Statisztikus fizika

előadó: Vattay Gábor

email: vattay@elte.hu

jegyzet: vattay.web.elte.hu

aj. irodalom: Kubó: Stat. mechanika példákkal és feladatokkal

Elm. fiz. példatár

12^{15}-kor kezdünk, szünet lesz

1. óra

1) Bevezetés:

mechanika (klassz., kvantum): mikroszkopikus viselkedés (részecskék)

termodinamika: makroszkopikus viselkedés (sokrészecskés rendszerek)

kettő összekötése: statfiz.!

- véletlen szerepét nehezen fogadták el
- Boltzmann: statfiz. megalkotása
  - → szilárdtestfizika
  - → tőzsdei árfolyamok
- statisztikus fizika határai?

  10^{10} részecskére már jól működik (mezoszkopikus mérték)

- időtükrözési szimm. → a természeti tv.-ek látszólag mindkét irányt megengedik (pl. cukor összeállhat a kávéban), mégsem történik ez → Boltzmann ezt is megmagyarázta: a dolgok a rendezetlenség irányába haladnak

DE a stat. fizikának vannak határai (pl. zárt rendszerekre von. törvények)
→ a biológiai rendszerek mehetnek a rendeződés irányába is
(„önszerveződés")

2) Mechanika:

autonóm rendszer: nem függ t-től

$\mathcal{H}(q_i, p_i, \cancel{t}) \Rightarrow$ rendszer állapotát egy vektor írja le: $(\vec{q}, \vec{p})$

↑
Hamilton fv.

f: szab. fokok száma $\quad f = d \cdot N \cdot 2$

N: részecskék száma

d: térbeli dimenziók száma

↑ impulzus miatt (q és p is van)

$E = \mathcal{H}(q_i, p_i)$: megmaradó mennyiség autonóm rendszer esetén

⇓

← pl. ez korlátozza, hány dimenzióban történhet a mozgás (összefüggés az állapotjelzők között)

harm. oszcill.

(integrálható rsz.)

p_x és x között összefüggés

⇓

1dim.-s mozgás

3) Kvantummechanika:

- mikor adja vissza a klassz. mechanikát (klassz. határeset)?

$\hbar \to 0$

$\Psi(\vec{x}) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \dots$

↑

miért $\vec{x}$ ↗ a Schr. egyenletet Descartes-koordinátákban írtuk fel, más (általános) koord.-ban a Δ alakja más!

$\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$

de: $\cancel{\hat{p}_r \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}}$

egyszerre nem is lehet mérni őket

↑ ⇒ nincs meg

Kvantummechanikában kitüntetjük a koordinátát az impulzussal szemben! → koordinátában kell mindent felírni.

(részecskék lokalizáltak)

→ semiklasszikus átmenetnél ez a kül. eltűnik.

$$\boxed{E_i\Psi_i = \hat{H}\Psi_i}$$ kvantált rendszer

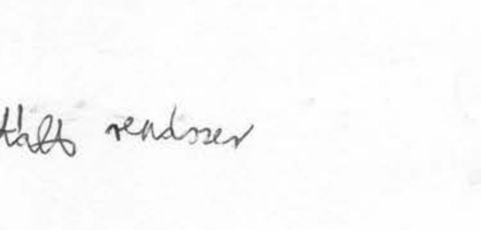
Megmaradó mennyiség: kommutál a Hamilton-fv.-el, ilyenkor választhatunk közös sfv. rendszert

4) Energiaszintek száma:

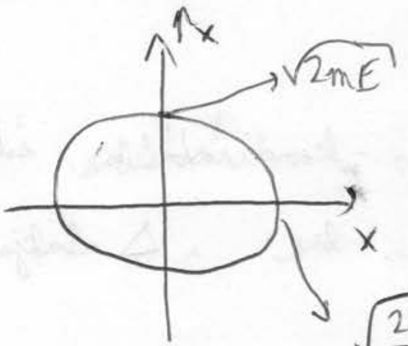
$N(E) = \#\{E_i < E\}$: E-nél kisebb energiaszintek száma

a) pl. $E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = n$



$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Dx^2$$



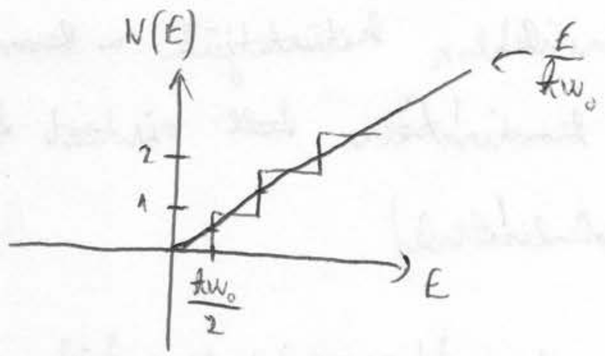
$D = m\omega_0^2$

$$\sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} = \frac{1}{\omega_0}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

szemiklasszikus közelítésben $N(E) = ?$

ha $\hbar \to 0$

$$\frac{E_n}{\hbar\omega_0} \cancel{- \frac{1}{2}} = n(E_n)$$

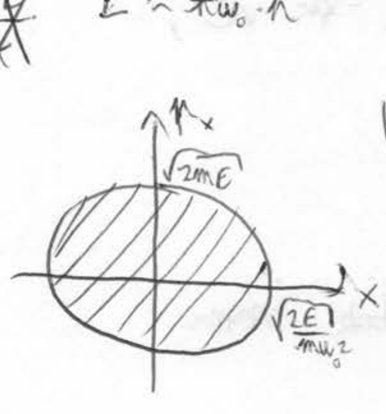


$$\boxed{\frac{E}{\hbar\omega_0} \approx n(E)}$$

↑

nagy E-n (kis $\hbar$-n)
ez egész jó közelítés

$\cancel{E}$ $E \approx \hbar\omega_0 \cdot n$



$$T_{\parallel\parallel} = \sqrt{2mE} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \cdot \pi = \frac{2E}{\omega_0}\pi$$

$$\frac{T_{\parallel\parallel}}{2\pi\hbar} = \boxed{\frac{T_{\parallel\parallel}}{h} \approx n}$$

$\Rightarrow$ fázisdiagram alatti terület / h $\approx$ állapotok száma

b) dobozba zárt rész:

L, m

$$\Psi_0 \sim \sin\left(\frac{\pi \cdot x}{L}\right)$$

$$\Psi_n \sim \sin\left(\frac{\pi(n+1)x}{L}\right)$$

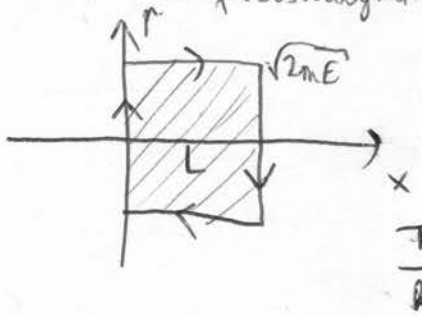
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2} = E_n \Psi_n$$

$$\left(\frac{2mE_n}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot \frac{L}{\pi} - 1 = n \quad \leftarrow \quad \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi(n+1)}{L}\right)^2 = E_n$$

hasonló, mint a harm. osc.-nál: ha E nagy, vagy $\hbar$ kicsi

$$n(E) \approx \frac{(2mE)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \cdot \frac{L}{\pi}$$

- klasszikus fázisdiagram



$$T = L \cdot 2 \cdot \sqrt{2mE}$$

$$\frac{T}{h} = \frac{T}{2\pi\hbar} = n$$

c) Bohr - Sommerfeld - féle kvantálási szabályok (ez is szemiklasszikus közelítés)

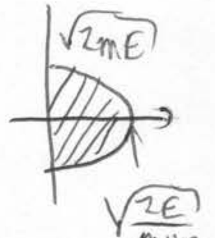
$$\frac{1}{2\pi}\oint p\, d\, q = \hbar(n + \nu) \qquad \nu: \text{Maslov-index}$$

puha ütk.: $\frac{1}{4}$ / ütk. — attól függ, hogy milyen határfeltételek

kemény ütk.: $\frac{1}{2}$ / ütk. — mellett fordul meg a részecske (és hányszor) pl. harm. oszci: $2\cdot\frac{1}{4}=\frac{1}{2}=\nu$

dobozba zárt rész: $2\cdot\frac{1}{2}=1=\nu$

1 puha, 1 kemény $\Rightarrow \nu=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}=\frac{3}{4}$



$$\frac{1}{2\cancel{\pi}}\frac{\cancel{\pi}}{\cancel{2}}\cdot\frac{\cancel{2}E}{\omega_0}=\hbar\left(n+\frac{3}{4}\right)$$

$$E=\hbar\omega_0\left(2n+\frac{3}{2}\right) \qquad n=0,1,\ldots$$

$\downarrow$

ez is egy harm. oszci., de megköveteljük, hogy a hullámfv. középen 0 legyen

$\Downarrow$

$\forall$ 2. energiaszintet vesszük csak

$$\frac{1}{2\pi}\overbrace{\oint p\,dq}^{T}=\hbar(n+\nu)$$

$$\frac{T}{2\pi\hbar}-\nu=n$$

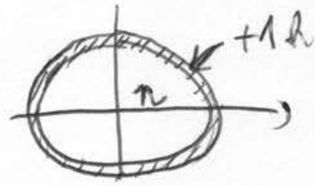
ha $\hbar\to 0$ $(T\to\infty)$

$$\frac{T}{h}\propto n(E)$$

$\Rightarrow$ olyan, mintha kis kvantumcelláink lennének

$\rightarrow$ csak olyan állapotok lehetnek, ahol az ~~kvantum~~ állapotok közötti fázistérfogat h

$\not\equiv$



d) Több dimenzióban:

pl. 2D oszci: $E = E_1 + E_2 \quad n_1(E_1)\,,\ n_2(\overbrace{E - E_1}^{=E_2})$

4D fázistérben kell kikockáznunk a 4D ellipszoidot

($\forall$ metszetére igaz az 1D szabály)

$$\frac{1}{h^2}\int\limits_{\mathcal{H}(x,y,p_x,p_y)<E} dx\,dy\,dp_x\,dp_y \approx n(E) \qquad \text{ha } \hbar \to 0,\ E \to \infty$$

Általános képlet:

$$\boxed{n(E) \approx \frac{1}{h^{d\cdot N}} \int\limits_{\mathcal{H}(q,p)<E} \overbrace{\prod_{i=1}^{d\cdot N} dq_i\, dp_i}}$$

itt már használhatók kanonikus koord.-imp. párokat) mert $\prod_i dq_i\, dp_i$ már invariáns

2. óra

Ism.:

$$N(E) = \frac{1}{h^{Nd}} \int_{\mathcal{H}<E} d^{Nd}p \, d^{Nd}q$$

- ez csak megkülönböztethető részecskékre igaz
- megkülönböztethetetlen részecskékre klasszikusan a felcserélés is új állapotot ad, de kvantumosan nem

$\Downarrow$

$$\Omega_0(E) = N(E) = \frac{1}{N!} \cdot \frac{1}{h^{Nd}} \int_{\mathcal{H}<E} d^{Nd}p \cdot d^{Nd}q$$ lépcsős fv.

$\downarrow$

$$w(E) = \rho(E) = \frac{dN(E)}{dE}$$ állapotsűrűség

Makroszkopikus testekre (nagyon sok részecske) az állapotok (energiaszintek) „összefolynak", az energiaszintek közti különbségek nagyon kicsik

$\Rightarrow$ kvázifolytonos fv. $\rightarrow$ ilyenkor $\Omega_0(E)$-t használjuk

$\searrow$ diszkrét en. szintekre $N(E)$-t haszn.

- pl. dobozba zárt részecskék (id. gáz): (mikr. test)

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + \begin{cases} 0 & \text{dobozban} \\ \infty & \text{dobozon kívül} \end{cases}$$

$\mathcal{H} < E$ $\quad |p_i| = \sqrt{2mE}$ sugár

$$\Omega_0(E) = \frac{1}{h^{3N} N!} V^N \int\limits_{\sum_{i=1}^{3N} p_i^2 < 2mE} d^{3N}p_i = \frac{1}{h^{3N} N!} V^N \cdot \underbrace{(2mE)^{\frac{3N}{2}} \cdot C_{3N}}_{\sqrt{2mE}\text{ sugarú, 3N dimenziós gömb térfogata}} =$$

térfogatra vett ∫-lal

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

az E^N miatt az állapotok száma nagyon gyorsan nő az energia fv.-ben

- N db, 1 dim.-s oszci (~~megkülönböztethető~~)

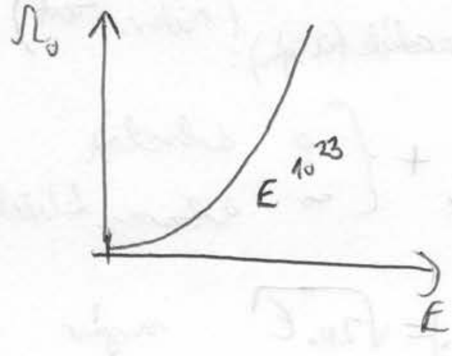
$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 q_i^2$$

N dim. ellipszoid térfogata

$$|p| = \sqrt{2mE} \qquad |q| = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$$

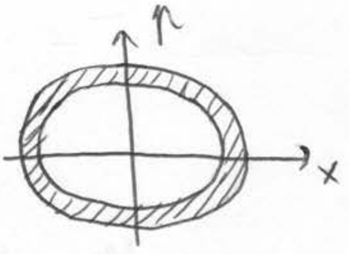
$$\Omega_0(E) = \frac{1}{h^N} \left(\frac{2E}{m\omega_0^2}\right)^{\frac{N}{2}} \underbrace{(2mE)^{\frac{N}{2}} \cdot \frac{\pi^N}{\Gamma(N+1)}}_{\text{2N dim. gömb \sout{térfogata}}}$$

$$\Omega_0(E) = \frac{1}{h^N} \cdot \frac{(2\pi)^N E^N}{\omega_0^N} \cdot \frac{1}{N!}$$

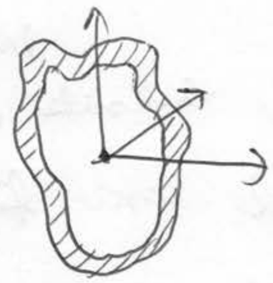


A statisztikus fizika megalapozása

$E, E+\delta E$ <u>mért</u> energiájú oszcillátor

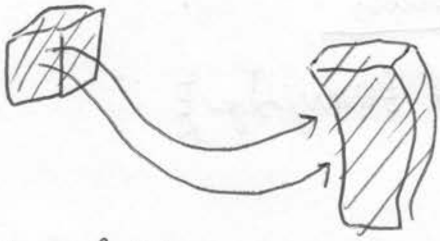


(nemlineáris rendszernél a rendszer az <u>összes</u> állapotot bejárja, amit $E, E+\delta E$ megenged)



harm. oszci nem járja be az összes pontot, de csak annyit tudunk, mekkora az energiája $\Rightarrow$ Mondjuk azt, hogy a fázistér összes pontjában <u>azonos</u> valószínűséggel található meg

(indoklás: Liouville-tétel



$d^{3N}p_i \, d^{3N}q_i = \text{áll}$

a fázistérfogat alakja változhat, de térfogata áll)

$$\underbrace{\rho\left(q(0), p(0)\right)}_{t=0} \underbrace{d^d p \, d^d q}_{t=0} = \underbrace{\rho\left(p(t), q(t)\right)}_{t} \cdot \underbrace{d^d p \, d^d q}_{t}$$

mivel a fázistérfogat nem vált., a részecskék sűrűsége is megmarad

$E = \mathcal{H}(q,p)$ = áll. (konzerv. rendszernél)

⇒ valamelyik imp. helyett E-t bevezetve, az erre merőleges térfogat is megmarad

⇓

valójában $2d-1$ szabadsági fok van

<u>Áll.:</u> a rendszer olyan irányba törekszik, hogy minden állapotot (haladni) ugyanakkora valószínűséggel vesz fel!

↑ ami a mérésekkel $(E, E+\delta E)$ összhangban van

↓

Ez egy <u>posztulátum</u>, nem tudjuk, miért van!

pl. oszcillátor az ellipszisgyűrű minden pontjában ugyanakkora val.-el van.

⇒ <u>Mikrokanonikus ~~sokaság~~ eloszlás</u>

• Klasszikusan:

$A(q,p)$ rendszer ~~állapota~~ $\cancel{\text{mennyisége}}$

$$\frac{1}{T}\int_0^T A(q(t),p(t))\,dt \xrightarrow[T\to\infty]{} \langle A\rangle \quad \text{időbeli átlag}$$

$$\| !$$

$$\int A(q,p)\cdot\rho(q,p)\,d^dp\,d^dq = \langle A\rangle \quad \text{fázistérre vett átlag}$$

áll.: a két átlag ugyanaz, ahol ρ

$E < \mathcal{H} < E+\delta E$

↓

~~ahol~~ $\rho(q,p) = \begin{cases} E<\mathcal{H}(q,p)<E+\delta E, & \rho = \dfrac{1}{\Omega(E,\delta E)} \\ \text{egyébként}, & \rho = 0 \end{cases}$

ahol $\Omega(E,\delta E) = \Omega_0(E+\delta E) - \Omega_0(E)$ = (burok fázistérfogata)

$\Downarrow$

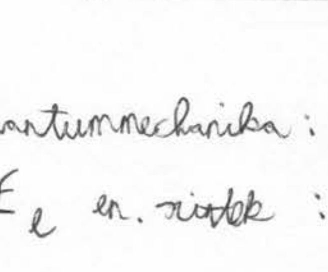
$$\langle A\rangle = \frac{1}{\Omega(E,\delta E)} \cdot \int\limits_{E<\mathcal{H}(q,p)<E+\delta E} A(q,p)\, d^d p\, d^d q$$

$$\Omega(E,\delta E) = \int\limits_{E<\mathcal{H}(q,p)<E+\delta E} 1 \cdot d^d p\, d^d q$$

• Kvantummechanika:

E_ℓ en. szintek : $E < E_\ell < E+\delta E$

$$\langle A\rangle = \frac{1}{\Omega}\sum_{\substack{\ell \\ E<E_\ell<E+\delta E}} A_\ell \qquad \text{ahol} \quad \Omega = \sum_{\substack{\ell \\ E<E_\ell<E+\delta E}} 1$$



kocsonyás anyagok

tfh. a fal kivétele után is csak energiaátadás lesz

tfh. csak a fal melletti rész.-kkel lehet nagy valószínűséggel energiacsere (felületi kölcsönhatás) ez pl. nem igaz töltött (EM-en) felülőknél

→ ~~végtelen~~ nagy távolságokban is van energiaátadás

(~~[illegible]~~ nemrelativ.-an végtelen táv.-ból végtelen gyorsan.)

Milyen lesz az egyens. állapot a fal kihúzása után?

$E, E+\delta E$: összenergia kezdetben

$$E < E_1 + E_2 < E + \delta E$$

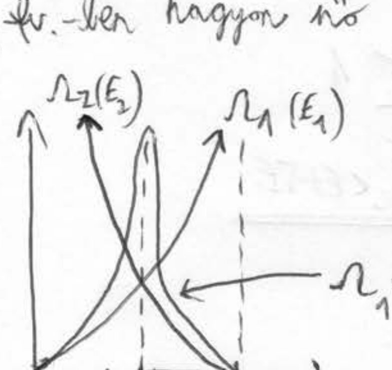
~~[illegible]~~ $\Omega_1(E_1, \delta E) \cdot \Omega_2(E_2, \delta E)$ → az összállapotok száma adott E_1, E_2 energiaelosztásra, ha független a két rendszer

$$\Omega = \sum_{\substack{E_1, E_2 \\ E < E_1 + E_2 < E + \delta E}} \Omega_1(E_1, \delta E) \cdot \Omega_2(E_2, \delta E)$$ → a rendszer összállapotainak száma

$\|$

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

Ω_1 E_1 fv.-ben nagyon nő, Ω_2 nagyon csökken



(pl. $(x(1-x))^N$)

$E_1^* = ?$ keressük a szorzat logaritmusának maximumát

(ugyanott van, ahol a szorzat maximuma)

⇓

$$\frac{d}{dE_1}\Big(\ln\Omega_1(E_1)+\ln\Omega_2(E-E_1)\Big)\Big|_{E_1=E_1^*}=0$$

$$\frac{d\ln\Omega_1(E')}{dE'}\Big|_{E'=E_1}-\frac{d\ln\Omega_2(E')}{dE'}\Big|_{E'=E-E_1}=0$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{d\ln\Omega_1(E_1)}{dE_1}=\frac{d\ln\Omega_2(E_2)}{dE_2}\,,\quad E_1^*+E_2^*=E$$

$\Rightarrow \frac{d\ln\Omega}{dE}$ megegyezik a két részrendszerre

Mivel termikusan kiegyenlítődő rendszerekről van szó,

$$\frac{d\ln\Omega}{dE}=f(T)\quad : \text{a hőm. fv.-e}$$

$$\frac{1}{T(E_1)}:=\frac{d\overbrace{\ln\Omega_1(E_1)}^{:=S}}{dE_1}=\frac{d\ln\Omega_2(E_2)}{dE_2}=\frac{1}{T(E_2)}$$

$$\underline{\underline{S=k_B\ln\Omega(E,\delta E)}}$$

3. óra

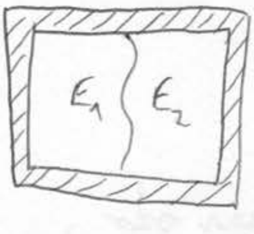
1) $$\Omega_0(E) = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \cdot (2mE)^{\frac{3N}{2}} \cdot \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)} \equiv C_0 \cdot E^{\frac{3N}{2}}$$

$N \sim 10^{23}$

$$\Omega(E, \delta E) = \Omega_0(E+\delta E) - \Omega_0(E)$$

$$\Omega(E, \delta E) = c_0 \cdot \frac{3N}{2} E^{\frac{3N}{2}-1} \delta E$$

$$\frac{\Omega(E, \delta E)}{\Omega_0(E)} = \frac{3N}{2} \cdot \frac{1}{E} \delta E$$

2) ~~A_0~~  $E = E_1 + E_2$ $\boxed{\frac{\partial \ln \Omega}{\partial E_1} = 0}$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial \ln \Omega_1(E_1^*, \delta E)}{\partial E_1} = \frac{\partial \ln \Omega_2(E_2^*, \delta E)}{\partial E_2}$$

$\Leftarrow$

ez adja meg $E = (E_1^*)$-t (energia ~~társt~~) legvalószínűbb értéke),

$$P(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1) \cdot \Omega_2(E-E_1)}{\Omega(E)}$$

$\uparrow$
valsz.

mert ebben a kiosztásban van ~~mert itt van~~ maximuma
$\Omega = \Omega_1 \Omega_2$ állapotö.-nek

~~mert~~ ezt a kiosztást valósítja meg a legtöbb mikroállapot

az azonos val.-ek $\Leftarrow$

miatt ez egyben
a legv. val.-et is jelenti

pl. Id. gázra:

a) $$\ln\Omega_1 = \text{áll} + \left(\frac{3N}{2}-1\right)\ln E \Rightarrow \left(\frac{3N}{2}-1\right)\frac{1}{E} = \frac{d\ln\Omega_1}{dE}$$

$$\left(\frac{3N_1}{2}-1\right)\frac{1}{E_1} = \left(\frac{3N_2}{2}-1\right)\frac{1}{E_2}$$

(nem írunk csillagot, mert energia (E_1) alatt termodin.-ban automatikusan az energia várható értékét (E_1^*) értjük)

$$E = \frac{3}{2}Nk_BT \Rightarrow \frac{1}{\cancel{k_B}T_1} = \frac{1}{\cancel{k_B}T_2}$$

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

Mivel: $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ $\quad \left(\left.\frac{\partial E}{\partial S}\right|_{V,N} = T\right)$

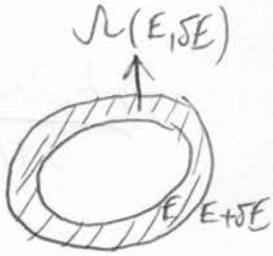
$\Downarrow$

$$\underline{\underline{S = k_B \ln\Omega(E,\delta E)}} \approx \ln c_0 \frac{3N}{2}\cdot E^{\frac{3N}{2}-1}\cdot\delta E$$

$$\ln\Omega_0(E) \approx \ln c_0 E^{3N/2}$$

$$\ln\Omega_0(E) \sim \cancel{\ln c_0} + \quad + \frac{3N}{2}\ln E$$

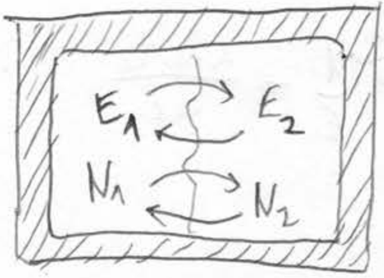
$$\ln\Omega(E,\delta E) \sim \cancel{\ln c_0} + \ln\frac{3N}{2} + \left(\frac{3N}{2}-1\right)\ln E + \ln\delta E$$



$$\ln\Omega_0(E) - \ln\Omega(E,\delta E) = \underbrace{\ln E}_{\text{kicsi}} + \underbrace{\ln\frac{3N}{2}}_{\text{kicsi}} + \underbrace{\ln\delta E}_{\text{kicsi}}$$

$N \to \infty$ -re $\quad \boxed{S = k_B \ln\Omega_0}$ $\quad \to$ az állapotok nagyrésze a fázisgömb felszínén van, ezért közelítőleg igaz ez a formula

Ω_0-ra más lett volna a levezetés, mert E=áll Ω_0-nál b)



$$\left.\begin{aligned} E &= E_1 + E_2 \\ N &= N_1 + N_2 \end{aligned}\right\} \text{megmaradnak} \quad (e^-, p^+, n^0\text{-ra})$$

$$\Omega = \sum_{E_1, N_1} \underbrace{\Omega_1(E_1, N_1)\, \Omega_2(E - E_1, N - N_1)}_{\text{adott kiosztásban az állapotösszeg}}$$

N-re is hasonló az állapotösszeg változása!

$$\Omega \cong \Omega_1(E_1^*, N_1^*)\, \Omega_2(E - E_1^*, N - N_1^*)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial E_1}\left[\ln \Omega_1(E_1, N_1) + \ln \Omega_2(E - E_1, N - N_1)\right]$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial N_1}\left[\ln \Omega_1(\ '' \ ) + \ln \Omega_2(\ '' \ )\right]$$

$$\frac{\partial k_B \ln \Omega_1}{\partial E_1} = \frac{\partial k_B \ln \Omega_2}{\partial E_2} \iff \left(\frac{\partial S_1}{\partial E_1}\right)_{E,N} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{E,N}$$

$$\frac{\partial k_B \ln \Omega_1}{\partial N_1} = \frac{\partial k_B \cdot \ln \Omega_2}{\partial N_2} \iff \frac{\partial S_1}{\partial N_1} = \frac{\partial S_2}{\partial N_2}$$

Megint: termodin.-ban már ismert egy hasonló mennyiség

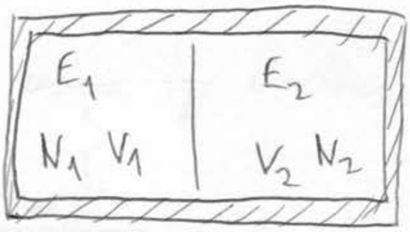
$$\Rightarrow \boxed{\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{N,E} = -\frac{\mu}{T}}$$

$$-\frac{\mu_1}{T_1} = \frac{\partial S_1}{\partial N_1} = \frac{\partial S_2}{\partial N_2} = -\frac{\mu_2}{T_2}$$

ha energia is kicserélődhet (ha részecske kicserélődhet, akkor energia is): $T_1 = T_2$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\underline{\mu_1 = \mu_2}} \quad (\text{ha } T_1 = T_2)$$

c) 

$$E = E_1 + E_2$$
$$N = N_1 + N_2$$
$$V = V_1 + V_2$$

$\uparrow$

elvileg az összes extenzív mennyiséget ideírhatom

pl. $Q = Q_1 + Q_2$

$$M = M_1 + M_2$$
$$\overline{X = X_1 + X_2}$$

$\frac{\partial S_1}{\partial X_1} = \frac{\partial S_2}{\partial X_2}$ tetsz. X extenzív menny.-re

(ez nem fenomenologikus, mert az állapotok számát elvileg is le tudjuk vezetni $\Rightarrow S$)

$-\frac{x_1}{T_1} = -\frac{x_2}{T_2}$ ha $\frac{\partial S}{\partial X} := -\frac{x}{T}$ $\leftarrow$ kis x

$\Downarrow$ $x_1 = x_2$ (ha $T_1 = T_2$)

$\Downarrow$ intenzív mennyiség

$$-\frac{p_1}{T_1} = \frac{\partial S_1}{\partial V_1} = \frac{\partial S_2}{\partial V_2} = -\frac{p_2}{T_2}$$

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}} \quad \boxed{\frac{\partial S}{\partial N} = -\frac{\mu}{T}} \quad \boxed{\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{p}{T}}$$

$$S = k_B \ln \underbrace{\Omega}_{V^N} \sim k_B \cdot N \cdot \ln V$$

$$\frac{\partial S}{\partial V} = \frac{k_B N}{V} = \frac{p}{T} \Rightarrow pV = NkT \checkmark$$

$$dS = \underbrace{\frac{\partial S}{\partial E}}_{\frac{1}{T}} dE + \underbrace{\frac{\partial S}{\partial V}}_{\frac{p}{T}} dV + \underbrace{\frac{\partial S}{\partial N}}_{-\frac{\mu}{T}} dN$$

$$dS = \frac{1}{T}\left(dE + p\,dV - \mu\,dN\right)$$

$$\boxed{dE = \underbrace{T\,dS}_{\text{hő}} - p\,dV + \mu\,dN}$$

hő: az entrópia megváltozik

entrópia ~ ln(állapotok száma)

$\Downarrow$

ha hőt közlünk a rendszerrel, megváltozik az állapotok száma

(állapotösszeg)

$$\frac{\partial}{\partial\lambda} \Big| \; E(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda \, E(S, V, N)$$

$$\lambda = 1 \rightarrow \frac{\partial E}{\partial S} \cdot S + \frac{\partial E}{\partial V} \cdot V + \frac{\partial E}{\partial N} \cdot N = E$$

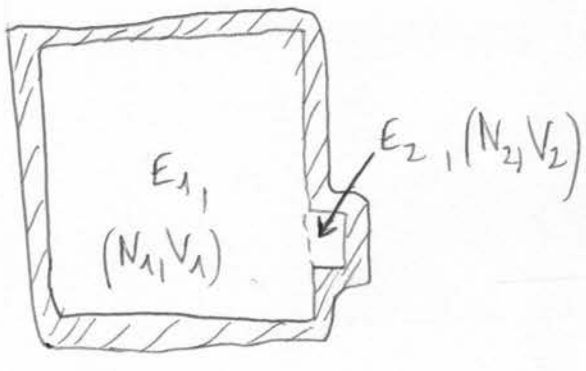
$\left(\frac{\partial E}{\partial \lambda S} = \frac{\partial E}{\partial S}, \dots\right)$

$$\boxed{T \cdot S - pV + \mu N = E}$$

az energia így viselkedik, ha a rendszer minden extenzív állapotjelzőjére homogén.

Gyakorlatban általában az intenzív mennyiségeket tudjuk, nem az extenzíveket

3) Másik levezetés: spec. eset: Kanonikus eloszlás



$$\Omega_2 \ll \Omega_1$$

$$\Omega = \sum_{E_1} \Omega_1(E_1)\, \Omega_2(\underset{E - E_1}{E_2})$$

$$\boxed{\Omega_1 \approx \Omega}$$ (nem biz., csak közelítőleg)

$$\underset{\text{valószínűség}}{P(E_2)} = \frac{\Omega_1(E_1) \cdot \Omega_2(E-E_1)}{\Omega(E)} = \frac{\Omega_1(E-E_2)\, \Omega_2(E_2)}{\Omega(E)} \approx \frac{\Omega_1(E-E_2)}{\Omega(E)} \cdot C \approx$$

az Ω_2 E_2-vel kicsit vált. ~~$E_2 \approx 0$~~

$$\approx \frac{\Omega(E-E_2)}{\Omega(E)} \cdot C$$

$$P(E_2) = C \cdot \frac{e^{S(E-E_2)/k_B}}{e^{S(E)/k_B}}$$

$$\underline{\underline{P(E_2)}} = C \cdot e^{\frac{1}{k_B} \cdot \left(S(E-E_2) - S(E) \right)} \cong C \cdot e^{-\frac{E_2}{k_B T}} \cong \underline{\underline{\frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}}$$

ahol

↳ Z-t a normálásból kapom

pl.

ha kvantumos a rendsz.:

$$P(E) = \frac{1}{Z} e^{-E/kT} \qquad E = E_\ell \quad \ell = 0, 1, \ldots$$

$$Z = \sum_{\ell=0}^{\infty} e^{-E_\ell / k_B T}$$

$$E = \mathcal{H}(q, p)$$

$$P = \frac{1}{Z} e^{-\mathcal{H}(q,p)/kT}$$

$$Z = \int e^{-\mathcal{H}(q,p)/kT} \, d^d q \, d^d p$$

↑

az összes q, p-re, nincs limit

$$\underbrace{N_A}_{\sim 6 \cdot 10^{23}} \cdot \underbrace{k_B}_{\sim 10^{-23}} = R \qquad k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-23} \, J/K$$

Minden ugyanúgy fog kinézni, mint a mikrokanonikus eloszlásnál

$(E(V, N, T) = \ldots)$, csak a valószínűséget közelítjük.

4. óra

állapotösszeg (nem az állapotok számát adja meg, hanem az össz. áll. valószínűséget)

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

vagy kl.-an:

$$Z = \int e^{-\beta \mathcal{H}(q,p)} \, d\Gamma = \int_0^\infty e^{-\beta E} \underbrace{\rho(E)}_{w(E)} dE$$

$\rho(E)$: állapotsűrűség (állapotszám E, $E+\delta$ között)

ahol $d\Gamma = d^d p \cdot d^d q$ (állapotokra „összegzés")

$$\rho(E) = \sum_l \delta(E - E_l)$$ (diszkrét en. szintek) esetén

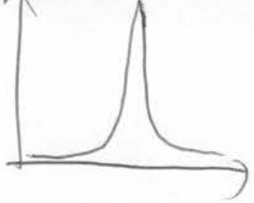
$$\Omega_0(E) \sim E^{a\cdot N} \approx E^{aN-1} = \frac{d\Omega_0}{dE} = \Omega(E+\delta E) - \Omega(E)$$

$$\int_0^\infty e^{-\beta E} E^{aN-1} dE \qquad \Omega(E,\delta E) \approx \Omega_0'(E) = w(E)\,\delta E$$

$$Z = \int_0^\infty e^{-\beta E} w(E)\, dE$$

$$S = k_B \ln \Omega(E,\delta E) = k_B\left[\ln w(E) + \ln \delta E\right] \approx k_B \ln w(E)$$

$$\int_0^\infty e^{-\beta E + \underbrace{\ln w(E)}_{S(E)/k_B}} dE$$



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

$$\underbrace{-\beta}_{\frac{1}{k_B T}} + \frac{\partial S(E^*)}{k_B\, \partial E} = 0 \quad \to \quad \boxed{\frac{\partial S(E^*)}{\partial E} = \frac{1}{T}}$$

$$Z = e^{-\beta E^* + S(E^*)/k_B} + \dots$$

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

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

$\uparrow$ $\qquad\qquad$ ~~ha T = áll~~ (Legendre-trafó)

ha kisrendszer egyensúlyba kerül egy nagy hőtartállyal $\rightarrow T \approx$ áll, de E változhat

$\Rightarrow$ előnyösebb T-t ~~állapot paraméter~~ paraméterként használni

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

$$S = k_B \cdot \beta \cdot E + k_B \cdot \ln Z$$

$$F = E - T\cdot S$$

$$dF = dE - dT\,S - T\,dS$$

$$\Rightarrow \quad dF = -dT\cdot S - p\,dV + \mu\,dN$$

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

Ideális gázra:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + (V)$$

$$Z = \int e^{-\beta \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}} \prod_{i=1}^{3N} dp_i \prod_{i=1}^{3N} dq_i \cdot \frac{1}{N!} \cdot \frac{1}{h^{3N}}$$

$\uparrow$

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l}$$

korrespondencia miatt: a kvantumos rendszerben felcserélhetőek a részecskék

klasszikusan is van bizonyos rendszer esetén

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

$$\uparrow$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

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

$$-\ln N!$$

$$\downarrow$$

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

$$\frac{\pi^{1/2} (2m k_B T)^{1/2}}{h^{1/2}} \rightarrow$$ helybeli bizonytalansága annak a részecskének, melynek a hullámhossza $\sim k_B T$

$(p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} k$

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

$$-k_B T N \cdot \frac{1}{V} = -p \qquad \boxed{pV = N k_B T}$$

- $E = ?$

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_l e^{-\beta E_l} = -\sum_l E_l \underbrace{e^{-\beta E_l}/Z}_{p_l} =$$

$$= \sum_l p_l E_l = \overline{E} = E$$

$$\Rightarrow \boxed{E = -\frac{\partial}{\partial \beta}(\ln Z)}$$

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

<u>N db harm. oszci:</u>

· klasszi.:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_i^2\right)$$

$$Z = \frac{1}{h^N}\int e^{-\beta\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_i^2}\, d\Gamma \prod_{i=1}^{N}\int e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}}dp_i \int e^{-\beta\frac{1}{2}m\omega_0^2 x_i^2}dx_i =$$

$$Z = \sqrt{\frac{\pi 2m}{\beta}}^{N}\cdot\sqrt{\frac{\pi\cdot 2}{m\omega_0^2\beta}}^{N}$$

$$Z = \frac{(2\pi)^N}{\beta^N \omega_0^N h^N} = \frac{1}{\beta^N(\hbar\omega_0)^N} = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_0}\right)^N$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln Z) = +\frac{\partial}{\partial\beta}\left(N\ln\beta + N\ln(\hbar\omega_0)\right) = \frac{N}{\beta} = Nk_B T$$

· kvantumosan:

$$E = \hbar\omega_0\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_0\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) + \dots$$

$$E = \hbar\omega_0\left(\sum_{i=1}^{N} n_i\right) + \frac{\hbar\omega_0}{2}N$$

$$Z = \sum_{\ell(n_1,n_2,\dots n_N)} e^{-\beta E_\ell} = e^{-\beta\frac{\hbar\omega_0 N}{2}}\sum_{n_1,n_2,\dots n_N=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_0(n_1+n_2+\dots n_N)} =$$

$$= e^{-\beta\frac{\hbar\omega_0 N}{2}}\left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_0 n}\right)^N = \left[e^{-\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}}\cdot\left(\frac{1}{1-e^{\beta\hbar\omega_0}}\right)\right]^N$$

msz.: $q = e^{-\beta\hbar\omega_0}$ $\quad 1 + q + q^2 + q^3 + \dots = \frac{1}{1-q}$

$$Z = \left[\frac{2}{e^{\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}} - e^{-\beta\hbar\omega_0/2}}\right]^N \cdot \frac{1}{2^N} = \frac{1}{\left(2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\right)\right)^N}$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[-N\ln\left(2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\right)\right)\right] = N\cdot\frac{2\,\mathrm{ch}(\dots)}{2\,\mathrm{sh}(\dots)}\cdot\frac{\hbar\omega_0}{2}$$

$$E = N\frac{\hbar\omega_0}{2}\cdot\mathrm{cth}\left(\beta\frac{\hbar\omega_0}{2}\right)$$

Mikor kapjuk vissza ~~az ere~~ a klasszikus eredményt?

- $T \to \infty \quad \beta \to 0$

mert:

$$\mathrm{cth}(x) = \frac{1}{\mathrm{th}(x)} \sim \frac{1}{x} \qquad \mathrm{th}(x) \approx x$$

$$\Rightarrow E \xrightarrow[T \to \infty]{} N\cdot\frac{\cancel{\hbar\omega_0}}{\cancel{2}}\cdot\frac{1}{\beta\frac{\cancel{\hbar\omega_0}}{\cancel{2}}} = Nk_BT$$

- $\hbar \to 0$ -ra ugyanez: $E \xrightarrow[\hbar \to 0]{} Nk_BT$

= Ha 2N illetve 3N részre tudtuk szétbontani a Hamilton-operátort, klasszikusan E-re $\frac{2N}{2}k_BT$ ill. $\frac{3N}{2}k_BT$-t kaptunk.

Miért?

$$Z = e^{-\beta(\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_2+\dots)}\,dq_1\,dp_1\dots = \underbrace{\int e^{-\beta\mathcal{H}_1}d\Gamma_1}_{Z_1}\,\underbrace{\int e^{-\beta\mathcal{H}_2}d\Gamma_2}_{Z_2}\dots$$

$$= Z = \prod_i Z_i = (Z_1)^N$$

$$\Rightarrow \ln Z = \sum_i \ln Z_i = N \ln Z_1$$

$$\mathcal{H} = \alpha \cdot p^\gamma$$

$$\mathcal{H} = \alpha x^\gamma$$

$$\beta p^\gamma := y \qquad \beta^{1/\gamma} p = y^{1/\gamma}$$

$$\int e^{-\beta \cdot \alpha \cdot p^\gamma} dp = \int e^{-\alpha y} \cdot \frac{1}{\gamma} \beta^{-\frac{1}{\gamma}} y^{1/\gamma - 1} dy \qquad dp = \beta^{-\frac{1}{\gamma}} y^{1/\gamma - 1} dy \cdot \frac{1}{\gamma}$$

$$Z = \beta^{-\frac{1}{\gamma}} \cdot C$$

$$\boxed{E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \sum_i \ln Z_i = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[\sum_i -\frac{1}{\gamma}\ln\beta + \ln C\right] = \sum_i \frac{1}{\gamma} k_B T}$$

ekvipartíció tétele

ahol i a (din. változókkal) független Hamiltonok száma

$\Downarrow$

i = szabadsági fokok száma

(pl. ha $\gamma = 2$ (id. gáz)

$$E = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2} k_B T = \frac{3N}{2} k_B T\Big)$$

ultrarel. gáz

$$\mathcal{H} = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

$$\mathcal{H} \approx |p| \cdot c \rightarrow \gamma = 1$$

5. óra

0) Kanonikus sokaság (ism.)

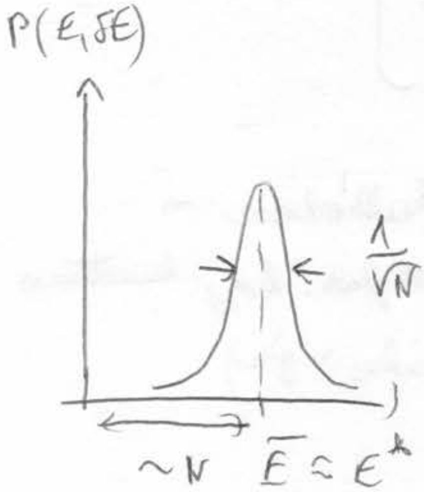
$$Z = \begin{cases} \sum_n e^{-\beta E_n} & \sim \text{deg. is számít} \\ \frac{1}{N!}\frac{1}{h^{3N}} \int d^{3N}p\, d^{3N}q\; e^{-\beta H(p,q)} \end{cases}$$

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

Termo ↑ st. ↑

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \qquad dF = -S\,dT - p\,dV + \mu\,dN$$

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



Id. gáz:

1 rész.-re

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \rightarrow Z_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \cdot \frac{p^2}{2m}}\, d^3p\, d^3q =$$

$$= \frac{V}{h^3} \cdot \left(\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}\right)^3 = \frac{V}{h^3} \cdot \left(\sqrt{2\pi m k_B T}\right)^3$$

mn!

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p_x^2}{2m}\beta}\, dp_x = \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\beta}{2m}}}$$

$$\boxed{Z = \frac{Z_1^N}{N!} = \frac{V^N}{h^{3N} N!}\left(2\pi m k_B T\right)^{\frac{3N}{2}}} = \frac{V^N}{N!} \cdot \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}}$$

$$\ln Z = -\frac{3N}{2}\ln\beta + \text{const.} \quad (\beta\text{-ban})$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\frac{3N}{2}\ln\beta + \text{const}\right)$$

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V}\bigg|_{T,N} = -k_B T \ln Z = -k_B T \cdot \ln\left[\frac{V^N}{N!}\cdot\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}}\right] =$$

$$p = -\frac{\partial}{\partial V}(-k_B T)\left[N\ln V + \text{const}\right]\bigg|_{T,N} = +k_B T N\cdot\frac{1}{V}$$

$$\boxed{pV = Nk_B T}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}\bigg|_{V,N} = \ldots = Nk_B\left\{\frac{5}{2} + \ln\left[\frac{V}{N}\left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2}\right)^{3/2}\right]\right\}$$

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}\bigg|_{T,V} = \ldots = -k_B T\ln\left[\frac{V}{N}\underbrace{\left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2}\right)^{3/2}}\right]$$

(~~de Broglie~~ termikus de Broglie hullámhossz →
→ ez fogja meghat., hogy kvantumos
vagy klasszikus a gáz)

- Oszcillátor

$$Z = \frac{1}{2\,\mathrm{sh}\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \quad (\text{kvant.}), \qquad Z = \frac{1}{\beta\hbar\omega} \quad (\text{klassz.})$$

1) Paramétertől függő Hamilton-operátor

$\hat{H}_\lambda$: λ-tól függ pl. $H_m = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

Áll.:

$$\boxed{\left\langle \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle = -k_B T \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda}}$$

Biz.:

$$Z_\lambda = \int e^{-\beta H_\lambda} \cdot \frac{d^f p \, d^f q}{h^f}$$

i) kl.

$$\left\langle \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle = \underbrace{\frac{1}{Z} \int \frac{d^f q \, d^f p}{h^f} \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \cdot e^{-\beta H_\lambda}}_{\frac{\partial \overline{E}}{\partial \lambda}} = \frac{-\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \lambda} Z_\lambda}{Z} =$$

$$= -k_B T \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda}$$

ii) kvantumos: Feynman-Hellman-tétel:

$$\langle \varphi_i | \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \varphi_i \rangle = \frac{\partial E_i}{\partial \lambda}$$

↓ biz.:

$$H_\lambda | \varphi_i \rangle = E_i | \varphi_i \rangle$$

$$\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1$$

$$\langle \varphi_i | \hat{H}_\lambda | \varphi_i \rangle = E_i \quad \Big/ \frac{\partial}{\partial \lambda}$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} E_i = \langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} | \overbrace{H_\lambda | \varphi_i \rangle}^{E_i | \varphi_i \rangle} + \langle \varphi_i | \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} | \varphi_i \rangle + \overbrace{\langle \varphi_i | H_\lambda}^{\langle \varphi_i | E_i} | \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \rangle =$$

$$= E_i \Big(\underbrace{\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_i | \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \rangle}_{0} \Big) + \langle \varphi_i | \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \varphi_i \rangle \qquad \square$$

mert $\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = \frac{\partial}{\partial \lambda} 1 = 0$

$$\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} | \varphi_i \rangle + \langle \varphi_i | \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \rangle = 0$$

$$\langle \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \rangle = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_\lambda} \cdot \langle \varphi_i | \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} | \varphi_i \rangle \overset{\text{F.-H.-tétel}}{=} \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_\lambda} \cdot \frac{\partial E_i}{\partial \lambda} =$$

$$= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda}$$

$$Z_\lambda = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} Z_\lambda = -\beta \sum_i \frac{\partial E_i}{\partial \lambda} e^{-\beta E_i}$$

iii) Pl. oszill.: $\quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

a) $\overline{x^2} = ?$

Ml.: $\quad x^2 = \frac{2 \partial H}{\partial m \omega^2} = \frac{2}{m} \frac{\partial H}{\partial \omega^2}$

$$\underline{\underline{\langle x^2 \rangle}} = \frac{2}{m} \langle \frac{\partial H}{\partial \omega^2} \rangle = \frac{2}{m} \cdot \frac{\partial F}{\partial \omega^2} = \frac{2}{m} \Big(-k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \omega^2} \Big) =$$

$$= \frac{2}{m}(-k_B T) \cdot \frac{\partial - \ln(\beta \hbar \omega)}{\partial \omega^2} = \frac{2 k_B T}{m} \frac{\partial \ln \omega}{\partial \omega^2} = \frac{2 k_B T}{m} \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\partial \omega}{\partial \omega^2} =$$

$$= \frac{2 k_B T}{m} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \frac{1}{2\omega} = \underline{\underline{\frac{k_B T}{m \omega^2}}} \qquad \text{egyébként} \quad \frac{\int x^2 \cdot e^{-\beta H} dx}{Z} = \ldots$$

b)

$$\langle p^2\rangle;\ \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = \overline{H} - \overline{\frac{1}{2} m\omega^2 x^2} = k_B T - \frac{1}{2}\cancel{m\omega^2}\frac{k_B T}{\cancel{m\omega^2}} = \frac{1}{2}k_B T$$

$$\overline{H} = E$$

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial\beta}\ln\beta = \frac{1}{\beta} = k_B T$$

$$\Rightarrow \langle p^2\rangle = m k_B T$$

c)

$$\sqrt{\overline{x^2}\cdot\overline{p^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

← oszcill. kvantumosan: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$$

$$\langle \hat{x}^2\rangle = \frac{2}{m}\left\langle\frac{\partial \hat{H}}{\partial \omega^2}\right\rangle = \frac{2}{m}\frac{\partial F}{\partial\omega^2} = \frac{2}{m}(-k_B T)\frac{\partial \ln Z}{\partial \omega^2} =$$

$$= -\frac{2}{m}k_B T\frac{\partial}{\partial\omega^2}\left(-\ln 2 - \ln \operatorname{sh}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) =$$

$$= \frac{2k_B T}{m}\cdot\frac{1}{\operatorname{sh}\frac{\beta\hbar\omega}{2}}\cdot\operatorname{ch}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\cdot\frac{\beta\hbar}{2}\underbrace{\frac{\partial\omega}{\partial\omega^2}}_{\frac{1}{2\omega}} =$$

$$= \frac{2\cancel{k_B T}}{m}\operatorname{cth}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\cdot\frac{\cancel{\beta}\hbar}{2}\cdot\frac{1}{2\omega} =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2m\omega^2}\operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

$T\to 0$

ha $\beta\to\infty$

$$\langle x^2\rangle \to \frac{\hbar\omega}{2m\omega^2}$$

$$\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle = \overline{H} - \frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2} =$$

msz.: $-\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\ln \operatorname{sh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\right) =$

$$\cancel{=\frac{\operatorname{ch}(\beta\hbar\omega)\,\hbar\omega}{2}}$$

$$= \operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\cdot\frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\Rightarrow \left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\overline{\frac{p^2}{2m}} = \overline{\frac{1}{2}m\omega^2 x^2} = \frac{\hbar\omega}{4}\operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

$$\sqrt{\overline{\frac{p^2}{2m}}\cdot\overline{\frac{1}{2}m\omega^2x^2}} = \frac{\omega}{2}\sqrt{\overline{p^2}\,\overline{x^2}} = \frac{\hbar\omega}{4}\operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

$$\sqrt{\overline{x^2}\cdot\overline{p^2}} = \operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\cdot\frac{\hbar}{2}$$

$$\sqrt{\overline{x^2}\cdot\overline{p^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$T \to \infty$, $\beta \to 0$

$$\overline{x^2} = \frac{\hbar\omega}{4} \operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \cdot \frac{1}{\frac{1}{2}m\omega^2} = \frac{1}{\cancel{2}} \cdot \frac{\cancel{2}}{\beta} \cdot \frac{1}{m\omega^2} = \frac{k_B T}{m\omega^2}$$

$$\overline{p^2} \xrightarrow[\infty]{T} m k_B T$$

2) Maxwell-eloszlás

$$\overline{A(p_1)} = \frac{\int A(p_1)\, e^{-\beta H}\, d^f p\, d^f q}{Z} \overset{\uparrow}{=} \frac{\int A(p_1)\, e^{-\beta \frac{p_1^2}{2m}}\, d^3 p_1}{\int e^{-\beta \frac{p_1^2}{2m}}\, d^3 p_1} =$$

1 rész. T hőm. hőtartályban

ha csak 1 komp.-tól függ

$$= \int A(p_1)\, \underbrace{P(p_1, \delta p_1)}\, d^3 p_1 \quad ; \quad \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}\, d^3 p}{\underbrace{\int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}\, d^3 p}} = P(p_1, \delta_1)$$

a val.-e, hogy p_1, $p_1 + \delta p_1$ között van a rész. impulzusa (T hőm.-en)

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

sebességekre:

$$P(\underline{v}, d^3 v) = \frac{e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} \cdot m^3 d^3 v}{(2m\pi k_B T)^{3/2}} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{mv^2}{2}}\, d^3 v$$

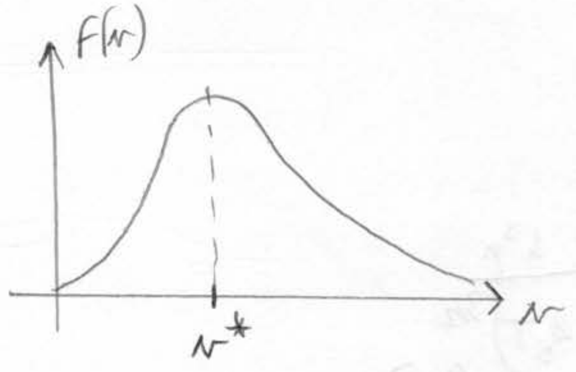
$\underline{p} = m\underline{v}$

$d^3 p = m\, d^3 v \qquad \underline{v} \to v = |\underline{v}| \qquad \Rightarrow d^3 p = m\, d^3 v = m\, 4\pi v^2 dv$

$$P(v, dv) = F(v)\, dv = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{\beta m v^2}{2}} \cdot 4\pi v^2\, dv$$

$$\boxed{F(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \cdot 4\pi v^2 \cdot e^{-\beta\frac{mv^2}{2}}}$$

→ annak a vsz.-e, hogy a rész. sebesség v és $v+dv$ közé esik



- $$\ln F(v) = \text{const} + \ln v^2 - \frac{\beta m v^2}{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial v} \ln F(v) = \frac{2v^*}{v^{*2}} - \beta m v^* = 0$$

$$\frac{2}{v^{*2}} = \beta m \Rightarrow \underline{\underline{v^*}} = \sqrt{\frac{2}{m\beta}} = \underline{\underline{\sqrt{\frac{2k_BT}{m}}}}$$

- $$\underline{\underline{\overline{|v|^n}}} = \overline{v^n} = \int_0^\infty v^n F(v)\, dv = \int v^n \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} 4\pi v^2 e^{-\frac{\beta m v^2}{2}} dv =$$

msz.:

$$I = \int_0^\infty e^{-ax^2} \cdot x^n \cdot dy = \frac{1}{2} a^{-\frac{n+1}{2}}\, \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \qquad y = ax^2$$

$$\underline{\underline{= \left(\frac{2k_BT}{m}\right)^{\frac{n}{2}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}}\, \Gamma\left(\frac{n+3}{2}\right)}}$$

$$\frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{2}\frac{1}{2}\cdot\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

spec. eset: $n = 2$, $\overline{v^2} = \frac{2k_BT}{m}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\overbrace{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} = \frac{3k_BT}{m}$

$$\sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot v^* = 1{,}22 \cdot v^*$$

$$\overline{|v|} = \overline{v}_{n=1} = \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} v^* \cong 1{,}13\, v^*$$

$$\Rightarrow v^* < \overline{v} < \sqrt{\overline{v^2}}$$

1 részecske energia-eloszlása:

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}, \quad P(p, d^3p) = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}\, d^3p}{(2m\pi k_B T)^{3/2}}$$

mm.: $d^3p = 4\pi p^2\, dp = 4\pi \cdot 2m\varepsilon \cdot dp$

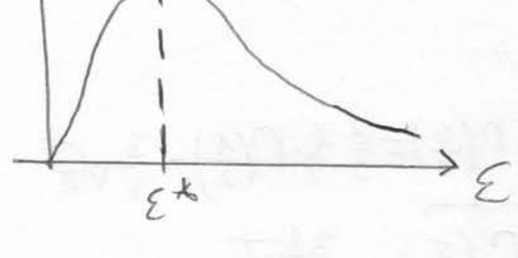
$$\sqrt{2m\varepsilon} = |p|$$

$$2m\varepsilon = p^2$$

$$2m\, d\varepsilon = 2p\, dp = 2\sqrt{2m\varepsilon}\, dp$$

$$dp = \frac{m\, d\varepsilon}{\sqrt{2m\varepsilon}}$$

$$F(\varepsilon)\, d\varepsilon = \underbrace{\frac{2}{\sqrt{\pi}}\beta^{3/2}\sqrt{\varepsilon}\, e^{-\beta\varepsilon}}_{F(\varepsilon)}\, d\varepsilon$$

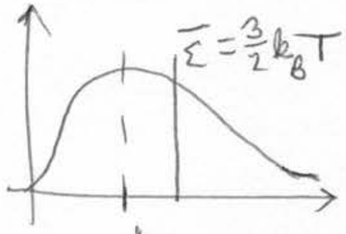


$$\ln F(\varepsilon) = const. \cdot \ln(\sqrt{\varepsilon}\, e^{-\beta\varepsilon}) = \frac{1}{2}\ln\varepsilon - \beta\varepsilon$$

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln f(\varepsilon)\Big|_{\varepsilon=\varepsilon^*} = 0 \Rightarrow \frac{1}{2}\frac{1}{\varepsilon^*} - \beta = 0$$

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} k_B T$$

$$\bar{\varepsilon} = \int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int \varepsilon \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \beta^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \cdot e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon = \ldots = \frac{3}{2} k_B T$$



= Mindkétő eloszlásfv. $(f(\varepsilon), F(p))$ széles! → Miért van ez?

Mert 1 részecskét vizsgáltunk!

⇒ ilyenkor nem igaz, hogy az átlag → max.

6. óra

Barometrikus magasság-formula, id. gáz

N részecske $\quad H(p,q) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + U(q), \quad U(q) = \sum_{i=1}^{N} U(x_i)$

$$P(p,q;\, d^{3N}q,\, d^{3N}p) = \frac{e^{-\beta H(p,q)}}{Z} \cdot d^{3N}_p\, d^{3N}_q$$

$$n(\underline{r}) = \sum_{i=1} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$$

$$\overline{n(\underline{r})} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \int e^{-\beta U(r_i)} \delta(\underline{r}-\underline{r}_i)\, d^3 r_i}{\int e^{-\beta U(q)} d^{3N} q} = \frac{N \cdot \int e^{-\beta U(\underline{r}')} \delta(\underline{r}-\underline{r}')\, d^3 r'}{\int e^{-\beta U(r)}\, d^3 r} =$$

$$= C \cdot e^{-\beta U(\underline{r})} \qquad \boxed{n(z) = n_0 \cdot e^{-\beta m g z}}$$

$U := -mgz$, id. g.: $pV = Nk_B T \rightarrow p = n k_B T \quad n = \frac{N}{V}$

$$p(z) = p_0 \cdot e^{-\beta m g z} = p_0 \cdot e^{-\frac{mgz}{k_B T}}$$

k_B mérés

(baj: légkör nem izoterm)

Ekvipartíció tétel: klasszikus eset

$$n, f \rightarrow \underbrace{x_1 \dots x_{2f}}_{\text{összes imp. és koord.}} \qquad f = 3N$$

1) $H = \lambda_1 x_1^2 + g(x_2, \dots x_{2f})$, tfh.: $e^{-\beta g(x)}$ $\underset{\pm\infty}{\times}$

$$x_1^2 = \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} \Rightarrow \overline{x_1^2} = \overline{\frac{\partial H}{\partial \lambda_1}} = \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda}, \text{ ahol } F_\lambda = -k_B T \ln Z_\lambda,$$

$$Z_\lambda = \frac{1}{h^f} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\left(\lambda_1 x_1^2 + g(x_2, \dots x_{2f})\right)} dx_1 \dots dx_{2f} =$$

$$= C \sqrt{\frac{\pi}{\beta \lambda_1}} = C \cdot \sqrt{\frac{\pi}{k_B}} \cdot \lambda_1^{-1/2}$$

$$\overline{x_1^2} = -\frac{\partial}{\partial\lambda_1} k_B T \ln Z_{\lambda_1} = -k_B T \frac{\partial}{\partial\lambda_1}\left(-\frac{1}{2}\ln\lambda_1\right) = \frac{1}{2} k_B T \cdot \frac{1}{\lambda_1}$$

$$\boxed{\overline{\lambda_1 x_1^2} = \frac{1}{2} k_B T}$$

2) Áll.: $\boxed{\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = k_B T \delta_{ij}}$ $\quad x$ (q-t és p-t is jelöl)

$$\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = \frac{1}{Z}\int x_i \cdot \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H} \cdot d^{2f} x = (*), \quad Z = \int e^{-\beta H} d^{2f} x$$

mx.:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(x_i e^{-\beta H}\right) = \underbrace{\frac{\partial x_i}{\partial x_j}}_{\delta_{ij}} \cdot e^{-\beta H} + x_i e^{-\beta H} \cdot \left(-\beta \cdot \frac{\partial H}{\partial x_j}\right)$$

$$x_i e^{-\beta H} \cdot \frac{\partial H}{\partial x_j} = \left(\delta_{ij} \cdot e^{-\beta H} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(x_i e^{-\beta H}\right)\right) \cdot \underbrace{\frac{1}{\beta}}_{k_B T}$$

$$(*) = \frac{1}{Z}\left(k_B T \delta_{ij} \underbrace{\int e^{-\beta H} dx_j}_{Z} - k_B T \underbrace{\left(x_i e^{-\beta H}\right)_{-\infty}^{\infty}}_{\downarrow\ 0}\right) =$$

$(e^{-\beta H} \to 0)$ ($\Leftarrow$ potenciál lecseng a ∞-ben
(pl. doboz a zárt rész.)
imp. lecseng) ?

$$= k_B T \delta_{ij}$$

Következmények

a) Legyen $H(p,q)$ homogén 2-fokú polinomja p, q-nak ($f = 3N$)

$$H(\lambda p, \lambda q) = \lambda^2 H(p,q)$$

Euler-tétel: $H(p,q) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\left(p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} + q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$

$$\Rightarrow \boxed{\overline{H(p,q)} = E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\left(\overline{p_i \frac{\partial H}{\partial p_i}} + \overline{q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}}\right) = \frac{1}{2}\cdot 2 f k_B T = f\cdot k_B T}$$

Euler-tétele: $f(\lambda x, \lambda y) = \lambda^{p}\cdot f(x,y)$

áll.: $f(x,y) = \frac{1}{p}\left(x\frac{\partial f}{\partial x} + y\frac{\partial f}{\partial y}\right)$

Biz.: $\frac{\partial}{\partial\lambda} f(\lambda x, \lambda y) = \frac{\partial f}{\partial(\lambda x)}\frac{\partial(\lambda x)}{\partial\lambda} + \frac{\partial f}{\partial(\lambda y)}\frac{\partial(\lambda y)}{\partial\lambda} = \frac{1}{\lambda}\left(\frac{\partial f}{\partial x}x + \frac{\partial f}{\partial y}y\right) =$

$\underset{\lambda=1}{\uparrow}\ = p\cdot\lambda^{p-1}\cdot f(x,y)$

b) $K = \frac{1}{2}\sum_i p_i \frac{\partial K}{\partial p_i} = \frac{1}{2}\sum_i p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \Rightarrow \overline{K} = \frac{1}{2} f k_B T$

Euler $\qquad H = K + V(\cancel{p}, q)$

$f = 3N$ id. gáz.

$\overline{K} = \overline{H} = E = \frac{3}{2} N k_B T$

ha $H(p, \cancel{q})$

Viriáltétel

$H = K + \Phi(q) + U^{fal}$

(kinetikus en.)

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} - F_j\ ,\quad F_j = -\frac{\partial U^{fal}}{\partial q_j}$$

$$\sum_{i=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial H}{\partial q_j}} = 3Nk_BT = \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial \phi}{\partial q_j}} - \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j F_j} =$$

$$= 3pV + \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial \phi}{\partial q_j}}$$

$$\to -\oiint p \, d\underline{A} \cdot \underline{r} =$$

F és dA ellentétes előjelű

$$= -\iiint \underbrace{\operatorname{div} \underline{r}}_{3} \cdot p \, dV = 3pV$$

$p(\underline{r}) = \text{áll}$

pl. párpotenciálra jó

$$\boxed{pV = Nk_BT - \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3N} \overline{q_i \frac{\partial \phi}{\partial q_i}}}$$

$\underbrace{Nk_BT}_{\text{id. gáz}}$ — kölcsönhatás járuléka

az állapotegyenlet általános alakja

(ha $K(p, \cancel{X})$ és $V(\cancel{X}, q)$)

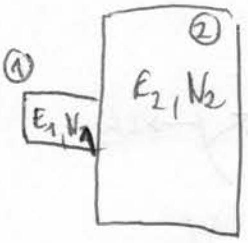
Ha ϕ k-adrendű polinom

$$\overset{\text{Euler}}{\Longrightarrow} \quad \phi = \frac{1}{k} \sum q_i \frac{\partial \phi}{\partial q_i}$$

$$\Rightarrow pV = Nk_BT - \frac{k\overline{\Phi}}{3}$$

pl. $\phi \sim r^{-1} \Rightarrow k = -1$
(Coulomb-pot.)

Nagykanonikus sokaság, T-μ sokaság



gyenge kh. ⟹ közelítőleg független

$$P(E_1,N_1)=\Omega_1(E_1,N_1)\cdot\Omega_2(E_2,N_2)$$

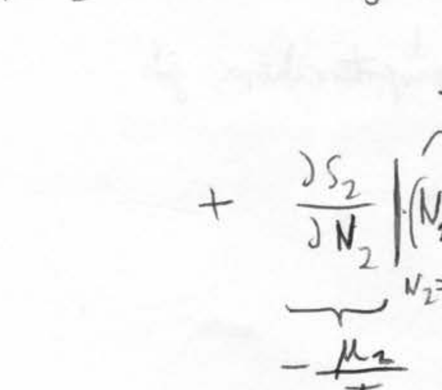
$E_1+E_2=E+\delta E$ $\quad$ $1\leftrightarrow 2$ részecske és energia csere megengedett

$N_1+N_2=N$

$$k_B \ln \Omega_2(E_2,N_2) = S_2(\underbrace{E_2}_{E-E_1},\underbrace{N_2}_{N-N_1}) \approx S_2(E,N) + \underbrace{\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\Big|_{E_2=E}}_{\frac{1}{T_2}}\overbrace{(E_2-E)}^{-E_1} +$$

$$+ \underbrace{\frac{\partial S_2}{\partial N_2}\Big|_{N_2=N}}_{-\frac{\mu_2}{T_2}}\overbrace{(N_2-N)}^{-N_1} + \ldots =$$

$$P(E_1,N_1)\approx \Omega_1(E_1,N_1)\, e^{-\frac{E_1}{k_B T_2}+\frac{\mu_2}{T_2 k_B}\cdot N_1} \qquad \beta=\frac{1}{k_B T} \quad \alpha=-\frac{\mu}{k_B T}$$



$$P(E,N)=\Omega_1(E,N)\cdot e^{-\beta E-\alpha N}$$

↓ 1. rsz. állapotszáma

1 részecskére

$$Z=\sum_{N=0}^{\infty}\left(\sum_{n} e^{-\beta E_n(N)-\alpha N}\right)=\sum_N e^{-\alpha N} Z_N$$

Z : nagykanonikus áll. összeg

$$P(E_l, N_l) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_l - \alpha N_l}$$

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l - \alpha N_l}$$

mert:

$$\left.\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right|_\alpha = \sum_l e^{-\beta E_l - \alpha N_l} \cdot (-E_l) = -Z \cdot \overline{E}$$

$$\left.\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right|_{\alpha = \text{áll}} = -Z\overline{E} \Rightarrow \overline{E} = -\left.\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right|_\alpha$$

$$\left.\frac{\partial Z}{\partial \alpha}\right|_\beta = -Z\overline{N} \Rightarrow \overline{N} = -\frac{1}{Z}\left.\frac{\partial Z}{\partial \alpha}\right|_\beta = -\left.\frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha}\right|_\beta = -\left.\frac{\partial \ln Z}{\partial \left(-\frac{\mu}{k_B T}\right)}\right|_\beta =$$

$$= k_B T \cdot \left.\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}\right|_T$$

$$\left.\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}\right|_\alpha = Z\overline{E^2} \qquad \left.\frac{\partial^2 Z}{\partial \alpha^2}\right|_\beta = Z \cdot \overline{N^2}$$

$$\overline{E^2} - \overline{E}^2 = \frac{1}{Z} \cdot \left.\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}\right|_\alpha - \frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)^2 = \frac{\partial}{\partial \beta}\left.\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)\right|_\alpha = -\left.\frac{\partial \overline{E}}{\partial \beta}\right|_\alpha =$$

$$= -\frac{\partial \overline{E}}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial \beta} = +\underbrace{\overline{c_V}}_{\to \vartheta(N)} \cdot k_B T^2 \to \vartheta(1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \beta} = \frac{1}{\frac{\partial \beta}{\partial T}} = \frac{1}{\frac{\partial\left(\frac{1}{k_B T}\right)}{\partial T}} = \frac{1}{-\frac{1}{k_B T^2}} = -k_B T^2$$

$$\Delta E = \sqrt{\overline{E^2} - \overline{E}^2} \sim \sqrt{\overline{c_V}\, k_B T^2} \sim \vartheta(N^{1/2})$$

$$\frac{\Delta E}{\underset{\sim \vartheta(N)}{E}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

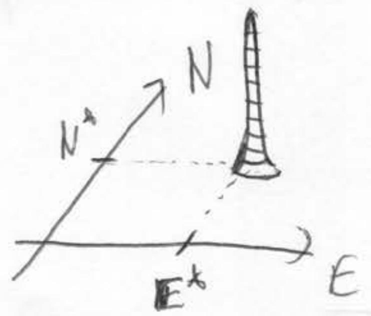
$N = N_1 \to$ míg ez is makroszkopikus minta
ilyenkor éles az eloszlás

$$\overline{N^2} - \overline{N}^2 = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \alpha^2}\bigg|_\beta - \left(\frac{1}{Z}\cdot\frac{\partial Z}{\partial \alpha}\bigg|_\beta\right)^2 = \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{1}{Z}\cdot\frac{\partial Z}{\partial \alpha}\right)\bigg|_\beta = \frac{\partial \overline{N}}{\partial \alpha}\bigg|_\beta =$$

$$\alpha = -\frac{\mu}{k_B T}$$

$$= -k_B T \frac{\partial \overline{N}}{\partial \mu}\bigg|_T \sim \vartheta(N)$$

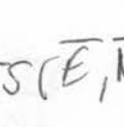
$$\frac{\Delta N}{N} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$



$$Z = \sum_{E,N} e^{-\beta E - \alpha N} \underbrace{\Omega(E,N)}_{e^{\frac{1}{k_B} S(E,N)}} \cong e^{-\beta E^* - \alpha N^* + \frac{1}{k_B} S(E^*, N^*)} \quad \Delta E \Delta N$$

az 1. sz. összeg lehetséges energiájára és részecskeszámára

lépcsőfv.-el helyettesítjük (téglatest) az eloszlást



$$-k_B T \ln Z = E^* - \mu N^* - TS(E^*, N^*) = \overline{E} - \mu \overline{N} - TS(\overline{E}, \overline{N}) =$$

$$= \Phi(T, V, \mu)$$

$$E(S, V, N)$$

$$\downarrow \quad \downarrow$$

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

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

Példa: Ideális gáz

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{N!}\frac{1}{h^f}\int d_q^f d_p^f\, e^{-\beta H(p,q,V)}}_{Z_N} e^{-\underline{\alpha N}} = \qquad \nwarrow \frac{-\mu}{k_B T} N = -\mu\beta N$$

$$\leftarrow \mathcal{Z} = \sum_e e^{-\beta E_e - \alpha N_e}$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} Z_N e^{-\alpha N}$$

$$Z_N = \frac{Z_1^N}{N!} \qquad Z_1 = \frac{\int d^3p\, d^3q}{h^3} e^{-\beta\frac{p^2}{2m}} = \frac{V}{h^3}\left(\sqrt{\frac{\pi}{\frac{\beta}{2m}}}\right)^3 = V\left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

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

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{Z_1^N}{N!} \cdot e^{\beta\mu N} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\left(Z_1 \cdot e^{\beta\mu}\right)^N}{N!} = e^{Z_1 \cdot e^{\beta\mu}}$$

$$\Phi = -k_B T \ln \mathcal{Z} = -k_B T \cdot Z_1 e^{+\beta\mu} = -k_B T \cdot N$$

$$\boxed{N = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}\bigg|_{T,N,V} = +\cancel{k_B T} Z_1 \cdot \cancel{\beta} \cdot e^{\beta\mu} = Z_1 e^{\beta\mu}} \Rightarrow \mu(T,N,V)$$

$$\boxed{\mu(T,N,V) = k_B T \ln \frac{N}{Z_1} = k_B T \ln\left[\frac{N}{V}\left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T}\right)^{3/2}\right]}$$

ahol $Z_1 = V \cdot \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$

$$p = -\frac{\partial \Phi}{\partial V}\bigg|_{T,\mu} = +\overbrace{e^{\beta\mu} \cdot k_B T \cdot \frac{Z_1}{V}}^{N} = \frac{N k_B T}{V} \rightarrow pV = N k_B T$$

• $E=?$ Gibbs-Duhem-reláció:

$$(dE = TdS - p\,dV + \mu\,dN)$$

$$\boxed{E = TS - pV + \mu N}$$

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

$$\boxed{\phi\,(T,V,\mu) = -pV}$$ → Ebből is kijön az állapotegy., mert $\phi = -Nk_BT$

$$S = -\frac{\partial \phi}{\partial T}\Big|_{V,\mu} = \frac{\partial}{\partial T}\Big(k_B T \underbrace{Z_1\, e^{\beta\mu}}\Big)\Big|_{V,\mu}$$

az N-es alakot nem írhatom be, mert ~~...~~ μ a rögzített és V

⋮

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

• Másik levezetés:

$$\overline{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\Big|_\alpha = \dots = \frac{3}{2} N k_B T$$

Nagykanonikus sokaság:

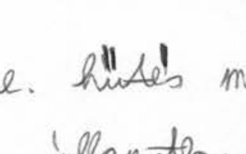
könnyű vele a (nem kölcsönható) kvantumrendszerek leírása

Kvantumgázok

bozonok (egész spinű) }
fermionok (feles spinű) } más statisztika

pl. hűtés más: sok részecske akar alacsony energiás állapotba kerülni → bozonoknál ugyanarra a szintre kerülnek (Bose-kondenzátum) → makroszkopikusan válik megfigyelhetővé az alapállapot.

→ fermionoknál nem tudnak ugyanarra a szintre kerülni → Fermi-szint, állapotok „befagyása"



$\varepsilon_0, \varepsilon_1, \ldots$ energiaállapotok
$\downarrow \ \downarrow$
$n_0, n_1, \ldots$ ott lévő rész.-k száma

$$N = \sum_l n_l \qquad n_i = \begin{cases} \text{Bose–Einstein } & n_i = \{0, 1, \ldots\} \\ \text{Fermi–Dirac } & n_i = 0, 1 \end{cases}$$

$$E = \sum_l \varepsilon_l n_l$$

$$Z = \sum_{\{n_0, n_1, \ldots\}} e^{-\beta E\{n\} + \beta\mu N\{n\}} = (*)$$

→ így n_i sorozatot megadva egyértelműen megadjuk a makroállapotot

$\downarrow$

↓
baj: végtelen sok ilyen makroállapot van → a Σ-nál vigyázni kell

$$\circledast = \sum_{\{n\}} e^{-\beta \sum_l \varepsilon_l n_l + \mu\beta \sum_l n_l} = \sum_{\{n\}} e^{-\beta \sum_l n_l (\varepsilon_l - \mu)} =$$

$$= \prod_l e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) n_l}$$

FD: $n_l = 0, 1$
BE: n_l: $0, 1, 2, \ldots$

$$Z_{FD} : \prod_l \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)$$

$$Z_{BE} = \prod_l \left(1 + \underbrace{e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}}_{q} + e^{-2\beta(\varepsilon_l - \mu)} \ldots\right) = \prod_l \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}}$$

$\frac{1}{1-q}$ HA $|q| < 1$

Ált. $|q| < 1$ teljesül

$$\prod_l \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)^{-1}$$

A további eredmények akkor jók, ha a felösszegzés lehetséges ~~(bozon)~~ (bozonokra nem mindig)

$$\left.\begin{aligned} E &= \sum_l \varepsilon_l \langle n_l \rangle \\ N &= \sum_l \langle n_l \rangle \end{aligned}\right\} \text{ ~~átlagértékek~~ átlagértékek}$$

$$Z = \sum_{\{n\}} e^{-\beta \sum n_l (\varepsilon_l - \mu)}$$

$$\sum_{\{n\}} n_k \, p(\{\underline{n}\}) = \langle n_k \rangle$$

kiválasztott szint átlaga

msz.:

$$p(\{n\}) = \frac{e^{-\beta \sum_l n_l (\varepsilon_l - \beta)}}{Z} \qquad \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} e^{-\beta \sum_l n_l (\varepsilon_l - \mu)} =$$

$$= -\beta n_k e^{-\beta \sum_l n_l (\varepsilon_l - \mu)} =$$

$$-\sum \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} e^{-\beta \sum_l n_l (\varepsilon_l - \mu)} / Z =$$

$$-\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \sum_{(n)} e^{-\beta \sum_l n_l (\varepsilon_l - \mu)} / Z = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \ln Z$$

$$\ln Z = \sum_l \pm \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right) \qquad \begin{matrix} + \text{FD} \\ - \text{BE} \end{matrix}$$

$$\underline{\underline{\langle n_k \rangle}} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \left(\pm \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right)\right) =$$

$$= -\frac{1}{\cancel{\beta}} \pm \frac{1}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \left(\pm (-\cancel{\beta}) \cdot e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right) = \underline{\underline{\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \pm 1}}}$$

$$E = \sum_l \varepsilon_l \langle n_l \rangle = \sum_l \varepsilon_l n(\varepsilon_l)$$

ahol $\underline{\underline{n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1}}}$ $\Rightarrow$ megmondja, hogy ε energiaszinten várhatóan hány rész. lesz

~ 48

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \dots$$

Makroszkopikus doboz $\Rightarrow L \gg \lambda$

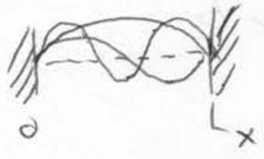
Állapotok száma? Részecskeszám?

• van spin (!), de nem hat kölcsön vele a részecske:

s spin esetén $(2s+1) = g_s$ degenerációs fok

(~~fotonoknál~~ fononoknál 0 állapot nem lehet 0 tömeg miatt)

Téglatest alakú doboz



$$\Psi_n(x) = \sin\Big(\underbrace{\frac{x}{L_x} \cdot \pi n_x}_{x\,k_x}\Big) \cdot A \qquad \left(\frac{n_x \pi}{L_x} = k_x\right)$$

$\uparrow$ norm. tényező

$n_x = 1, 2, \dots$

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2} \Big/ \Psi = +\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L_x^2} \cdot n_x^2$$

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

$$l = \{n_x, n_y, n_z\} = 1, \infty$$

$$\varepsilon_l = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

$$N = \sum_l \langle n_l \rangle = (2s+1) \sum_l n(\varepsilon_l) =$$

ha makr. a doboz ⇒ L nagy ⇒ $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \cdot \frac{1}{L_x^2} << n_x^2$

sok állapot fog tartozni ugyanahhoz az energiához (pontosabban egy energiaszűk környezetben)

$$= (2s+1) \cdot \int_0^\infty n(\varepsilon)\, \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

$\rho(\varepsilon) = \sum_l \delta(\varepsilon - \varepsilon_l)$ állapotsűrűség

↓

ilyen formában nem szeretjük, meg diszkrét ~~(tüsz)~~ tüskékből áll

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon} \qquad D(\varepsilon) = \sum_l \Theta(\varepsilon - \varepsilon_l) = \{ \# \text{ szint}: \varepsilon_l < \varepsilon \}$$

↙

ez a mennyiség már szerepelt az első órákon!

$\varepsilon_l < \varepsilon$ → hány szintre igaz?

$$\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} < \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2 \pi^2}$$

mivel L-ek nagyok, ha n-ek nőnek, a bal oldal ≈ folytonosan változik

$\frac{4\pi}{3} \cdot \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2} L_x L_y L_z$ → ellipszoid térfogata: $\frac{4\pi}{3} abc$

⇒ ebben a Θ értékek is benne vannak, de nekünk csak az $n_x, n_y, n_z > 0$ rész kell (térfogat $1/8$-a)

$$\frac{1}{\cancel{8}_2}\frac{\cancel{4}\pi}{3}\left(\frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2\pi^2}\right)^{3/2}\cdot \underbrace{L_x L_y L_z}_{V}$$ ~~(ebben lesz)~~

(1 kockában lesz 1 állapot a fázistérben)

ha L nagy $\Rightarrow$ $D(\mathcal{E})$ is közelíthető folytonos fv.-el

$$D(\mathcal{E}) = \frac{\cancel{\pi}}{6}\cdot\frac{1}{\pi\cancel{^2}2}\;\frac{(2m\mathcal{E})^{3/2}}{\hbar^3}\cdot V$$

$$g(\mathcal{E}) = \frac{d}{d\mathcal{E}}D(\mathcal{E}) = \frac{\cancel{3}}{\cancel{2}}\cdot\cancel{2}m\cdot\frac{4\pi}{\cancel{6\pi^2}}\frac{(2m\mathcal{E})^{1/2}}{\hbar^3}\cdot V$$

$$\boxed{\begin{aligned} N &= (2s+1)\frac{V}{\hbar^3}\int_0^\infty d\mathcal{E}\cdot 4\pi(2m\mathcal{E})^{1/2}\cdot\frac{1}{e^{\beta(\mathcal{E}-\mu)}\pm 1} \\ E &= \int_0^\infty n(\mathcal{E})\cdot g(\mathcal{E})\cdot\mathcal{E}\,d\mathcal{E} = (2s+1)\cdot\frac{V}{\hbar^3}\int_0^\infty d\mathcal{E}\cdot 4\pi\cdot(2m\mathcal{E})^{1/2}\frac{\mathcal{E}}{e^{\beta(\mathcal{E}-\mu)}\pm 1}\end{aligned}}$$

$$\frac{N}{V} = \ldots$$

$$\frac{E}{V} = \ldots$$

8. óra

$$\frac{E}{V} = \dots$$

$$\left\{ \frac{N}{V} = (2s+1) \int_0^\infty n(\varepsilon)\cdot\rho(\varepsilon)\, d\varepsilon \right.$$

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{6\pi^2}\cdot\frac{1}{\hbar^3}\cdot(2m\varepsilon)^{3/2}\cdot V$$

$$\Rightarrow \quad D(\varepsilon) = C\cdot\varepsilon^{3/2}\cdot V \quad \xrightarrow{\frac{d}{d\varepsilon}} \quad \rho(\varepsilon) = \frac{3}{2}C\cdot\varepsilon^{1/2}\cdot V$$

ált. eset: $D(\varepsilon) = C\cdot V\cdot\varepsilon^{\alpha}$ $\quad$ ($\alpha = \frac{3}{2}$ klassz. id. gáz esetén)

Emlékeztető:

$$D(\varepsilon) = \Gamma(\varepsilon) = \frac{1}{h^3}\int\limits_{\mathcal{H}(q,p)<\varepsilon} dp_x\, dp_y\, dp_z\, dx\, dy\, dz =$$

id. gáz esetén láttuk, hogy ez ugyanazt az állapotsűrűséget adja, amit az első pár órákon (a doboz zárás nem lényeges)
a klasszikus számolás is ugyanúgy jó

$$= \frac{1}{h^3}\cdot V\cdot \int\limits_{\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)<\varepsilon} dp_x\, dp_y\, dp_z = \frac{4\pi/(2\pi)^3}{3\, h^3/(2\pi)^3}\cdot V\cdot(2m\varepsilon)^{3/2} = \frac{1}{6\pi^2}\frac{(2m\varepsilon)^{3/2}}{\hbar^3}$$

Relativisztikus gáz: $\mathcal{H} = c \cdot |p|$

$$\varepsilon(p) = c|p|^{\beta}$$

$$|p| = \left(\frac{\varepsilon}{c}\right)^{\frac{1}{\beta}}$$

klassz. gáz: $\beta = 2$

relat. gáz: $\beta = 1$

$$\Rightarrow D(\varepsilon) \sim \left(\frac{\varepsilon}{c}\right)^{3/\beta}$$

d dim. ban: $D(\varepsilon) \sim \left(\frac{\varepsilon}{c}\right)^{d/\beta}$

pl. 2 dim. ban a Bose-gáz nem ~~test~~ kondenzálódni !)
(bozonok)

$$D(\varepsilon) = V \cdot C \cdot \varepsilon^{\alpha}$$

$$\rho(\varepsilon) = V \cdot C \cdot \alpha \cdot \varepsilon^{\alpha-1}$$

$$N = (2s+1) \int_0^{\infty} n(\varepsilon)\, \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon = (2s+1) \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \pm 1} \cdot V \cdot C \cdot \alpha \cdot \varepsilon^{\alpha-1}\, d\varepsilon$$

Dimenziótlanítsuk az integrált!

$$\varepsilon = x \cdot kT$$

$$\varepsilon = \frac{x}{\beta}$$

$$x = \varepsilon \cdot \beta \qquad dx = \beta \cdot d\varepsilon$$

$$\frac{N}{V} = (2s+1) \frac{\alpha \cdot C}{\beta^{\alpha-1} \beta} \int_0^{\infty} \frac{dx \cdot x^{\alpha-1}}{e^{x-\beta\mu} \pm 1} = (2s+1) \cdot \frac{\alpha \cdot C}{\beta^{\alpha}} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^{\alpha-1}\, dx}{e^{x-\beta\mu} \pm 1}}_{f\left(-\frac{\mu}{kT}\right)} =$$

$$= (2s+1) \cdot \alpha \cdot (kT)^{\alpha} \cdot C \cdot f\left(-\frac{\mu}{kT}\right)$$

$$\frac{V}{N} = r_0^3 ; \qquad \alpha = \frac{3}{2} \quad \varepsilon \sim kT = \beta \quad p \sim \sqrt{\beta}$$

$$|p|^3 \sim \beta^{3/2}$$

$$C = \frac{1}{h^3} \cdot \ldots$$

$$\frac{1}{r_0^3} = (\ldots) \ldots \frac{|p_T|^3}{h^3}$$

$$\frac{h^3}{r_0^3 |p_T|^3} \sim \text{kb.}\ f\left(-\frac{\mu}{kT}\right)$$

$\downarrow$

kifejezi, mennyire vagyunk közel a kvantumbizonytalanság által elérhető minimális 1 részre jutó fázistérfogatig

ha $r_0 \cdot p_T \approx h \to$ nagyok lesznek a kvantumos effektusok

$$\frac{E}{V} = (2s+1) \int_0^\infty n(\varepsilon)\, g(\varepsilon)\, \underset{\uparrow}{\underline{\varepsilon}}\, d\varepsilon \qquad \varepsilon \cdot \beta = x$$

$\vdots$ ennyi a különbség

$$\frac{E}{V} = (2s+1)\ \alpha \cdot \frac{C}{\beta^{\alpha+1}} \int_0^\infty \frac{x^\alpha}{e^{x-\beta\mu} \pm 1}\, dx$$

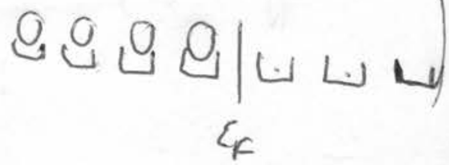
$$\frac{E}{N} = kT \cdot \frac{f_{\alpha+1}\left(-\frac{\mu}{kT}\right)}{f_\alpha\left(-\frac{\mu}{kT}\right)}$$ 1 részecskére jutó energia

Fermionok eloszlása és energiája

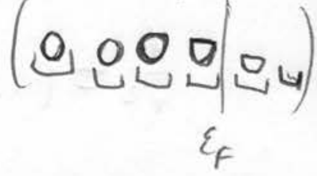
a) $n_F(\varepsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$

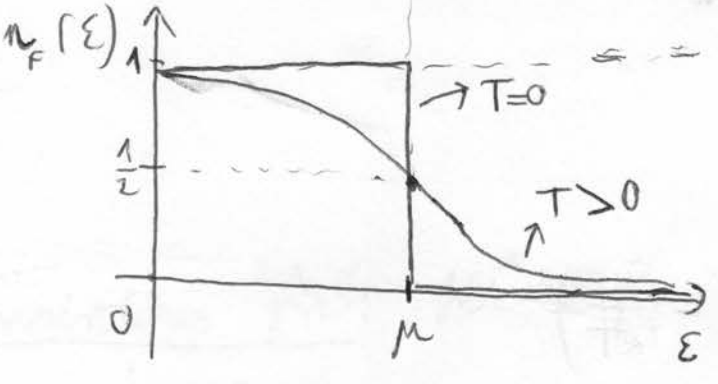
Szemléletes jelentés:

$T=0$



$T\neq 0$





$T=$ áll.
$\varepsilon=\mu$

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

ha $T\to 0$ $\beta\to\infty$ $\mu(0)=\varepsilon_F$

$$\rho(\varepsilon) = \cancel{\frac{3}{2}}\cdot\cancel{\frac{4}{3}}^{\,2}\cdot\pi\,\frac{(2m)^{3/2}V}{h^3}\cdot\varepsilon^{1/2}$$

$$N = \cancel{\frac{4\pi}{3h^3}\cdot V}\,(2s+1)\;\frac{2^{5/2}\pi\, m^{3/2}}{h^3}\cdot V\cdot\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$\mu \leftarrow$ efelett az $\int\approx 0$ ($\beta\to\infty$, $\varepsilon\to\infty$, nevező $\to\infty$)

$$N = (2s+1)\,\frac{2^{5/2}\cdot\pi\cdot m^{3/2}}{h^3}\,V\int_0^\mu \varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon = (2s+1)\,\frac{4\pi}{3h^3}\,(2m\cdot\mu)^{3/2}\cdot V$$

$$\underbrace{N}_{\text{rész.-k száma}} = (2s+1)\,\frac{4\pi}{3h^3}\,(2m\mu)^{3/2}\cdot V$$

a rendszer összes kvantummech. állapotainak száma egy adott energiáig

⇓

Fermi-eloszlás:

a legalacsonyabb energiaállapotokba beteszem az összes részecskémet → mivel nem tudom a fermionokat az alapállapotba betuszkolni, ezért valami >0 energiáig lesz a rendszer összes szintje betöltve → Fermi-energia

$$N=(2s+1)\,\frac{4\pi}{3h^3}\,(2m\varepsilon_F)^{3/2}\cdot V$$

$$\varepsilon_F=\left(\frac{N h^3}{(2s+1)\cdot V\cdot \frac{4\pi}{3}\,(2m)^{3/2}}\right)^{2/3}$$

b) $$E=(2s+1)\cdot\frac{2^{5/2}\cdot m^{3/2}}{h^3}\cdot V\int_0^{\infty}\frac{\varepsilon^{3/2}\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$$\beta\to\infty\qquad E\to(2s+1)\cdot\frac{2^{5/2}\cdot m^{3/2}}{h^3}\cdot V\underbrace{\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon^{3/2}\,d\varepsilon}_{\frac{2}{5}\varepsilon_F^{5/2}}$$

$$N\xrightarrow{\beta\to\infty}\ \dots\ \underbrace{\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon}_{\frac{2}{3}\varepsilon_F^{3/2}}$$

$$\Rightarrow\ \frac{E}{N}\xrightarrow{T\to 0}\frac{\frac{2}{5}\varepsilon_F^{5/2}}{\frac{2}{3}\varepsilon_F^{3/2}}=\frac{3}{5}\cdot\varepsilon_F$$

Ált. ban:

(id. gáz $\alpha=\frac{3}{2}$)

$$E=\dots\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon^{\alpha}\,d\varepsilon\qquad N=\dots\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon^{\alpha-1}\,d\varepsilon$$

$$\frac{\frac{1}{\alpha+1}\varepsilon_F^{\alpha+1}}{\frac{1}{\alpha}\varepsilon_F^{\alpha}}=\frac{\alpha}{\alpha+1}\cdot\varepsilon_F=\frac{E}{N}$$

nagykan. sokaság:

$$Z = e^{-\Phi/kT} \qquad \boxed{pV = -\Phi}$$

$$Z = \prod_l \left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)$$

$$\ln Z = \sum_l \pm \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}\right)$$

folytonosítva

$$\ln Z = \pm \int_0^\infty \underbrace{\rho(\varepsilon)}_{g'} \, d\varepsilon \; \underbrace{\ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}\right)}_{f}$$

$$\int g' f = \left[g f\right]_0^\infty - \int g f' \qquad g = D(\varepsilon) \text{ most}$$

$$\ln Z = \frac{1}{kT}\int_0^\infty D(\varepsilon)\cdot n(\varepsilon)\, d\varepsilon \qquad f' = \underbrace{\frac{-\beta}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \cdot \left(\pm e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right)}_{n(\varepsilon)}$$

$$\underline{\underline{kT \ln Z}} = \int_0^\infty D(\varepsilon)\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon = \underline{\underline{-\Phi = pV}}$$

msz.:

$$D(\varepsilon) = V \cdot c \cdot \varepsilon^{\alpha}$$

$$\rho(\varepsilon) = V \cdot c\, \alpha \cdot \varepsilon^{\alpha-1} \qquad D(\varepsilon) = \frac{1}{\alpha}\rho(\varepsilon)\cdot\varepsilon$$

$$pV = -\Phi = \int_0^\infty \frac{1}{\alpha} \underbrace{\varepsilon \rho(\varepsilon)\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon}_{E} = \frac{E}{\alpha}$$

$$\underline{\underline{p}} = \frac{E}{\alpha V} = \frac{\frac{\alpha}{\alpha+1}\cdot\varepsilon_F \cdot N}{\alpha \cdot V} = \underline{\underline{\frac{\varepsilon_F \cdot N}{(\alpha+1)V}}}$$

→ T=0-n a jobb oldal $\neq 0 \Rightarrow$ T=0-n is van nyomása a gáznak!

(ez kvantumos effektus)

9. óra

0) Ism.: Fermi gázok $T=0$ hőm.-en

$$pV = \frac{2}{3}E$$

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

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

$$E = \int_0^\infty n_F(\varepsilon)\,\varepsilon\,\rho(\varepsilon)\,d\varepsilon \xrightarrow{T=0} \int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon\,\rho(\varepsilon)\,d\varepsilon$$

$$p = \frac{2E}{3V} = \cancel{\frac{3}{2}}\cdot\cancel{\frac{2}{3}}(2s+1)\frac{4\pi}{3h^3}(2m)^{3/2}\cdot\underbrace{\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon^{3/2}\,d\varepsilon}_{\frac{2\varepsilon_F^{5/2}}{5}}$$

$$p \sim \varepsilon_F^{5/2}(2s+1)\frac{8\pi}{15}(2m)^{3/2}/h^3$$

$$N = \int_0^\infty n_F(\varepsilon)\cdot\rho(\varepsilon)\,d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F}\rho(\varepsilon)\,d\varepsilon$$

$$\rho = \frac{N}{V} = \cancel{\frac{3}{2}}(2s+1)\cdot\frac{4\pi}{3h^3}(2m)^{3/2}\cdot\cancel{\frac{2}{3}}\cdot\varepsilon_F^{3/2}$$

↑

anyagsűrűség

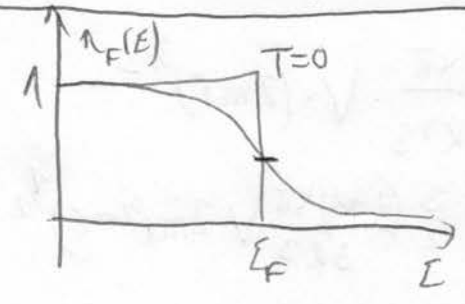
⇓

$$\varepsilon_F \sim \rho^{2/3}$$

$$\boxed{p \sim \rho^{5/3}}$$ Fermi-gáz nyomása (pl. n°csillag)

(id. gázban $p \sim \rho = \rho^{3/3}$)

1) Fermi gázok véges hőmérsékleten



$$? = \int_{-\infty}^{\infty} n_F(E)\, h(E)\, dE$$

↑ $h(E)$ a negatív félsíkon 0

(0-nál lecseng)

Sommerfeld-sorfejtés:

$$\int_{-\infty}^{\infty} n_F(E)\, h(E)\, dE = \int_{-\infty}^{\mu} h(E)\, dE + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 h'(\mu) + \ldots + (k_B T)^{2n} h^{(2n-1)}(\mu)$$

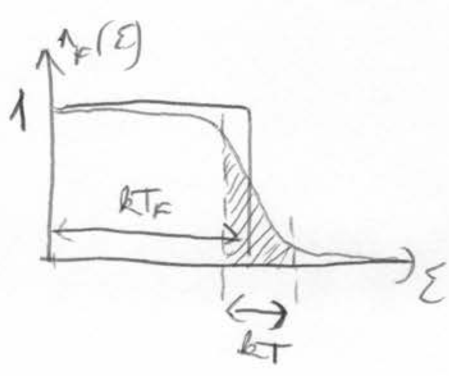
$E_F = k_B T_F$ $\quad$ $\mu \sim E_F$, ha $T \to 0$ (T kicsi) $\Rightarrow \frac{kT}{\mu} = \left(\frac{T}{T_F}\right) \ll 1$

↑ (vagyis $T_F \approx \frac{\mu}{k_B}$) $\quad$ sorfejtési elv ↓ mikor?

pl. fémekben

$T_F \sim 10^4 - 10^5$ K $\quad$ továbbiakban μ-t használunk, mert különbségek lesznek a korrekcióra is

E_2 alatt (pl. pár mK, vagy pár 100 K) $\Rightarrow \frac{T}{T_F} \ll 1 \Rightarrow$ sorfejtés első tagig elég



$\Rightarrow$ a kT sávban lévő részecskék ki tudnak lépni a Fermi-gömbből / be tudnak lépni a –||– be $\Rightarrow$ mozgás van

→ fémekben Fermi-felület közelében lévő elektronok okozzák az elektromos- és hővezetési effektusokat, mert ezek tudnak elmozdulni.

⇒ fontos a Fermi-felület

- $$\frac{\partial E(T)}{\partial T} = c_V = ?$$

$$D_{e^-}(\varepsilon) = 2\cdot\frac{4\pi}{3h^3}\cdot V\cdot(2m\varepsilon)^{3/2}$$

$$\rho_{e^-}(\varepsilon) = \cancel{\frac{3}{2}}\cancel{2}\cdot\frac{4\pi}{\cancel{3}h^3}V(2m)^{3/2}\cdot\varepsilon^{1/2}$$

$$E = \int_0^\infty n_F(\varepsilon)\cdot\underbrace{\varepsilon\cdot\rho_{e^-}(\varepsilon)}_{h(\varepsilon)}\,d\varepsilon = \int_0^\mu \varepsilon\,\rho_0(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\left(\varepsilon\cdot\rho_e(\varepsilon)\right)'\Big|_{\varepsilon=\mu} + \dots$$

$$= \frac{4\pi}{h^3}V(2m)^{3/2}\cdot\frac{2\mu^{5/2}}{5} + \frac{\pi^2}{\cancel{6}\,2}(k_BT)^2\,\frac{\cancel{4}\pi}{h^3}\cdot V\cdot(2m)\cdot\frac{\cancel{3}}{\cancel{2}}\mu^{1/2} + \dots$$

$$\underline{\underline{E = \frac{V(2m)^{3/2}\,8\pi}{h^3}\mu^{\frac{5}{2}}\left(1 + \left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\cdot\pi^2\cdot\frac{5}{8} + \dots\right)}}$$

$$N = \int_0^\infty n_F(\varepsilon)\,\underbrace{\rho_e(\varepsilon)}_{h(\varepsilon)}\,d\varepsilon = \int_0^\mu \rho_0(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\cdot\rho_e'(\varepsilon)\Big|_\mu + \dots =$$

$$= \underline{\underline{N = D_e(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\,D_e''(\mu)}} = \underline{\underline{D_e(\mu)\left(1 + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2\cdot\frac{D''(\mu)}{D(\mu)} + \dots\right)}}$$

$$= D(\mu)\left(1+\frac{\pi^2}{6}\frac{3}{4}\cdot\frac{1}{\mu^2}+\dots\right)$$

$$E=\int_0^\infty n_F(\varepsilon)\cdot\varepsilon\cdot\rho_0(\varepsilon)\,d\varepsilon=\underbrace{\int_0^\mu \varepsilon\rho_e(\varepsilon)\,d\varepsilon}_{(*)}+\underbrace{\frac{\pi^2}{6}(kT)^2\cdot\left(\varepsilon\rho(\varepsilon)\right)'\Big|_{\varepsilon=\mu}}_{(**)}$$

$$(*)=\int_0^\mu \varepsilon\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\,d\varepsilon=\left[\mu D(\mu)-\int_0^\mu D(\varepsilon)\,d\varepsilon\right]$$

$f \quad g'$

$$(**)=\frac{\pi^2}{6}(kT)^2\left(D'(\varepsilon)+\varepsilon D''(\varepsilon)\right)$$

$\Downarrow$

$$E=\left[\mu D(\mu)-\int_0^\mu D(\varepsilon)\,d\varepsilon\right]+\frac{\pi^2}{6}(kT)^2\left[D'(\mu)+\mu\cdot D''(\mu)\right]$$

$$E=\left[\mu D(\mu)-\int_0^\mu D(\varepsilon)\,d\varepsilon\right]\left[1+\frac{\pi^2}{6}(kT)^2\cdot\frac{(D'+\varepsilon D'')}{\mu D(\mu)-\int_0^\mu D(\varepsilon)d\varepsilon}\Big|_\mu\right]$$

$D(\varepsilon)\sim\varepsilon^{3/2} \qquad \mu D\sim\mu^{5/2}$

$D'\sim\frac{3}{2}\mu^{1/2} \qquad \int D\sim\frac{2}{5}\mu^{5/2}$

$$N=D_e(\mu)\left(1+\frac{\pi^2}{6}\frac{3}{4}\frac{(kT)^2}{\mu^2}+\dots\right)$$

$$E=\left[\mu D(\mu)-\int_0^\mu D(\varepsilon)\right]\cdot\left(1+\underbrace{\frac{\pi^2}{\cancel{6}\,2}(kT)^2\,\frac{\frac{6}{4}+\frac{3}{4}}{1-\frac{2}{5}}}_{\pi^2\cdot\frac{5}{8}(kT)^2}\cdot\frac{1}{\mu^2}\right)+\dots$$

$\frac{3}{5}$ ✓

μ korrekciójára keressük kifejezést (lesz-e korrekció)

- $N = D_e(\varepsilon_F)$ ~~0. rendben~~ $T=0$ K-en

- $N = D_e(\mu)\left(1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right)$ $\cancel{D' \sim \frac{3}{2}\mu^{1/2}}$ $T \neq 0$ K-en

$$N \simeq D_e(\mu)\left(1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)$$

$$\mu = \varepsilon_F + \underbrace{\Delta}_{\approx^? \left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2}$$

itt már 2. rendű korrekció lenne, az nem érdekel

$\Downarrow$

$$N = D_e(\varepsilon_F+\Delta)\cdot\left(1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2\right)+\dots$$

$$\cancel{N} = \cancel{D_e(\varepsilon_F)} + \underbrace{\rho_e(\varepsilon_F)}_{D'(\varepsilon_F)}\cdot\Delta + D_e(\varepsilon_F)\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots$$

DE $N_{T=0} = N_{T\neq 0}$!

$$\Downarrow \qquad N_{T\neq 0} = D_e(\varepsilon_F)$$

$$\Rightarrow \Delta = -\underbrace{\frac{D(\varepsilon_F)}{D'(\varepsilon_F)}}_{\frac{2}{3}\cdot\varepsilon_F}\cdot\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2 = -\frac{\varepsilon_F}{12}\cdot\pi^2\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2$$

$$\boxed{\mu = \varepsilon_F\left(1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2\right)}$$

$D(\varepsilon) = A\cdot\varepsilon^{3/2}$

$$E = \int_0^\mu \varepsilon\rho(\varepsilon)\,d\varepsilon\cdot\left(1+\frac{\pi^2 5}{8}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right) = \left(\mu D_e(\mu) - \int_0^\mu D(\varepsilon)\,d\varepsilon\right)\cdot(1+\dots)$$

$$E=\underbrace{\left(A\cdot\mu^{\frac{5}{2}} - A\cdot\frac{2}{5}\cdot\mu^{\frac{5}{2}}\right)}_{\frac{3}{5}\cdot A\cdot\mu^{\frac{5}{2}}}\cdot\left(1+\frac{\pi^2\cdot 5}{8}\cdot\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)$$

$$E=A\cdot\frac{3}{5}\varepsilon_F^{5/2}\left(1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)\left(1+\frac{\pi^2\cdot 5}{8}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)$$

$$E=A\cdot\frac{3}{5}\varepsilon_F^{5/2}\left(1-\frac{2\pi^2}{24}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)\left(1+\frac{\pi^2\cdot 15}{24}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)$$

?

$$\boxed{E=E_0\cdot\left(1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2+\dots\right)}$$

$T\neq 0$ hőmérsékleten kapott járulék

$$c_V=\frac{dE}{dT}=\frac{\cancel{2}\cdot 5\pi^2}{\cancel{12}_6}\frac{k_B^2 T}{\varepsilon_F^2}E_0=\cancel{\frac{5}{6}\pi^2\frac{k_B T}{\varepsilon_F}k_B}=\frac{1}{2}\pi^2\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)k_B N$$

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

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

$\sim 10^{-3}$-ad része egy ideális gáz fajhőjének, mert csak a Fermi-szint közelében lévő e^--ok tudnak mozogni!

2) Fermi rendszerek szuszceptibilitása

Mágn. momentumok: ha bekapcsoljuk a teret, a mom.-ok beállnak → összes $T=0$-n

→ nem az összes $T\neq 0$-n

$M=?$

$$M = -\left(\frac{\partial \phi}{\partial H}\right)_{T,V,\mu} \qquad \varepsilon = \frac{p^2}{2m} \pm \mu_B H$$

$g=2,\ |m|=\frac{1}{2} \to g\cdot|m|=1$

ahol $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$

e^- gázra

$$M \approx \chi H$$

Véges $T\neq 0$ hőm.-en ~~$E_{kin} = \Phi(H)$~~ $\varepsilon = \mu$

$$\phi = \frac{1}{2}\phi_0(\mu + \mu_B H) + \frac{1}{2}\phi_0(\mu - \mu_B H)$$

(kémiai pot.)

$$M = -\frac{\partial \phi}{\partial H} = -\frac{1}{2}\left[\phi_0'(\mu + \mu_B H) - \phi_0'(\mu - \mu_0 H)\mu_B\right]$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{1}{2}\left[\phi_0''(\mu + \mu_B H)\mu_B^2 + \phi_0''(\mu - \mu_B H)\mu_B^2\right]_{H=0}$$

$$\frac{\partial}{\partial(\mu+\mu_B H)} = \frac{\partial}{\partial \mu}\cdot\frac{\partial \mu}{\partial(\mu+\mu_B H)}$$

$$\underline{\underline{\chi}} = -\frac{\partial^2 \phi_0}{\partial \mu^2}\cdot \mu_B^2 = \mu_B^2 \frac{\partial N}{\partial \mu} = \underline{\underline{\mu_B^2 \rho_e(\varepsilon_F)}}$$

$$N = D_e(\mu) + \ldots \to \frac{\partial N}{\partial \mu} = \rho_e(\mu)$$

$\Rightarrow$ Ha különböző $\underline{H}$ irányokban végigmérem a szuszceptibilitást, le lehet ~~tapogatni~~ az állapotsűrűséget!

1) He^4

$\boxed{T \to 0}$: $T \to 0$ $(\varepsilon_0 \approx \mu) \Rightarrow$ „fel tud robbanni" az exp. kifejezés ~~tartás~~

– alapállapot

$$n_0 = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_0 - \mu}{kT}} - 1}$$

$\varepsilon_0 \geq \mu$ } ez egy szigorú szabály

DE $\mu \to \varepsilon_0$

⇓

~~$(e \dots \to 1)$~~

a geom. sor kvóciense $\to 1 \Rightarrow$ nem konvergál

$$e^{\frac{\varepsilon_0 - \mu}{kT}} = 1 + \frac{1}{n_0}$$

$$\varepsilon_0 - \mu = kT \cdot \ln\left(1 + \frac{1}{n_0}\right)$$

bozonok (Bose-rendszerek) be tudnak ülni ugyanabba az állapotba

$\Rightarrow T \to 0$ -nál

$$\varepsilon_0 - \mu \approx \frac{kT}{N} + \dots$$

– első gerj. állapot:

$$\varepsilon_1 \approx \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{(doboz első gerj. állapota)}$$

$$n_1 = \frac{1}{e^{\left(\cancel{\varepsilon_0} + \frac{\hbar^2}{2mL^2} - \cancel{\mu}\right)\beta} - 1} \approx \frac{1}{e^{\frac{\hbar^2}{2mL^2 kT}} - 1} \sim e^{-\frac{\hbar^2}{2mL^2 kT}}$$

ha $T \to 0$

ha $T \to 0$, a gerjesztett szintek betöltöttsége elfogy

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \, \underset{BE}{n}(\varepsilon) \cdot \rho(\varepsilon)$$

$\uparrow$ Bose-Einstein

az integráláshoz kell, hogy „sima" fv.-ek legyenek ($n(\varepsilon)$ és $\rho(\varepsilon)$).

Ha $T \to 0$, akkor a 0-beli eloszlás nem lesz „sima".

$\Rightarrow$ ε_0-t külön kezeljük

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

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\cancel{3}}{\cancel{2}} \frac{\overset{2}{\cancel{4\pi}}}{\cancel{3}} \frac{(2m)^{3/2} \cdot V}{h^3} \varepsilon^{1/2}$$

$\varepsilon_0 \simeq 0$ (dobozra $\frac{h^2}{L^2} \ldots$ de L^2 nagy)

$$N = \frac{2\pi (2m)^{3/2} \cdot V}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - 1}$$

$\varepsilon = x \cdot kT$

$$N = 2\pi \frac{(2m)^{3/2} \cdot V}{h^3} (kT)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x \, dx}{e^{x - \frac{\mu}{kT}} - 1}$$

$$\frac{N}{V} = \frac{2\pi \cdot (2m)^{3/2}}{h^3} (kT)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x \, dx}{e^{x - \frac{\mu}{kT}} - 1}$$

N, V fix $\Rightarrow \frac{N}{V}$ - fix, de $T \to 0 \Rightarrow$ az $\int$-értékének nőnie kell

Ez úgy lehet ha $\mu \to 0$ (gyorsabban, mint $T \to 0$)

ha $\int$ nem tud $\to \infty$-be szaladni, nem tudja kompenzálni a prefaktort

Mi van, ha véges az $\int$

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}\,dx}{e^x-1} = \quad x\to\infty \quad \int_0^\infty x^{1/2} e^{-x}\,dx \qquad e^x = 1+x+\frac{x^2}{2}+\dots$$

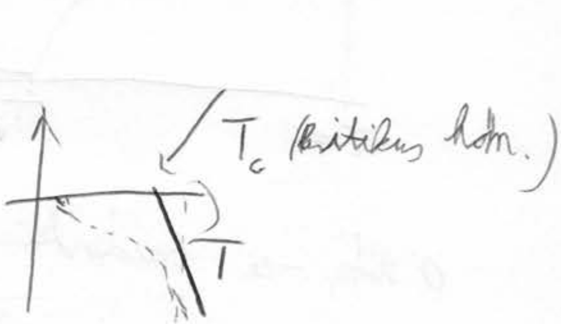
$$x\to 0 \quad \int_0^\infty \frac{x^{1/2}\,dx}{x} = \int \frac{dx}{\sqrt{x}} \approx \left[\sqrt{x}\right]_0$$

$$\int_0^\infty \frac{e^{-x}x^{1/2}\,dx}{1-e^{-x}} = \int dx\, x^{1/2} \sum_{n=1}^\infty e^{-xn} = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty x^{1/2} e^{-nx}\,dx =$$

$$= \underbrace{\sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^{3/2}}}_{\zeta(3/2)} \underbrace{\int_0^\infty e^{-y} y^{1/2}\,dy}_{\sqrt{\pi}=\Gamma(1/2)}$$

$nx = y$

$dx = \frac{dy}{n}$



$\Downarrow$

véges hőmérsékleten beáll a kémiai pot. 0-ra!

$$\frac{N}{V} = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} (kT_c)^{3/2} \cdot \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$$

ha $T < T_c \Rightarrow$ lesz olyan rész, ami kikondenzálódik

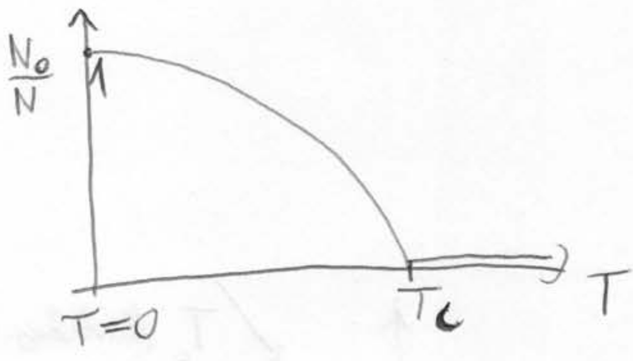
$$\frac{N'}{V} = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} (kT)^{3/2} \cdot \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$$

N': kikondenzálódott részecskék száma

$N = N_0 + N'$ $\quad T<$ $\quad \cancel{N_0} =$

$$N_0 = N - N' = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} (kT_c)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \cdot (kT)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{N'}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$



0 hőm.-en mindenki az alapáll.-ban van, nem 0 hőm.-en nem lesz mindenki ott, csak pár részecske (az ~~(a Bose-E)~~ eloszlásnak megfelelően).

He^4: $T_c \sim 3K$

2,17 K $\rightarrow$ ezalatt szuperfolyékony lesz

$|\Psi_0|^2 \leftarrow \varepsilon_0$

ha $\forall$ rész. az alapáll.-ban van, ez a részecskesűrűséggel lesz megegyező $\Rightarrow$ az alapállapoti hullámfv.-t kimérhetjük!

$$E = \frac{2\pi}{h^3} V (2m)^{3/2} \cdot \underbrace{\int_0^\infty \frac{\varepsilon \cdot \varepsilon^{1/2} \, d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} - 1}}_{T_c \text{ fölött ez jó}}$$

$T_c < T$ -re $\mu = 0$ lesz

$\Downarrow$

befagy az integrál $\qquad \varepsilon = kTx$, $\mu = 0$ $\qquad (\varepsilon_0 = 0)$ $\qquad y = nx$

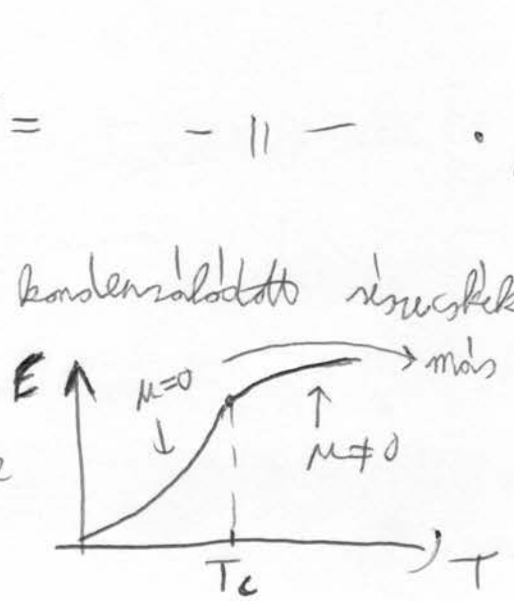
$$E = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \cdot (kT)^{5/2} \int \frac{e^{-x} x^{3/2} \, dx}{1 - e^{-x}} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{5/2}} \int_0^\infty y^{3/2} e^{-y} \, dy$$

$$E = \quad -\|- \quad \cdot \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)$$

A kondenzálódott részecskék energiája 0

$\rightarrow$ más lesz az eloszlás

$E \sim T^{5/2}$



$$c_V = \frac{dE}{dT} \sim T^{3/2}$$

1d. gáz. modell:

$$pV = -\Phi$$

$$p = -\frac{\Phi}{V} \sim \frac{\cancel{V}}{\cancel{V}} \cdot T^{5/2}$$

→ nyomás nem függ a térfogattól

(~~(mint egy folyadékot)~~)

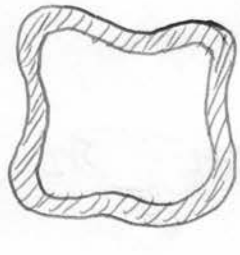
mint egy kondenzált anyagnál

Oszcillátor rendszerek

(fotonok, fononok)

$$\Delta \Phi(x,t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}$$

hullámegyenlet (pl. EM tér)



$$\Phi(x,t) \sim e^{i\omega_k t} \phi_k(x)$$

$$\Delta \phi_k = -\frac{\omega^2}{c^2} \phi_k$$

QED → kvantált oszcillátorok

L élhosszúságú kocka

$$\frac{n\lambda_n}{2} = L$$

$$n = \frac{2L}{\lambda_n} = \frac{L}{\pi} k_n \qquad k_n = \frac{\pi n}{L}$$

$$\omega_{n_1,n_2,n_3} = c \cdot |k|$$

$$\omega_{n_1 n_2 n_3} = \frac{c\pi}{L}\sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2}$$

$$F = F_0 + \sum_l kT \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega_l}\right) \quad \text{(kanonikus sokaság)}$$

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$Z = \sum e^{-\beta\varepsilon_n} = \sum_n e^{-\beta\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}\left(1+e^{-\beta\hbar\omega}+\right.$$

$$\left.+\,e^{-2\beta\hbar\omega}+\ldots\right)$$

$$Z_l = e^{-\frac{\beta\hbar\omega_l}{2}} \cdot \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_l}}$$

$\uparrow$

l. oszcillátorhoz tartozó állapotösszeg

$$Z = \prod_l Z_l$$

$$F = -kT\ln Z = -kT\sum_l \ln Z_l$$

$$F = \overbrace{\sum_l \frac{\hbar\omega_l}{2}}^{F_0} + kT\sum_l \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega_l}\right)$$

az oszcillátorok száma fix!

$\downarrow$

nem nagykanonikus, hanem kanonikus

11. óra

$$F = F_0 + kT \sum_l \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar w_l}\right)$$ (minden független, nincsen kölcs. hatás $\Downarrow$ kanonikus sokaság)

$$w_{n_1 n_2 n_3} = \frac{c\pi}{L} \cdot \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

$$\sum_l \ldots = 2 \sum_{n_1 n_2 n_3} \ldots \cdot \underbrace{\overset{1}{\overset{\shortparallel}{\Delta n_1}}}_{\text{ezek 1-et lépegetnek}} \cdot \overset{1}{\overset{\shortparallel}{\Delta n_2}} \overset{1}{\overset{\shortparallel}{\Delta n_3}} =$$

polarizáció miatt

$$= 2 \sum_{k_i > 0} \ldots \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3 =$$

áttérés Δk-ra

$w = c|k|$

$\frac{L}{\pi} k_1 = n_1$

mivel ha $\Delta n = 1$ Δk kicsi (L nagy) $\Rightarrow \Delta k \to dk$

$$= 2 \cdot \sum_{k_i} \ldots \frac{1}{8}\left(\frac{L}{\pi}\right)^3 \Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3 \cong \frac{2V}{8\pi^3} \int d^3k \ldots$$

csak a $k_1, k_2, k_3 > 0$ nyolcadtér kell

nem függ k iránytól

$$= 2\frac{V}{8\pi^3}\cdot 4\pi\int_0^\infty dk\, k^2 \ldots = \frac{\cancel{4}\cancel{\pi}V}{\cancel{2}\pi^{\cancel{3}2}c^3}\int_0^\infty d\omega\,\omega^2 \ldots = \int_0^\infty d\omega\, g(\omega)\ldots$$

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

ha F-et nézzük : $\ldots = kT\ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)$

$$\frac{F}{V} = \int_0^\infty d\omega\, g(\omega)\cdot kT\ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)$$

$F = E - TS$

$E = F + TS$

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

$$+ \cancel{k_B T}\int_0^\infty d\omega\cdot g(\omega)\cdot\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\left[-e^{-\beta\hbar\omega}\cdot\left(\frac{\hbar\omega}{\cancel{k_B T}\cdot T}\right)\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{k_B T}\right) = -\frac{1}{k_B}\cdot\frac{1}{T^2}$$

$$\frac{F}{V} = kT\int_0^\infty d\omega\, g(\omega)\ln\cancel{\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)} + \boxed{\int_0^\infty d\omega\, g(\omega)\,\frac{e^{-\beta\hbar\omega}\hbar\omega}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}}$$

S-ben $\ominus$al

van már a tag

$$\frac{E}{V} = \underbrace{\int_0^\infty d\omega\, g(\omega)}_{dE\,\varrho(\varepsilon)}\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \qquad \varepsilon = \hbar\omega$$

= hasonló az eredmény, mint ~~Bose-rendszerben~~ nagykanonikus Bose-rendszerben,

csak $\mu = 0$!

Mi a különbség? $\mu=0$

→ a fotonokat, fononokat nem lehet megszámolni, ezért $\mu=0$ (bármennyivel változhat N)

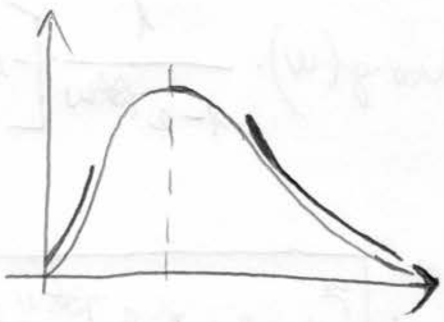
↓

nem kell külön feltételként kiszabni

$$\frac{E}{V} = \int_0^\infty d\omega\, f(\omega) \qquad f(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^2} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$

$$2\pi\nu = \omega$$

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



$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -\frac{\partial}{\partial V}\int_0^\infty d\omega\, g(\omega)\, \ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right) =$$

$$= -\frac{kT}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty \underbrace{\omega^2}_{f'}\, \underbrace{\ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)}_{g}\, d\omega$$

$$p = -\frac{k_B T}{\pi^2 c^3}\left\{\cancel{\left(f g\right)_0^\infty} - \int_0^\infty \frac{\omega^3}{3}\, \frac{-e^{-\beta\hbar\omega}\left(-\beta\hbar\right)}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\, d\omega\right\} =$$

$$= \frac{\hbar}{3\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{1}{3}\frac{E}{V}$$

$\Downarrow$

$$\boxed{p = \frac{1}{3}\frac{E}{V}}$$

$$\omega = \frac{x}{\beta\hbar} = \frac{kTx}{\hbar}$$

$$d\omega = \frac{kT}{\hbar} dx$$

$$p = \frac{\hbar}{3\pi^2 c^3} \cdot \int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{\hbar}{3\pi^2 c^3} \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

msz.:

$$\frac{e^{-x} \cdot x^3}{1-e^{-x}} = \int_0^\infty x^3 \sum_{n=1}^\infty e^{-nx} dx = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty e^{-nx} x^3 dx =$$

$y = nx$

$$= \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} \int_0^\infty e^{-y} y^3 = \Gamma(4) \underbrace{\sum \frac{1}{n^4}}_{\zeta(4)}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^n dx}{e^x - 1} = \Gamma(n+1) \cdot \zeta(n+1)$$

$\Downarrow$

$$\boxed{p \sim T^4}$$

$$\frac{E}{V} \sim p \sim T^4 \Rightarrow E \sim T^4 \quad \text{(Stefan-Boltzmann-tv.)}$$

$$\underline{\underline{c_V}} = \frac{\partial E}{\partial T} \sim \underline{\underline{T^3}}$$

$$\Downarrow$$

fonon fajhő járuléka szil. testek fajhőjében

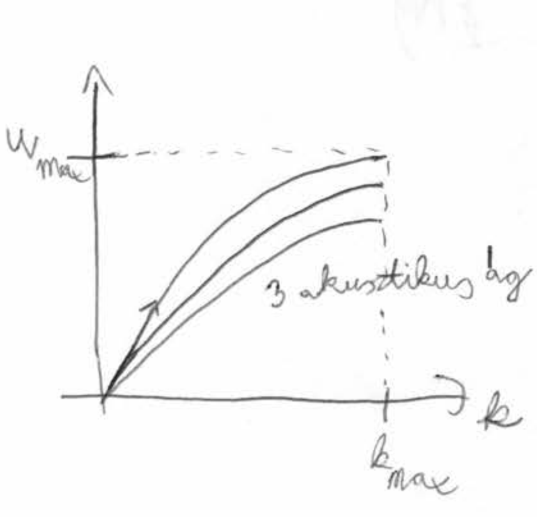
$$f(\nu) = \frac{8\pi}{c^3 \cdot h^2 (kT)^3} \cdot \frac{(h\nu/kT)^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$\max. \left. \frac{x^3}{e^x - 1} \right|_{x_0} \qquad x_0 = 2{,}82\ldots$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\nu_{max} = x_0 \cdot \frac{kT}{h}} \qquad \nu_{max} \sim T$$

12. óra



$$k_{max} \sim \frac{2\pi}{\lambda_{min}} \sim \frac{2\pi}{a} \qquad a: \text{ a rács } \text{állandó}$$

$$w = c \cdot k$$

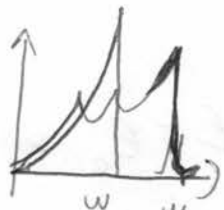
(Univerzum olyan "doboz", amire $a = 0$

$\Rightarrow k_{max} = \infty \rightarrow$ nincs letörése a benne rezgő fotonoknak) + (foton $\forall$ irányba ugyanúgy terjed $\Rightarrow$ 1 ág van).

$\hbar\omega_{max} \sim kT$

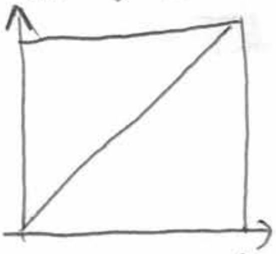
$$T_0 \cong \frac{\hbar\omega_{max}}{k_B} \approx 100\ K$$

ω_{max} → ez most az előzőtől eltérő ω_{max} $(= \omega_{Debye})$! ←



ω_0 ω_{max} (régi)

lineáris közelítés:



k_{max}

$$\frac{1}{c_{átl.}^3} = \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_m^3}$$ átlagos (fázissebesség)

↑ longitudinális seb. ↑ merőleges (transzv.) seb.

$$\int_0^{\omega_{max}} g(\omega)\,d\omega = G = 3L \quad \text{(állapotok száma)}$$

$$\int_0^{\omega_{max}} d\omega \frac{V}{\hbar^3\pi^2 c_{átl}^3}\omega^2 = \frac{V}{\hbar^3\pi^2 c_{átl}^3}\frac{\omega_{max}^3}{3} = 3L$$

a hullámok kollektív állapotok (több atom mozdul el), de annyi módus van, ahány atom $\times 3$

↑ 3 független irány

$$E = E(\phi) + \int_0^{\omega_{max}} d\omega \cdot g(\omega)\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} =$$

$$= E(\phi) + \int_0^{\omega_{max}} d\omega \frac{V\omega^2}{\hbar^3\pi^2 c_{átl}^3}\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \overset{x := \frac{\hbar\omega}{kT}}{=} E(\phi) + \frac{V\hbar}{\hbar^3\pi^2 c_{átl}^3}\cdot(kT)^4 \cdot \underbrace{\int_0^{\frac{\hbar\omega_{max}}{kT}} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{*}$$

↓

fotonoknál ugyanez volt, csak ∞-ig ment az $\int$!

$(\omega_{max} = \infty)$

• ha $\hbar\omega/kT \gg 1$

$$E \sim T^4 \Rightarrow c_V = \frac{dE}{dT} \sim T^3$$

$$* \quad = \begin{cases} \sim x^2 & \text{ha } \frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1 \\ \sim x & \text{ha } \frac{\hbar\omega}{kT} \gg 1 \end{cases}$$

• ha $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$

$$E = E_0 + \frac{V}{\cancel{\hbar^3}\, 2\pi^2 c^3_{hl}} (kT)^4 \underbrace{\int_0^{\frac{\hbar\omega_{max}}{kT}} x^2 dx}_{\frac{1}{3}\left(\frac{\hbar\omega_{max}}{kT}\right)^3} \approx E_0 + 3L \cdot kT$$

$$c_v \approx 3L\,k$$

Kölcsönható rendszerek: spinek

Legegyszerűsítettebb sz., de modellként jól használható kétállapotú sz.-ek leírásánál.

1) Bevezetés:

<u>Független spinrendszerek leírása:</u>

$S_i = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$ „klasszikus spin" (nem lehet lin. komb.-ban)

$$\mathcal{H} = -H \cdot \sum_i S_i$$

időbeli fejlődését nem tudunk → időátlag nincs

2^N féle beállás lehetséges, de ebből nem ad mind új ~~[illegible]~~ energiát.

N_+ áll felfelé $\quad N = N_+ + N_- \quad \frac{M}{N} := m$

N_- áll lefelé $\quad M = N_+ - N_- \quad (m \in (-1, \dots 1))$

$$E = -H N_+ + H N_- = -H \cdot M = -H \cdot N m$$

$$N_+ = \frac{N - E/H}{2}, \quad N_- = \frac{N + E/H}{2}$$

adott E-re N_+, N_- adott.

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

$$S = k_B \ln \Omega(E) = k_B\left(\ln N! - \ln N_+! - \ln N_-!\right)$$

(pontosan E energiájú állapotok ~~(állapotsűrűség)~~ száma)

$\uparrow$

(nem E-nél kisebb en.-jú állapotok száma)

$$\ln N! = N\ln N - N + \frac{1}{2}\ln N + \frac{1}{2}\ln(2\pi) + \ldots \quad \text{(Stirling-formula)}$$

$$S = k_B\Big(N\ln N - \cancel{N} + \frac{1}{2}\ln N + \cancel{\frac{1}{2}\ln(2\pi)} - N_+\ln N_+ + \cancel{N_+} - \frac{1}{2}\ln N_+ - \cancel{\frac{1}{2}\ln 2\pi}$$
$$- N_-\ln N_- - \cancel{N_-} - \frac{1}{2}\ln N_- - \frac{1}{2}\ln 2\pi\Big)$$

$$N_+ = \frac{1}{2}\left(N - E/H\right) = \frac{N}{2}\Big(1 - \underbrace{\frac{E}{NH}}_{m}\Big) = \frac{N}{2}(1+m) \quad \in \{0,1\}$$

($E = -M \cdot H$)

$$N_- = \frac{N}{2}(1-m) \quad \in \{0,1\}$$

$$S = k_B\left(N\ln N - N_+\ln N_+ - N_-\ln N_- + \ldots\right)$$

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

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

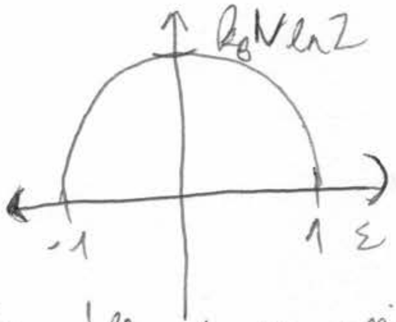
$$S = -k_B N\left[\frac{1}{2}(1+m)\ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \frac{(1-m)}{2}\ln\left(\frac{1-m}{2}\right)\right]$$

$-\ln 2$

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

$$\varepsilon := -m = \frac{E}{HN}$$

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



• ha $\varepsilon = 0$

⇒ sok ilyen állapot van, amikor $N_+ = N_-$

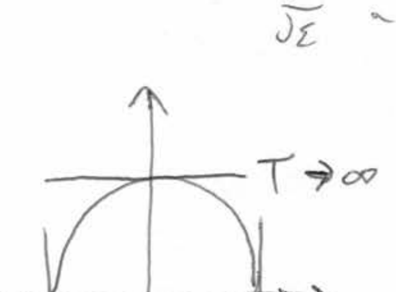
(A Stirling ~~formula~~ formula miatt ez csak nagy N-re igaz.
⇒ a tengelymetszet nem pontos)

• $\varepsilon = 1, -1$

→ ha ∀ atom (spin) 1 ~~irányba~~ irányba áll be, akkor csak 1 állapot van

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T} \qquad \frac{\partial S}{HN\,\partial \varepsilon} = \frac{1}{T}$$

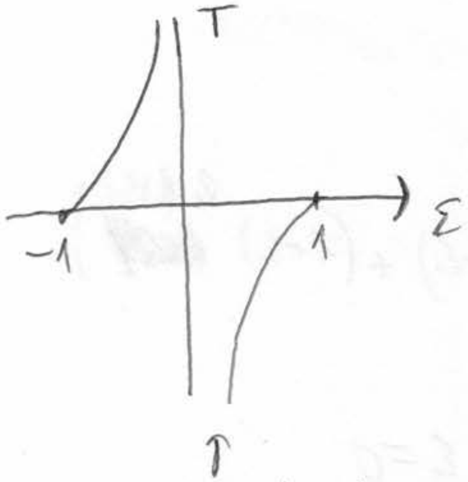
$\frac{\partial S}{\partial \varepsilon}$ a fenti görbe deriváltja



$$\frac{HN}{T} = \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} = \cancel{\frac{k_B N}{2}\frac{(1-\varepsilon)}{1-\varepsilon}} + \frac{k_B N}{2}\ln(1-\varepsilon)$$

$$\cancel{-\frac{k_B N}{2}\cdot 1} + \frac{k_B N}{2}\ln(1+\varepsilon)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{H \cdot N} \ln \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}$$



itt a hőmérséklet ⊖ !!!

„inverz populáció"

Létre lehet hozni ilyet: a spineket beállítjuk 1 irányba, majd megfordítjuk a mágneses ~~teret~~ → rövid ideig létre lehet hozni ⊖ hőmérsékletet

.óra

1) Kölcsönható spinlánc

- a (szomszédos) spinek kölcsönhatnak

$$\mathcal{H} = -\sum_{ij} \underbrace{J_{ij} S_i \cdot S_j}_{i. \text{ és } j. \text{ spin kölcsönhatása}} \left(+ \sum_i h_i S_i \right) \leftarrow \text{külső } \overset{\text{mágn.}}{\text{térrel}} \; (h_i) \text{ való kh.}$$

a) • 1D, Ising-modell, $H \equiv \phi$: $J_{ij} = J$ ha i és j szomszédok
(J = áll)

$$\mathcal{H} = -J \cdot \sum_{i=1}^{N-1} S_i \cdot S_{i+1}$$

$\overset{1}{\uparrow} \downarrow \uparrow \dots \overset{N}{\downarrow}$

kanonikus

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \cdot \sum_{i=1}^{N-1} S_i \cdot S_{i+1}}$$

! állapot-összeg

! egyenként kell a spinekre összegezni

$$Z_N = \sum_{S_1 = +1, -1} \sum_{S_2 = \pm 1} \dots \sum_{S_N = \pm 1} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}}$$

$$Z_{N+1} = \quad -\|- \quad \cdot \sum_{S_{N+1} = \pm 1} e^{\beta J S_N S_{N+1}} =$$

S_{N+1} csak itt jelenik meg

$$= \sum_{S_1 = \pm 1} \sum_{S_2 = \pm 1} \dots \sum_{S_N = \pm 1} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}} \cdot \underbrace{\left(e^{\beta J S_N} + e^{-\beta J S_N} \right)}$$

adott S_N-re: $2 \mathrm{ch}(\beta J)$, S_N-től független!

$$\Downarrow$$

$$Z_{N+1} = Z_N \cdot 2\,\mathrm{ch}(\beta J)$$

$$Z_1 = \sum_{S_1=\pm1} e^0 = 2$$

$$\Rightarrow Z_N = 2^N \cdot \mathrm{ch}^{N-1}(\beta J)$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_N = -\frac{\partial}{\partial\beta}(N-1) \ln \mathrm{ch}(\beta J) = (N-1) \cdot \frac{1}{\mathrm{ch}(\beta J)} \cdot \mathrm{sh}(\beta J) \cdot J \cdot (-1)$$

$$E(T) = -\underbrace{(N-1)}_{} \cdot J\,\mathrm{th}(\beta J)$$

($\simeq N$, ha $N \gg 1$)

(Másik módszer:

a $\mathcal{H}$ csak a spinszorzattól függ, ami ±1 lehet

$$S_i \xrightarrow{\text{helyett}} \tilde{S}_i = S_i \cdot S_{i-1} \quad \text{spinhullám}$$

(spinpár)

$$\Downarrow$$

$N-1$ független „spin" összege a modell)

$T \to 0$, $\beta \to \infty$: $E(T\to 0) = -(N-1)J \Rightarrow$ ~~ellentétesen~~ azonosan állnak be

$T \to \infty$, $\beta \to 0$: $E(T \simeq \infty) = \phi \Rightarrow$ véletlenszerűen állnak be

$$c = \frac{dE}{dT} = -(N-1)\, J\, \frac{J}{\mathrm{ch}^2(\beta J)} \left(\frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{k_B T}\right) = (N-1) \frac{(J/k_B T)^2 \cdot k_B}{\mathrm{ch}\left(\frac{J}{k_B T}\right)}$$

$N-1$ független spin fajhője ✓

entrópia

$$S = k_B \ln Z + \frac{1}{T} E = k_B \left(N \ln Z + (N-1) \cdot \ln ch(\beta J) \right) - \frac{1}{T}(N-1) J \cdot th(\beta J)$$

$$ch(\beta J) = \frac{e^{\beta J} + e^{-\beta J}}{2}$$

• $T \to 0,\ \beta \to \infty$: $S(T \to 0) = k_B N \ln Z + k_B (N-1) \cdot \{ \cancel{\beta J} - \ln 2 \}$

$$\cancel{-(N-1) k_B J \cdot \beta}$$

$$k_B N \ln Z - k_B (N-1) \ln Z = k_B \ln Z$$

$\Rightarrow$ 0 hőm.-en ennek 2 állapota van $\uparrow\uparrow\uparrow \ldots$ v. $\downarrow\downarrow\downarrow \ldots$

• $T \to \infty,\ \beta \to 0$: $S(T \to \infty) = k_B \ln 2^N$

$\Rightarrow$ a modell összes leh. állapota (2^N) azonosan valószínű.

ez a modell a fázisátalakulást nem írja le, de bonyolultabb modelleknek jó előfutára

pl. korreláció:

$$C_k(r) = \langle S_k \cdot S_{k+r} \rangle$$

$$C_k(r) = \sum_{\{S_i\}} S_k \cdot S_{k+r} \cdot e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} \ldots} / Z_N$$

$$P(\{S_i\})$$

b) ha $\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N-1} J_{i} s_i s_{i+1} \to J$ is elt

$$Z_{N+1} = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}} \cdot \sum_{s_{N+1}=\pm 1} e^{\beta J_N s_N s_{N+1}}$$

$$\Rightarrow Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} ch(\beta J_i)$$

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_i} Z_N = \sum_{\{s_i\}} s_i s_{i+1} e^{\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}} = Z_N \cdot \langle s_i \cdot s_{i+1} \rangle$$

$$s_{k+1}^2 = 1 \quad (s_{k+1} = \pm 1)$$

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \frac{\partial}{\partial J_k} Z_N = \sum s_k \cdot \underbrace{s_{k+1} s_{k+1}} \underbrace{s_{k+2}} \cdot e^{\beta \dots}$$

$$\frac{1}{\beta^r} \frac{\partial}{\partial J_k} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \dots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} \cdot \underbrace{\sum e^{\beta \dots}}_{Z_N} = Z_N \langle s_k \cdot s_{k+r} \rangle$$

$$C_k(r) = \langle s_k \cdot s_{k+r} \rangle = \frac{1}{\beta^r} \frac{\partial}{\partial J_k} \dots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} \ln Z_N \Big|_{J_i = J}$$

$$Z_N = 2^N \cdot \prod_{i=1}^{N-1} ch(\beta J_i)$$

$$\ln Z_N = \sum_{i=1}^{N-1} \ln ch(\beta J_i) \quad \partial \; \beta\, th(\beta J_i)$$ minden deriválásnál

$\Downarrow$

$$\boxed{C_k(r) = \left[th(\beta J) \right]^r}$$ korrelációs fv.

$$C_k(r) = \left[\text{th}(\beta J)\right]^r = e^{r \ln \text{th}(\beta J)} = e^{-r/\xi}$$

„korelációs hossz": $\xi = \dfrac{1}{|\ln \text{th}(\beta J)|}$

„0 hőmérsékleten van fázisátalakulása"

- Ha van külső tér: H külső tér

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} + \beta H \sum_{i=1}^{N} S_i}$$

c) Periodikus határfeltételű spinlánc

$$S_1 = S_{N+1}$$

$h = \beta H$

ha körbemegyünk, ez uaz, mint a fenti, csak más jelöléssel

$$\to Z_N = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{N} (S_i + S_{i+1})}$$

Mátrixműveletre szeretnénk visszavezetni az összeget!

$$T_{SS'} = e^{\beta J SS' + \frac{h}{2}(S+S')}$$

transzfermátrix

$$\begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta J + h\cancel{\beta}} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - h\cancel{\beta}} \end{pmatrix}$$

$$Z_N = \underbrace{\sum_{S_1=\pm 1}}_{\text{nyomképzés}} \underbrace{\sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1}}_{\text{mátrixszorzás}} T_{S_1 S_2} \cdot T_{S_2 S_3} \cdots T_{S_N S_1} =$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1} T^N_{S_1 S_1} = \underbrace{\mathrm{Tr}}_{\text{Trace}}\, T^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

ahol λ_1 és λ_2 T s.értékei

T ugyanaz $\forall$ spinre

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right) \cong \lambda_1^N$$

ha $|\lambda_1| > |\lambda_2|$

$$\Rightarrow \ln Z = N \cdot \ln \lambda_1$$

$\lambda = ?$

$$\det \begin{pmatrix} e^{\beta J + h\cancel{\beta}} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - h\cancel{\beta}} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda\left(e^{\beta J - h} + e^{\beta J + h}\right) + \left(e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}\right) = 0$$

$$0 = \lambda^2 - \lambda e^{\beta J} \cdot 2\,\mathrm{ch}(\cancel{\beta} h) + 2\,\mathrm{sh}(2\cancel{\beta} J)$$

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J}\,\mathrm{ch}(\cancel{\beta} h) \pm \sqrt{e^{2\beta J}\,\mathrm{ch}^2(\cancel{\beta} h) - 2\,\mathrm{sh}(2\beta J)}$$

ha $h = 0$ $\to$ visszakapjuk a b) levezetés eredményét?

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} = 2\,\mathrm{ch}(\beta J)$$

$$Z_N = 2^N \mathrm{ch}^N(\beta J)$$

.ba

---

c) Ism.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} - H \sum_i S_i$$

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum e^{\beta J \sum S_i S_{i+1} + \overbrace{\beta H}^{h} \sum S_i}$$

$\vdots$

$$\det(T - \lambda E) = \begin{vmatrix} e^{\beta J + \beta H} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \lambda e^{\beta J} \cdot 2\,\mathrm{ch}(\beta H) + \underbrace{e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}}_{2\,\mathrm{sh}(2\beta J)} = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left(+ e^{\beta J} 2\, ch(\beta H) \pm \sqrt{4 e^{2\beta J} ch^2(\beta H) - 4 \cdot 2\, sh(2\beta J)} \right) =$$

$$= e^{\beta J} \cdot ch(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta J} ch^2(\beta H) - \underbrace{2\, sh(2\beta J)}_{e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}}} =$$

$$= e^{\beta J} ch(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \underbrace{\left(ch^2(\beta H) - 1\right)}_{sh^2(\beta H)} + e^{-2\beta J}}$$

$$\lambda_+ = e^{\beta J} ch(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta J} sh^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}$$

$$\ln Z = N \ln \lambda_1 = N \ln \left\{ e^{\beta J} ch(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta J} sh^2(\beta H) + e^{-2\beta J}} \right\}$$

$$M = k_B T \frac{\partial}{\partial H} \ln Z = N \cdot \frac{e^{\beta J} sh(\beta H) + \frac{e^{2\beta J} sh(\beta H) ch(\beta H)}{\sqrt{\dots}}}{e^{\beta J} ch(\beta H) + \sqrt{\dots}}$$

- ha $J \to 0$: külső mágneses térbe helyezett, független spinsz.

$$\ln Z = N \ln \left(\underbrace{e^{\beta J}}_{1} ch(\beta H) + \sqrt{\underbrace{e^{2\beta J}}_{1} sh^2(\beta H) + \underbrace{e^{-2\beta J}}_{1}} \right) =$$

$$= N \ln \left(2\, ch(\beta H) \right) \quad \checkmark$$

$$M = N \cdot th(\beta H) \quad \checkmark$$

$M(T,H) = ?$

$\rightarrow \quad M(T, H=0) = 0$ → ha nem tesszük mágneses térbe, nem kapunk nettó mágnesezettséget

$\rightarrow \quad M(0, H) =$

$J > 0$: ferromágneses eset, spinek szeretnek azonos irányba állni

$J < 0$: antiferromágneses eset, —"— ellentétes irányba állni

$J > 0$,
$\beta \to \infty$, H : $\sqrt{} = e^{J\beta} |sh(\beta H)|$
$(T \to 0)$

$$M = N \cdot \frac{\cancel{e^{\beta J}} sh(\beta H) + \cancel{e^{\beta J}} ch(\beta H) \cdot sgn(H)}{\cancel{e^{\beta J}} ch(\beta H) + \cancel{e^{\beta J}} \underbrace{|sh(\beta H)|}_{sh(\beta H) \cdot sgn(H)}} = \underline{\underline{N sgn(H)}} \qquad \frac{sh(\beta H)}{|sh(\beta H)|}$$

H előjelétől függ

H-nak megfelelően áll be az összes spin

$J < 0$
$\beta \to \infty$ $(T \to 0)$, H :

$\sqrt{} = e^{-\beta J}$

$$M = N \cdot \frac{e^{\beta J} sh(\beta H) + e^{3\beta J} sh(\beta H)\, ch(\beta H)}{\cancel{e^{\beta J} ch(\beta H)} + e^{-\beta J}} = N \left[e^{2\beta J} sh(\beta H) + e^{4\beta J} sh(\beta H) \cdot ch(\beta H) \right]$$

emellett elhany.

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{N}{k_B T} \cdot \frac{e^{\beta J} ch(\beta H) + \frac{e^{2\beta J}(ch(\beta H) + sh^2(\beta H))}{\sqrt{}} - \frac{1}{2}\left(\sqrt{}\right)^3}{e^{\beta J} ch(\beta H) + \sqrt{}}$$

$$k_B T \frac{\partial^2}{\partial H^2} \ln Z = k_B T N \left(\frac{\lambda_+'}{\lambda_+}\right)' = k_B T \cdot N \frac{\lambda_+''}{\lambda_+} - \frac{(\lambda_+')^2}{\lambda_+^2} =$$

$$= k_B T N \frac{\lambda_+'' \lambda_+ - (\lambda_+')^2}{\lambda_+^2} =$$

$$\underline{\underline{\chi(T, H) = \frac{N}{kT} \cdot \frac{e^{-\beta J} ch(\beta H)}{\left(e^{2\beta J} sh^2(\beta H) + e^{-2\beta J}\right)^{3/2}}}}$$

szingularitása van:

$T \to 0$, $H \to 0$ -n

<u>antiferromágnes</u> $J < 0$

$$\mathcal{H} = -J \sum_{=1}^{N} s_i s_{i+1} - H \sum_i s_i = +|J| \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - H \sum_i s_i$$

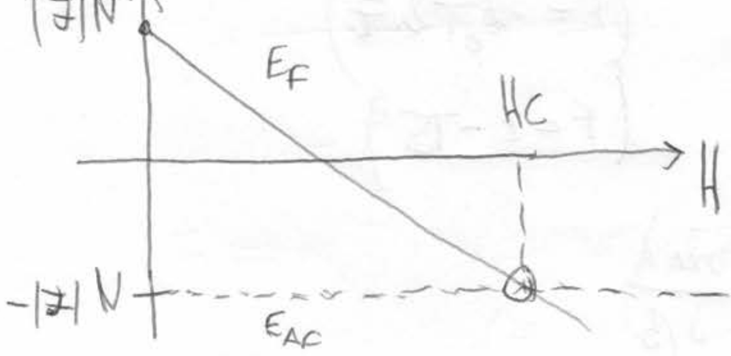
- $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \ldots$

  $H = 0$ -n ez a legjobb állapot

- de $H \neq 0$ -n a tér a saját irányába akarja beállítani őket!

$H > 0$ $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ $J<0$ $E = -|J| N$

~~$H<0$~~ $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $J > 0$ alapállapot $= |J| \cdot N - H \cdot N$



ha $H > H_c$ $\quad E_{AF} > E_F$ $\Rightarrow$ ferromágn. lesz

ha $H < H_c$ $\quad E_{AF} < E_F$ $\Rightarrow$ anti-ferrom. lesz

$\boxed{H_c\text{-tól függően más (alap) állapot lesz kedvező}}$

$$-|J|N = |J|N - HN$$

$$\underline{\underline{H_c = 2|J|}}$$

Ha kézzel átfordítunk egy spint:

$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \ldots$

$\pm \downarrow \pm$

$\Delta E = -4|J| + 2H$

ha $H > H_c \Rightarrow \Delta E > 0$ $\rightarrow$ nem szereti a spinek flippelését

ha $H < H_c \Rightarrow \Delta E < 0$ $\rightarrow$ szereti a — || —

$\Rightarrow$ akkor szeret ferromágneses áll.-ban maradni, ha

$H > H_c$

$$S = k_B \ln Z + \frac{E}{T} \qquad \begin{pmatrix} F = -k_B T \ln Z \\ F = E - TS \end{pmatrix}$$

$$S = k_B N \ln \lambda_+ + \frac{N}{T} \frac{\partial \ln \lambda}{\partial \beta}$$

$$E = N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \lambda = N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(e^{\beta J} \cdot \mathrm{ch}(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta J} \mathrm{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}} \right)$$

$$E = \frac{N\left(J e^{\beta J} \mathrm{ch}(\beta H) + H \cdot e^{\beta J} \mathrm{sh}(\beta H) + \frac{1}{2} \frac{2J e^{2\beta J} \mathrm{sh}^2(\beta H) + 2H e^{2\beta J} \mathrm{sh}(\,)\mathrm{ch}(\,) + 2J \cdot e^{-2\beta J}}{\sqrt{\dots}} \right)}{e^{\beta J} \mathrm{ch}(\beta H) + \sqrt{\dots}}$$

$T \to 0$, $\beta \to \infty$ $\quad J < 0$ $\quad \cancel{\left(E = \frac{J \cdot e^{-2\beta J}}{e^{\dots}} \frac{1}{e^{-\beta J}} = J \right)}$

és $\quad H = 2|J| = -2J$:

$$\sqrt{\dots} = \sqrt{e^{2\beta J} \cdot \left(\frac{e^{2\beta H} + e^{-2\beta H} - 2}{4} \right) + e^{-2\beta J}} =$$

$$= \sqrt{e^{2\beta J} \frac{1}{4} \left(e^{-4\beta J} + e^{4\beta J} - 2 \right) + e^{-2\beta J}} \xrightarrow{\beta \to \infty} e^{-\beta J} \cdot \frac{\sqrt{5}}{2}$$

$$E = \frac{N \cdot \left(J \cdot e^{\beta J} \cdot \frac{1}{2} + H \cdot e^{-\beta J} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{2J \cdot e^{2\beta J} \mathrm{sh}^2(\beta H) + 2H e^{2\beta J} \mathrm{sh}\,\mathrm{ch} + 2J e^{\dots}}{e^{-\beta J} \sqrt{5}/2} \right)}{e^{\beta J} \cdot \frac{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J}}{2} + e^{-\beta J} \frac{\sqrt{5}}{2}} \quad \left(= \sqrt{\frac{5}{4}} \right)$$

: nem seng le

msz.:

$$e^{2\beta J} \cdot \mathrm{sh}^2(\beta H) = e^{2\beta J} \left(\frac{e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}}{2} \right)^2 \to \frac{1}{4} e^{-2\beta J}$$

mn.: $\left(\frac{e^{-2J\beta} - e^{2\beta J}}{2}\right)\left(\frac{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J}}{2}\right)$ $\cancel{(-)\frac{1}{4}e^{-}}$ $\cancel{(-)\frac{1}{4}e^{-4\beta J}}$

sh · ch

$$\underline{\underline{E}} = \frac{N\left(J \cancel{e^{-\beta J}}\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\cancel{2}}\cancel{e^{-\beta J}} + \frac{2}{\sqrt{5}}\left(J\cancel{e^{-\beta J}}\frac{1}{4} + (-2J)\frac{1}{4}\cancel{e^{-\beta J}} - J\cancel{e^{-\beta J}}\right)\right)}{\cancel{e^{-\beta J}}\left(\frac{\sqrt{5}}{2}+\frac{1}{2}\right)} =$$

$$= \frac{N\left[\underbrace{\left(\frac{J}{2} - J\right)}_{-\frac{1}{2}J} + \frac{\cancel{2}}{\cancel{\sqrt{5}}}\underbrace{\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} - 1\right)}_{-\frac{\cancel{5}}{\cancel{4}}\frac{\sqrt{5}}{2}} J\right]}{\frac{\sqrt{5}}{2} + \frac{1}{2}} = \frac{-N \cdot J\cancel{\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2}\right)}}{\cancel{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2}}} = \underline{\underline{-NJ}}$$

Rövid hatótávolságú, 1D Ising-modellben nincs fázisátalakulás

↓

Mit jelent ez?

$$-\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j$$

$$J_{ij} \sim \begin{cases} \text{rövid} & e^{-|i-j|^{\beta}/\xi} \qquad \beta>1 \\ \text{hosszú} & \dfrac{1}{|i-j|^{\alpha}} \end{cases}$$

→ ilyenkor lehet már 1D-ben is fázisátalakulás

De a legjobb, ha több dim.-val foglalkozunk

2D Ising-modell → megoldották, de bonyolult a levezetés

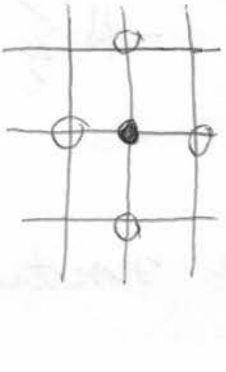
↓

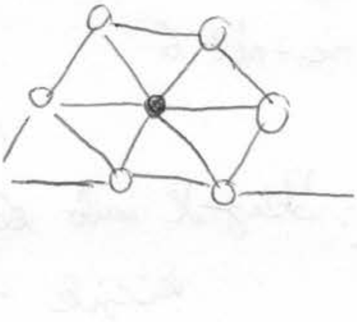
átlagtér (belső tér) közelítés

$$-J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j - H\sum_i S_i$$

$J>0$ ↑ (ferromágneses)

ha i és j szomszédos spinek indexei





1 adott spint kiszemelünk
↳ környező spinek átlagosan hogy viselkednek

↓

ebben a térben a kiszemelt spin hogy áll be

↓

a szomszédai is így fognak viselkedni → új átlagos viselkedés

↓

ezt visszatesszük az eredeti egyenletbe → önkonzisztens módszer

minél nagyobb a sz., annál jobb ez az elm.

Áll.: 4 és magasabb dim.-ban ez az elm. egzakt

3D-ban csak közelítés (fluktuációk nagyok vannak)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i$$

$\langle S_i \rangle = m$ (mágnesezettség = spinek átlaga

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \underbrace{(S_i - m + m)}_{} \underbrace{(S_j - m + m)}_{} - H \sum_i S_i$$

↰ átlagú tagok

$$\mathcal{H} = -\frac{Jm^2}{2} N \cdot q - J \sum_{\langle ij \rangle} m(S_j - m) - Jm \sum_{\langle ij \rangle} (S_i - m) - J \cancel{\sum_{\langle ij \rangle} (S_i - m)(S_j - m)} - H \sum_i S_i$$

Nq-val 2-szer számolunk ∀ kh.-t $\left(\binom{q}{2}\right)$

koordinációs szám (első szomszédok száma), pl. sc-nél 6

Közelítés: átlagtól való eltérések szorzatai kicsik ~0 koord. szám $\sum_{\langle ij \rangle} s_i = \frac{q}{2} \sum_i s_i$

$$\mathcal{H}_{MF} \approx -\frac{J m^2 N q}{2} - (\underbrace{J m q}_{H' : \text{„belső tér"}} + H) \sum_i s_i + \underbrace{\ldots}_{\text{elhanyagolás}}$$

(mean-field)

→ független spinek összegére vezettük vissza a feladatot, melyek a többi spin átlagos terében vannak

$m^{(1)} = \ldots$

$$\mathcal{H}(m^{(1)}) \xrightarrow{Z} m^{(2)} \longrightarrow \mathcal{H}(m^{(2)}) \xrightarrow{Z} \ldots$$

$$Z = \sum e^{-\beta \mathcal{H}_{MF}} = e^{+\frac{\beta J m^2 N q}{2}} \sum_{\{s_i\}} e^{\beta (J m q + H) \sum_i s_i}$$

$$Z = e^{\frac{\beta J m^2 N q}{2}} \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} \ldots \prod_i e^{\beta (J m q + H) s_i}$$

$$Z = e^{\frac{\beta J m^2 N q}{2}} \left[2 \operatorname{ch}\left(\beta (J m q + H)\right) \right]^N$$

$$M = m N = \left\langle \sum_i s_i \right\rangle = \sum_{\{s_i\}} \frac{\left(\sum s_i\right) e^{\frac{\beta J_q N m^2}{2} + \beta \overbrace{(J_q m + H)}^{H_{eff}} (\sum s_i)}}{Z} =$$

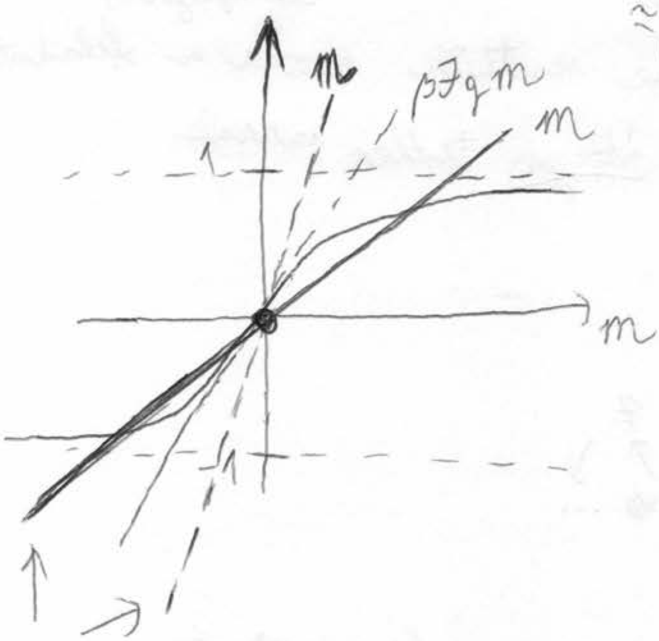
$$= \frac{\partial \ln Z}{\partial (\beta H_{eff})} = \frac{\partial}{\partial \beta H_{eff}} N \ln\left(2 \operatorname{ch}(\beta H_{eff})\right) = N \operatorname{th}(\beta H_{eff})$$

$$m = \operatorname{th}\left(\beta (J_q m + H)\right)$$

szomszédok átlagos tere m → a kiszemelt spin által érzett tér $(m \cdot J_q + H)$

$m = \operatorname{th}(\beta H)$

$H=0 \quad m=?$ $\qquad m = \mathrm{th}\big(\underbrace{\beta J q m}_{\approx \beta J q m + \dots}\big)$



$$\mathrm{th}(x) = x - \frac{x^3}{3} + \dots$$

$$\beta J q \le 1$$

(valójában $\beta J q m$ láttunk, nem m)

$$\begin{cases} \text{ha } \beta J q \le 1 & m = 0 \\ \text{ha } \beta J q > 1 & 0,\ m_1,\ -m_1 \end{cases}$$

$\Rightarrow \quad \beta_c J q = 1$

$J q = k_B T_c \quad \rightarrow$ kritikus hőmérséklet

$\cancel{H=0}$

alatta $(T_c > T)$ 3 mo.

felett $(T_c < T)$ 1 mo.

$$m = \mathrm{th}\left(\frac{T_c}{T} m\right)$$

T_c környékén m kicsi $\rightarrow \mathrm{th}(x) \approx x - \dfrac{x^3}{3}$

$$\Rightarrow \quad m \approx \frac{T_c}{T} m - \frac{1}{3} \frac{T_c^3}{T^3} m^3$$

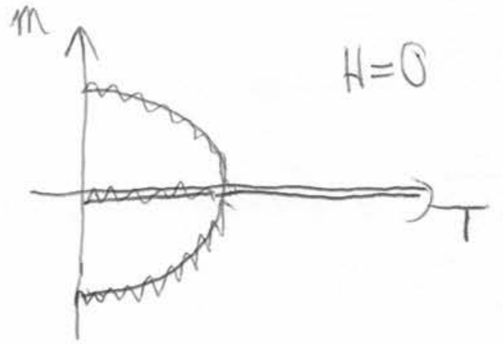
$$1 \approx \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2$$

$$3\left(\frac{T_c}{T}-1\right)\left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \approx m^2$$

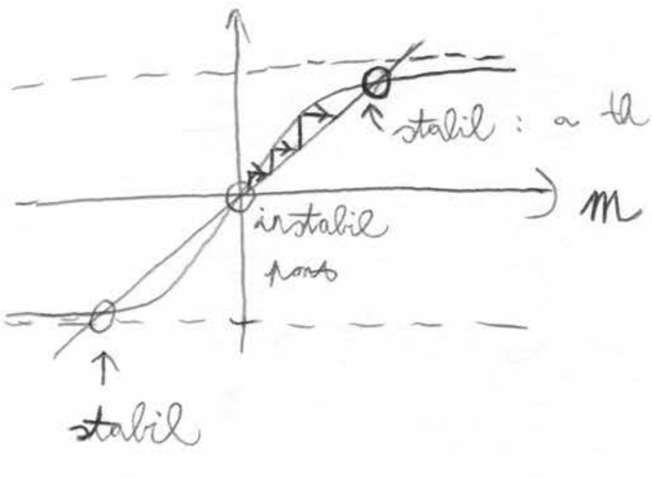
$\Rightarrow$ ha $T \approx T_c$:

$$m=0, \quad \pm\sqrt{3\frac{T_c-T}{T_c}} = m$$

- ha $T_c < T \Rightarrow$ imag. → csak a 0 a mo.
- ha $T < T_c \Rightarrow$ 3 mo.



stabilitási analízis → melyik görbe ~~stabil~~ ?



stabil: a th meredeksége itt $\ominus$ → visszatérünk az eredeti mo.-ba

A kezdeti feltételektől függ, hogy hova jut a rendszer (melyik stabil pontba), de ezt nem látjuk

→ spontán beugrik a rsz. valamelyik mo.-ba

„spontán szimmetriasértés": a mo.-nak már nincs meg a kezdeti megoldása

Hasonló mechanizmus volt az Univ. kel. után:

kezdetben az összes erő szimmetrikus volt a tömegre (nem függött tőle), de később ez megváltozott, tömeget kaptak az erőközvetítő rész.-k

máj. 17-én gyak ZH
lesz előadás helyett

1) Ionos elektrolitok:

α. ion → átlagtér közelítés

a sugarú körben érvényes a saját Coulomb-tere,

de ha $r > a$ → árnyékolás

$$\Psi(r) = \frac{e_\alpha}{Dr} \cdot \frac{e^{-K(r-a)}}{1+Ka} \quad \text{ha } r > a$$

$$\Psi(r) = \frac{e_\alpha}{Da} \cdot \frac{1}{1+Ka}$$

eredetileg semleges töltés felemelni potenciálra → munkavégzés

δe_α töltést visszük a rendszerbe ∞-ből

$$\delta e_\alpha \cdot \left(\frac{e_\alpha}{Da}\right) \Big\} \text{ennyi munkát végzünk} \qquad \Psi_\alpha = \Psi(a) - \frac{e_\alpha}{Da}$$

$$F = \sum_\alpha \int_0^1 \Psi_\alpha(\lambda)\, e_\alpha \, d\lambda \quad \leftarrow \quad \lambda \cdot e_\alpha \quad \lambda = 0 \to 1$$

$$\Psi_\alpha = \Psi(a) - \frac{e_\alpha}{Da} = -\frac{e_\alpha K}{D(1+Ka)}$$ → ez adja a legtöbb járulékot

$$F = -\sum_\alpha \frac{n e_\alpha^2}{D} K \int_0^1 \frac{\lambda^2 d\lambda}{1+\lambda K a} = -\sum \frac{n_\alpha e_\alpha^2}{3D} \cdot K \cdot g(K)$$

$$K = \frac{4\pi}{DkT} \cdot \sum_i e_i^2 n_i \sim \lambda^2 \qquad \text{ahol } g(K) = 1 - \frac{3}{4}K + \dots$$

$$F = -\sum_\alpha n_\alpha e / 3D \to F/NkT = -\frac{2}{3} \cdot [\text{illegible}]^{1/2} \cdot \left\{ \frac{N^{1/2} \cdot \overset{?}{z^2} e^2}{DkT} \right\}^{3/2}$$

π vagy T_1 ?

2) "Valódi" gázok

$\boxed{N, V}$ kanonikus sokaság, klasszikus közelítés

$$Z = \frac{1}{N!\, h^{3N}} \int e^{-\mathcal{H}/k_B T} \, dq_1 \ldots dq_{3N}\, dp_1 \ldots dp_{3N}$$

$$\mathcal{H}_{kin} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{3N} p_i^2$$ ← az impulzusokat leválasztjuk (↳ kvantumosba lehetne pl. véges energiatag is)

$$U = U(q_1 \ldots q_{3N})$$

$$Z = \frac{1}{N!\, h^{3N}} \left[\int e^{-\frac{1}{2mk_BT} \sum_{i=1}^{3N} p_i^2} \, d^{3N}p \right] \underbrace{\left[\int e^{-U(q_1 \ldots q_{3N})} \, d^{3N}q \right]}_{Q}$$

$$Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{2m k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3N}{2}} \cdot Q$$

konfigurációs partíciós fv.

$$u(q_1 \ldots q_{3N}) \underset{\uparrow}{=} \sum_{i>j} u_{ij}$$

Molekulák között csak párkölcsönhatások vannak (feltételezés)

$$Q = \int \prod_{i} \prod_{\substack{j \\ i>j}} e^{-\frac{u_{ij}}{k_B T}} \, dq_1 \ldots dq_{3N}$$

$u_{ij} = u(r_{ij})$ ha távol vannak (közel már az orientációtól, ... is függhet)

$$f_{ij} = e^{-\frac{u_{ij}}{k_B T}} - 1 \Rightarrow e^{-\frac{u_{ij}}{k_B T}} = f_{ij}+1$$

- ha $u_{ij}=0 \Rightarrow f_{ij}=0$ (távol vannak a molekulák)

f: Mayer-fv.

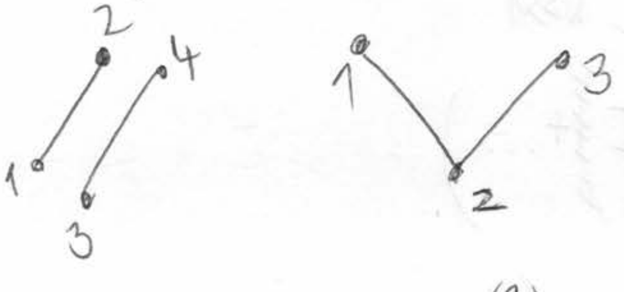
- ha $u_{ij}\to\infty \Rightarrow f_{ij}=-1$

$$Q = \int \prod_{\substack{ij\\ i>j}} (1+f_{ij})\, dq_1 \dots dq_{3N}$$

$$\prod_{\substack{ij\\ i>j}} (1+f_{ij}) = \underbrace{1}_{Q_1} + \underbrace{\sum_{\substack{ij\\ i>j}} f_{ij}}_{Q_2} + \underbrace{\sum_{\substack{ijkl\\ i>j\\ k>l}} f_{ij} f_{kl}}_{Q_3} + \dots$$

a többi Σ is erre megy

f_{ij} akkor válik jelentőssé, ha 2 mol. közel van (ütköznek)



$f_{12} \cdot f_{23}$ → hármas ütközés már ritka

$\Downarrow$

sorfejtésben Q_2-ig megyünk

$$Q_2 = \sum_{\substack{ij \\ i>j}} \int f_{ij}\, dq_1 \dots dq_{3N}$$

- f_{ij} $\forall$ tagra ugyanannyi
- f_{ij} csak q_i, q_j-től függ

$$\Rightarrow Q_2 = \frac{N(N-1)}{2} \int \left(e^{-u(\vec{r}_{12})/kT} - 1 \right) dx_1\, dy_1\, dz_1\, dx_2\, dy_2\, dz_2 \cdot \underbrace{\dots}_{3N-6 \text{ db. vált.}}$$

$$Q_2 = \frac{N(N-1)}{2} V^{N-2} \cdot \int \left(e^{-u(\vec{r})/k_BT} - 1 \right) \underbrace{d^3r\, d^3R}_{V}$$

$r \equiv |r_1 - r_2|$

$\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

$\vec{R} \equiv \dfrac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}$

$$Q_2 = \frac{N(N-1)}{2} \cdot V^{N-1} \cdot \underbrace{\int \left(e^{-\frac{u(\vec{r})}{k_BT}} - 1 \right) d^3r}_{I}$$

$$Q_2 = \frac{N(N-1)V^{N-1}}{2} \cdot I$$

$N \gg 1$

$$Q = V^N \left(1 + \frac{N^2}{2V} I + \dots \right)$$

$$\Rightarrow Z = Z_{id}\left(1+\frac{N^2}{2V}I+\dots\right)$$

$$F = -k_BT\ln Z = -k_BT\ln Z_{id} - k_BT\ln\left(1+\frac{N^2}{2V}I+\dots\right)$$

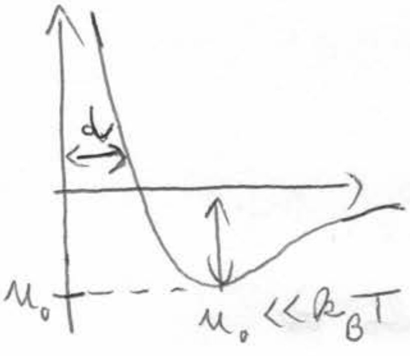
$$F = F_{id} - k_BT\frac{N^2}{2V}I+\dots$$

↑ sorfejtés (a nem id. gázos korrekció kicsi)

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{N,V} = \frac{k_BTN}{V}\left(1-\frac{N}{2V}I+\dots\right)$$

← I-t beírva már állapotegyenletet kapunk

$$I = 4\pi\int_0^\infty\left(e^{-u(r)/k_BT}-1\right)r^2\,dr$$



$0<r<d$

↓ (u nagy)

$f(r) = -1$

$d<r$

↓

$e^{-\dots} \approx 1-\frac{u(r)}{k_BT}$

↑

ha $u_0 \ll k_BT$

$$f(r) = -\frac{u(r)}{k_BT}$$

$$\Rightarrow I = 4\pi\left[\int_0^d(-1)\,r^2\,dr + \int_d^\infty -\frac{u(r)}{k_BT}r^2\,dr\right] =$$

$$= -\frac{4\pi d^3}{3} + \frac{2}{k_BT}\underbrace{(-2\pi)\int_d^\infty u(r)\,r^2\,dr}_{a}$$

← u-tól függő paraméter (mástól nem)

$$\boxed{a = -2\pi\int_d^\infty u(r)\,r^2\,dr}$$

$$I = \underbrace{-\frac{4\pi}{3}d^3}_{=:\,-2b} - \frac{2a}{k_BT}$$

$$\boxed{b = \frac{2\pi}{3}d^3}$$

$$I = -2b + \frac{2a}{k_B T}$$

$$p = \frac{N k_B T}{V}\left[1 + \frac{N}{V}\left(b - \frac{a}{k_B T}\right) + \ldots\right]$$

$$\frac{N k_B T}{V} = \left(p + \frac{N^2}{V^2}a\right)\frac{1}{1 + \frac{N}{V}b}$$

$$\frac{N k_B T}{V} \approx \left(p + \frac{N^2}{V^2}a\right)\left(1 - \frac{Nb}{V}\right)$$

$$\boxed{N k_B T \approx \left(p + \frac{N^2}{V^2}a\right)(V - Nb)}$$

Van der Waals állapotegyenlet

- $b \approx$ mol. sugár

$\Downarrow$

$Nb \approx$ molekulák által elfoglalt tér

- $a \to$ kh.-i járulék

Van der Waals-egyenlet $\to$ statisztikus fizikai állapotösszeg perturbációs sora

1. óra

Ideális gáz molekulákból

m, T, V, N

$$Z = Z_{id} \cdot Z_{b}$$

↑ a belső mozgások függetlenek a TKP mozgásától (feltételezés)

$$Z_{id} = \left(\frac{2\pi m T}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \cdot \frac{V^N}{N!}$$

$$Z_b = j^N(T), \quad \text{ahol} \quad \underbrace{j(T)}_{\substack{\text{1 molekula} \\ \text{belső állapot-} \\ \text{összege}}} = \sum_{l} g_l \cdot e^{-\frac{\varepsilon_l}{k_B T}}$$

el. és mag állapotai is

belső állapotokra

$$j(T) = \underset{e^-}{g_e} \cdot \underset{\text{magspin}}{g_m}$$

$g_m = (2 J_m + 1)$ magspin degenerációs foka (ε_l állapot multiplicitása)

$$j(T) = \underset{\text{rotáció}}{r(T)} \cdot \underset{\text{rezgés}}{v(T)}$$

• forgás

$$z(T) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot e^{-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2k_B T \cdot I}}$$

→ ezt ki lehet elemezni alacsony és magas hőmérsékletre

$$\frac{\hat{L}^2}{2I} = \mathcal{H}$$

$$\varepsilon_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \to (2l+1) \text{-szeresen degenerált}$$

$\forall$ szint

• rezgés

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu$$

$$z(T) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}\left(n+\frac{1}{2}\right)} = \frac{e^{-\frac{h\nu}{2k_B T}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}} = \frac{1}{2\,\mathrm{sh}\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}$$

Disszociációs reakciók

$$A + B \rightleftharpoons AB$$

$$V,\ N_A,\ N_B,\ N_{AB}$$

$$p \sim Z(N_A, N_B, N_{AB}, V, T) = \frac{f_A^{N_A} f_B^{N_B} f_{AB}^{N_{AB}}}{N_A!\ N_B!\ N_{AB}!}$$

(valósz.)

ahol $f_A = Z_A$ (A molekulák (belső és külső) állapotösszege)

$N_A + N_{AB} = $ áll (A-k összes száma)

$N_B + N_{AB} = $ áll (B-k összes -||-)

$$\ln Z = N_A \ln f_A + N_B \ln f_B + N_{AB} \ln f_{AB} \underset{\text{Stirling-form.}}{-} (N_A \ln N_A - N_A) -$$

$$-(N_B \ln N_B - N_B) - (N_{AB} \ln N_{AB} - N_{AB})$$

Tfh. megtaláltuk a max. valósz.-hez tartozó $\bar{N}_A, \bar{N}_B, \bar{N}_{AB}$-t!

Az ettől való eltéréseket jelöljük δN_A, δN_B, δN_{AB}-vel.

Ekkor

$$\delta N_A + \delta N_{AB} = 0 \quad (\text{mivel } N_A + N_{AB} = \text{konst.})$$

$$\delta N_B + \delta N_{AB} = 0$$

$$\Rightarrow \delta N_A = \delta N_B = -\delta N_{AB}$$

$$\delta Z = \delta N_A \ln f_A + \delta N_B \ln f_B + \delta N_{AB} \ln f_{AB} - \delta N_A \ln N_A -$$

$$- \delta N_B \ln N_B - \delta N_{AB} \ln N_{AB}$$

$$\delta Z = \underset{\substack{\Uparrow \\ -\delta N_{AB}}}{\delta N_A} \ln \frac{f_A}{N_A} + \underset{\substack{\Uparrow \\ -\delta N_{AB}}}{\delta N_B} \ln \frac{f_B}{N_B} + \delta N_{AB} \ln \frac{f_{AB}}{N_{AB}}$$

$$\delta Z = \delta N_{AB} \underbrace{\left(\ln \frac{f_{AB}}{N_{AB}} - \ln \frac{f_A}{N_A} - \ln \frac{f_B}{N_B} \right)}_{0} = 0 \rightarrow \text{maximális valószínűségű áll.-nál}$$

$$\frac{N_{AB}}{N_A \cdot N_B} = \frac{f_{AB}}{f_A \cdot f_B}$$

$$\frac{N_{AB}/V}{N_A/V \cdot N_B/V} = \frac{V f_{AB}}{f_A \cdot f_B} = \frac{n_{AB}}{n_A n_B}$$

tömeghatás elve

Mi van, ha alapállapotban vannak az atomok / molekulák?

$$f_A = \left(\frac{2\pi m_A k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot V \cdot \underbrace{j_A^{0}}_{\text{belső állapotok alapállapotra}} \cdot e^{-\varepsilon_A^{(0)}/k_B T} \cdot \underbrace{X}_{\text{ezt elhagyhatjuk (gerjesztett tagokat jelöli)}}$$

$f_B = \ldots$

$f_{AB} = \ldots$

$$K(T) = \frac{n_{AB}}{n_A n_B} = \left[\frac{(m_A + m_B)}{2\pi m_A \cdot m_B} \frac{h^2}{k_B T}\right]^{3/2} \frac{j_{AB}^{(0)}}{j_A^{(0)} j_B^{(0)}} e^{W_0/k_B T}$$

ahol $W_0 = \varepsilon_A^{(0)} + \varepsilon_B^{(0)} - \varepsilon_{AB}^{(0)}$

(→ Ha feljebb van $\varepsilon_{AB}^{(0)}$ mint $\varepsilon_A^{(0)} + \varepsilon_B^{(0)}$, ~~végbe megy a~~ kicsi lesz n_{AB}, nem akar végbemenni a folyamat)

$\left(K(T) = \frac{n_{AB}}{n_A n_B}\right)$

ez a képlet nem ideális gázra is igaz, $K(T)$-t kísérletileg meg is határozhatjuk, de elméletileg nem biztos, hogy ki tudjuk számolni

utolsó héten csüt.-ön lesz elővizsga → nem muszáj elfogadni a jegyet