében van fizika.

$$m = \frac{T_c}{T} m - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^3 \qquad T > T_c \text{ esetén } m = 0$$

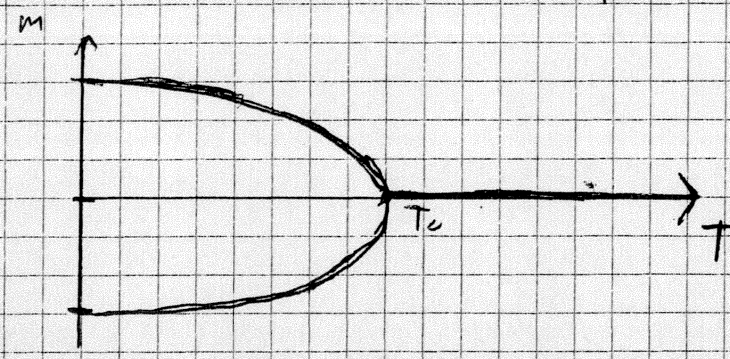
Vizsgáljuk kidolgozva: $m = 0$, $m = \pm$ fizika ← de melyikre? /:m

$$1 = \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2$$

$$\frac{T_c - T}{T} = \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2$$

$$3\cdot\left(\frac{T}{T_c}\right)^3\cdot\left(\frac{T_c-T}{T}\right) = m^2$$

$$m \approx \pm\sqrt{\frac{3}{T_c}(T_c-T)} \sim \sqrt{T_c-T}$$



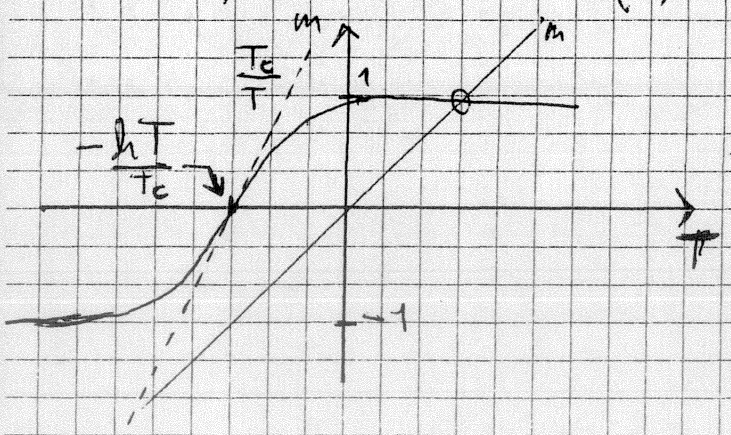
Pici hatások döntik el, hogy melyik ágon vagyunk, mivel nincs mágneses tér, ami beállítaná. Bifurkálódik a rendszer.

Szimmetriasértés. Szimmetrikus Hamilton-nunk van, de a rendszer belülleg egy állapotba. Rendparaméter.

- $H \neq 0$. $h = \beta H$

$$m = \text{th}\left(\frac{T_c}{T}m + h\right)$$

$$m = \frac{T_c}{T}m + h - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}m + h\right)^3$$



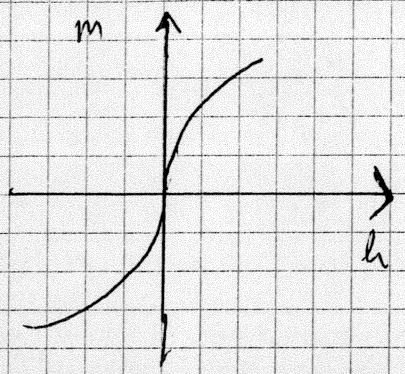
$T > T_c$-re egy metszéspont van. Nagy h-ra jónak, negatív nagy negatív h-ra lesz. Így h-n 0-hoz közel.

$T < T_c$: 1, 2, vagy 3 megoldás is lehet.

De most: $T = T_c$

$$m = m + h - \frac{1}{3}(m + h)^3 \qquad h \ll m$$

$$h \approx \frac{1}{3}(m + h)^3 \approx \frac{1}{3} m \qquad m \sim h^{1/3}$$



$T > T_c$

$$m\left(1 - \frac{T_c}{T}\right) \approx h \qquad H = \frac{h}{\beta}$$

$$m = \frac{h}{1 - \frac{T_c}{T}}$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = N \cdot \frac{\partial m}{\partial H} = N\beta \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{N}{k_B(T - T_c)}$$

Mindig $1/T$ szerint csúcsot ad a eddig. Ez új, csak el van tolva. T_c-ben eltűnik, ez a Weiss-Curie-törvény.