$= 0, 1, 2, \ldots, N$). A folyamat master-egyenlete ugyanolyan típusú, mint a 10.20. feladaté. Az előző feladat eredménye alapján könnyen meghatározható a működő gépek számának várható értéke:

$$\langle n(t)\rangle = me^{-(\lambda+\mu)t} + \frac{N\lambda}{\lambda+\mu}\left[1-e^{-(\lambda+\mu)t}\right].$$

A generátorfüggvény egyenlete most

$$\frac{\partial G(t,z)}{\partial t} = (z-1)\left[\lambda N - (\lambda z+\mu)\frac{\partial}{\partial z}\right] G(t,z).$$

A $G(z=1)=1$ feltételt kielégítő stacionárius megoldás:

$$G(z) = \left(\frac{\mu+\lambda z}{\mu+z}\right)^N = \sum_{n=0}^{N}\binom{N}{n}\left(\frac{\lambda}{\mu+\lambda}\right)^n\left(\frac{\mu}{\mu+\lambda}\right)^{N-n} z^n,$$

a stacionárius eloszlásfüggvény pedig a

$$P_n^* = \binom{N}{n}\left(\frac{\lambda}{\mu+\lambda}\right)^n\left(\frac{\mu}{\mu+\lambda}\right)^{N-n}$$

Bernoulli-eloszlás.

STATISZTIKUS FIZIKA

11. Bevezető feladatok. Alapfogalmak

11.1. a) Annak a valószínűsége, hogy egy kiválasztott molekula a ΔV térfogatban tartózkodik:

$$p = \frac{\Delta V}{V},$$

s mivel a molekulák függetlenek egymástól, n molekula ΔV-ben való tartózkodásának valószínűségét a binomiális eloszlás adja:

$$W(n) = \frac{N!}{(N-n)!n!}\, p^n(1-p)^{N-n}.$$

A $V\to\infty$, $N\to\infty$, $\varrho = N/V =$ áll., $\Delta V =$ áll. határátmenetben a Poisson-eloszlást kapjuk:

$$W(n) = \frac{\lambda^n}{n!}\,\frac{N-1}{N}\cdot\frac{N-2}{N}\cdot\ldots\cdot\frac{N-n}{N}\left(1-\frac{\lambda}{N}\right)^N(1-p)^{-n} =$$

$$= \frac{\lambda^n}{n!}e^{-\lambda},$$

ahol bevezettük a $\lambda = pN = \varrho\Delta V$ jelölést.

b) $\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} nW(n) = \lambda,$

$\overline{n^2} - \bar{n}^2 = \lambda.$

11.2. A labda mozgása periodikus és minden pattogás szimmetrikus, így számításunkban elég egy fél periódust vizsgálni.

A mozgást az

$$x(t) = h - \frac{g}{2}t^2$$

függvény írja le, s a vizsgált időtartam a 0 és a $T = \sqrt{2g/h}$ érték által határolt intervallum. Az

$$\langle x \rangle = \int_0^h x p(x)\,dx$$

várható értéket célszerű átírni az

$$\langle x \rangle = \int_0^T x(t) p(t)\,dt$$

alakba, mivel véletlenszerű felvételek esetén $p(t)$ egyenletes eloszlású: $p(t) = 1/T$. Így

$$\langle x \rangle = \int_0^T x(t)\frac{1}{T}\,dt = \frac{2}{3}h.$$

Mérési eredményünk N darab ξ_i érték, ezért

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N}\sum_i \xi_i,$$

és így

$$h = \frac{3}{2N}\sum_i \xi_i.$$

A mért értékek szórása az átlag szórása:

$$\sigma_h^2 = \frac{9}{4N}\sigma_\xi^2,$$

ahol

$$\sigma_\xi^2 = \frac{\sum_i \left(\xi_i - \sum_i \xi_i/N\right)^2}{N-1}$$

az empirikus szórás.

11.3. a) Két fal között pattogó labda.
b) Rezgő vagy forgó mozgást végző test, oldalnézetben.
c) Földre pattogó labda (x a gravitációs tér iránya).

11.4. Mivel azonos részrendszerekről van szó, ezért

$$\overline{f_i} = f_0$$

független i-től, s így $\bar{f} = Nf_0$. A részrendszerek függetlenek egymástól, ezért

$$\overline{f^2} = \sum_{i,j=1}^{N} \overline{f_i f_j} = \sum_{i,j=1}^{N} \overline{(f_i - f_0)(f_j - f_0)} + N^2 f_0^2 =$$
$$= N\overline{(\Delta f_0)^2} + N^2 f_0^2,$$

tehát a relatív szórás

$$\frac{\sqrt{\overline{(\Delta f)^2}}}{\bar{f}} = \frac{\sqrt{\overline{f^2} - \bar{f}^2}}{\bar{f}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\frac{\sqrt{\overline{(\Delta f_0)^2}}}{f_0} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

11.5. a) $$\overline{x^2} = L^2\overline{\left|\sum_{i=1}^{N} e^{i\varphi_i}\right|^2} = L^2 \sum_{i,j=1}^{N} \overline{e^{i(\varphi_i - \varphi_j)}} =$$

$$= L^2 N = L^2\frac{t}{\tau}.$$

b) $$\overline{\mathbf{x}^2} = L^2\overline{\left|\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i\right|^2} = L^2 \sum_{i,j=1}^{N} \overline{(\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j)} = L^2 N,$$

tehát nem függ a dimenziótól.

c) $$\overline{\mathbf{x}^2} = L^2\overline{\left|\sum_{i=1}^{N} \cos\vartheta_i e^{i\varphi_i}\right|^2} =$$

$$= L^2 \sum_{i,j=1}^{N} \overline{\cos\vartheta_i \cos\vartheta_j}\ \overline{e^{i(\varphi_i - \varphi_j)}} =$$

$$= L^2 \sum_{i,j=1}^{N} \overline{\cos\vartheta_i \cos\vartheta_j}\, e^{i(\varphi_i - \varphi_j)} =$$

$$= L^2 N\,\overline{\cos^2\vartheta} = \frac{1}{2}L^2 N.$$

d) $\overline{\mathbf{x}^2} = \overline{\left|\sum_{i=1}^{N} L_i e^{i\varphi_i}\right|^2} = \sum_{i,j=1}^{N} \overline{L_i L_j e^{i(\varphi_i-\varphi_j)}} =$

$$= \sum_{i=1}^{N} \overline{L_i^2} = \overline{L^2} N = \frac{L^2}{3} N.$$

11.6. Az N-edik lépés után a részecske helyzete:

$$\mathbf{x} = \sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n,$$

ahol $\mathbf{x}_n$ az n-edik lépésben történő elmozdulás. A teljes elmozdulás négyzetének átlaga:

$$\overline{\mathbf{x}^2} = \sum_{n,k=1}^{N} \overline{(\mathbf{x}_n \mathbf{x}_k)} \quad \text{és} \quad \overline{(\mathbf{x}_n \mathbf{x}_k)} \quad \text{csak } (n-k)\text{-tól függ.}$$

Ha az n-edik lépésben a részecske valamilyen irányban lépett, akkor az $(n+i)$-edik lépésben az ugyanilyen irányban való lépés valószínűsége legyen a_{n+i}:

$$a_{n+i} = a_{n+i-1}\alpha + b_{n+i-1}\beta + 2c_{n+i-1}\gamma,$$

ahol b_{n+i-1}, c_{n+i-1} a visszafelé, illetve az n-edik lépésre merőleges irányba való lépés valószínűsége az $(n+i-1)$-edik lépésben.

Hasonlóan,

$$b_{n+i} = a_{n+i-1}\beta + b_{n+i-1}\alpha + 2c_{n+i-1}\gamma,$$

és az $(n+i)$-edik és $(n+i-1)$-edik lépés skalárszorzatának átlaga:

$$\overline{(\mathbf{x}_{n+i}, \mathbf{x}_{n+i-1})} = a_{n+i} - b_{n+i} = (a_{n+i-1} - b_{n+i-1})(\alpha-\beta) =$$
$$= \overline{(\mathbf{x}_{n+i-1}, \mathbf{x}_{n+i-2})}(\alpha-\beta).$$

Így tehát

$$(\mathbf{x}_n \mathbf{x}_k) = (\alpha-\beta)^{|n-k|}.$$

Ezek után a végeredmény:

$$\overline{\mathbf{x}^2} = N\frac{1+q}{1-q} - 2q\frac{1-q^N}{(1-q)^2},$$

ahol $q = \alpha-\beta$.

11.7. Először vizsgáljuk egy (i, j) pontba való eljutás valószínűségét, ahol sem $i \neq L$, sem pedig $j \neq L$. Mivel az i, ill. a j irányba való elmozdulás valószínűsége $1-\frac{p}{2}$, ill. $\frac{p}{2}$, ezért

$$P_{ij} = \binom{i+j-2}{j-2}\left(\frac{p}{2}\right)^{j-1}\left(1-\frac{p}{2}\right)^{i}.$$

Az (i, L) pontokban az i irányba lépés valószínűsége 1, így a B pontba az i irányból való belépés $P_{LL}^{(1)}$ valószínűségét megkapjuk, ha a golyó valamelyik $(i, L-1)$ $(i<L)$ pontba jutásának valószínűségét szorozzuk $p/2$-vel (a j irányba lépés valószínűségével):

$$P_{LL}^{(1)} = \frac{p}{2}\sum_{k=1}^{L-1} P_{i,L-1} =$$
$$= \left(\frac{p}{2}\right)^{L-1}\sum_{k=1}^{L-1}\binom{L+k-3}{k-1}\left(1-\frac{p}{2}\right)^{k-1}.$$

A B pontba a j irányból érkezés $P_{LL}^{(2)}$ valószínűségét hasonlóan számolhatjuk ki. Az (L, j) sorban a j irányba lépés valószínűsége p, ezért az $(L-1, j)$ (ahol $j<L$) pontba jutás $P_{L-1,j}$ valószínűségét az $\left(1-\frac{p}{2}\right)p^{L-j}$ tényezővel kell szoroznunk ahhoz, hogy megkapjuk annak a valószínűségét, hogy a golyó az $(L-1, j)$ pontból az i irányba lépett, majd legurult a B pontba. $P_{LL}^{(2)}$-t ezek után a j-re való összegzés adja:

$$P_{LL}^{(2)} = \left(1-\frac{p}{2}\right)\sum_{j=1}^{L-1} P_{L-1,j}p^{L-j} =$$
$$= \left(1-\frac{p}{2}\right)^{L-1}p^{L-1}\sum_{k=1}^{L-1}\binom{L+k-3}{k-1}\frac{1}{2^k}.$$

Így a B pontba jutás valószínűsége:

$$P_{LL} = P_{LL}^{(1)} + P_{LL}^{(2)} = \left(\frac{p}{2}\right)^M \sum_{k=0}^{M-1} \binom{M+k-1}{k} \left(1-\frac{p}{2}\right)^k +$$

$$+\left(1-\frac{p}{2}\right)^M p^M \sum_{k=0}^{M-1} \binom{M+k-1}{k} \frac{1}{2^k},$$

ahol bevezettük az $M = L-1$ jelölést. Könnyen megmutatható, hogy a $P_{LL}^{(2)}$ összeg minden tagja nagyobb, mint a megfelelő tag a $P_{LL}^{(1)}$-et meghatározó összegben, tehát $P_{LL}^{(2)} > P_{LL}^{(1)}$, s így

$$P_{LL} \leqq 2P_{LL}^{(2)}.$$

A $P_{LL}^{(2)}$ valószínűséget viszont kiszámíthatjuk, mivel $p=1$ esetén $P_{LL}^{(1)} = P_{LL}^{(2)}$ és $P_{LL}=1$, amiből

$$\sum_{k=0}^{M-1} \binom{M+k-1}{k} \frac{1}{2^k} = 2^{M-1},$$

ezért

$$P_{LL}^{(2)} = \frac{1}{2}[(2-p)p]^M.$$

Az $L \to \infty$ határátmenetben $P_{LL}^{(2)}$ (és következésképpen P_{LL}) csak akkor nem nulla, ha $p=1$. Tehát $p_c = 1$, mivel $p=1$ esetén természetesen $P_{LL}=1$.

11.8. A fázistér $d^3p\,d^3q$ tartományába eső állapotok száma $d^3p\,d^3q/h^3$. Azon állapotok száma, melyek impulzusa a $\mathbf{p}$ körüli d^3p térfogatba esik

$$N(\mathbf{p})\,d^3p = \int d^3q \frac{d^3p}{h^3} = \frac{V}{h^3} d^3p, \qquad (1)$$

ami azt jelenti, hogy $N(\mathbf{p})$ független $\mathbf{p}$-től. A p és $p+dp$ közötti nagyságú impulzussal jellemzett állapotok számát megkapjuk, ha az (1) kifejezést még az impulzus irányára is integráljuk

$$N(p)\,dp = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} N(\mathbf{p}) p^2\,dp \sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi =$$

$$= \frac{V}{h^3} 4\pi p^2\,dp.$$

Az impulzus nagysága és az energia között egyértelmű kapcsolat áll fenn: $p^2/2m = E$, ezért ugyanennyi állapot van $\sqrt{2mE}$ és $\sqrt{2mE} + \sqrt{\frac{m}{2E}}\,dE$ közötti intervallumban is $\left(dp = \sqrt{\frac{m}{2E}}\,dE\right)$. Ha az E és a dE értéket adjuk meg, akkor az E és $E+dE$ közötti energiaértékkel jellemzett állapotok $\omega(E)\,dE$ száma úgy adódik, hogy a fenti összefüggésben p-t és dp-t kifejezzük E-vel és dE-vel. Így azt kapjuk, hogy

$$\omega(E) = \frac{V}{h^3} 2\pi \sqrt{2m}^3 E^{1/2}.$$

Ugyanezt az eredményt kapjuk természetesen akkor is, ha először az E-nél kisebb energiájú állapotok $\Omega_0(E)$ számát határozzuk meg, majd azt deriváljuk.

Amennyiben olyan kvantummechanikai részecskét vizsgálunk, mely makroszkopikus méretű dobozban helyezkedik el, a fenti eredmények mind változatlanok maradnak.

11.9. a) Klasszikus oszcillátorra

$$\Omega_0^{(\mathrm{kl})}(E) = \frac{1}{h} \int_{H(p,\,q) < E} dp\,dq = \frac{1}{h} \pi \frac{2E}{\omega} = \frac{E}{\hbar\omega},$$

mivel

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2,$$

s így az integrál a $H(p, q) \leqq E$ feltétellel meghatározott ellipszis területét adja.

Kvantumoszcillátor esetén

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, \ldots,$$

ezért

$$\Omega_0^{(\mathrm{kv})}(E) = \left[\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right],$$

ahol a szögletes zárójel az x változó egész részét jelöli. Látszik, hogy $\Omega_0^{(\mathrm{kl})}(E) \approx \Omega_0^{(\mathrm{kv})}(E)$, ha $E \gg \hbar\omega$.

b) „Dobozba" zárt klasszikus részecske koordinátája a $[0, a]$ impulzusa a $[-\sqrt{2mE}, \sqrt{2mE}]$ tartományban változik, ezért

$$\Omega_0(E) = \frac{1}{h} 2\sqrt{2mEa}.$$

Kvantumos esetben a $\psi(0) = \psi(a) = 0$ feltételt kielégítő hullámfüggvény

$$\psi(x) = A \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\, x,$$

amennyiben

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n}{a}\pi, \qquad n = 1, 2, \ldots .$$

Tehát

$$\Omega_0(E) = \left[\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\pi}\right] = \left[\frac{2a}{h}\sqrt{2mE}\right].$$

Periodikus határfeltétel esetén

$$\psi(x) = A \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\, x + B \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\, x,$$

és a periodicitásból a

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = 2\pi\frac{n}{a}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

feltétel következik. Mivel az $n \neq 0$ állapotok kétszeresen degeneráltak, ezért

$$\Omega_0(E) = \left[\frac{2a}{h}\sqrt{2mE} + 1\right].$$

10.10. a) Legyen a $-\varepsilon_0$ állapotban N_- részecske, és N_+ részecske pedig a $+\varepsilon_0$ állapotban. N_+ és N_- kifejezhető az energiával és a részecskeszámmal:

$$E = M\varepsilon_0 = -N_-\varepsilon_0 + N_+\varepsilon_0,$$

$$N = N_- + N_+,$$

tehát

$$N_- = \frac{1}{2}(N-M), \qquad N_+ = \frac{1}{2}(N+M).$$

Az $M\varepsilon_0$ energiájú állapot statisztikai súlya (azaz a mikroállapotok száma):

$$\Omega(E) = \Omega_M = \frac{N!}{N_+!N_-!} = \frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(N-M)\right]!\left[\frac{1}{2}(N+M)\right]!},$$

b) A rendszer entrópiája (a Stirling-formulát alkalmazva)

$$S(E) = k \ln \Omega_M = -k\left\{N_- \ln\frac{N_-}{N} + N_+ \ln\frac{N_+}{N}\right\},$$

így a rendszer hőmérséklete:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N = \frac{1}{\varepsilon_0}\,\frac{\partial S}{\partial M} = \frac{k}{2\varepsilon_0}\ln\frac{N-M}{N+M}. \qquad (1)$$

Látható, hogy csak $E<0$ esetén lehet normális termodinamikai viselkedésről beszélni, mivel $E>0$ esetén $(M>0)$ a hőmérséklet negatív.

Az (1) egyenletből meghatározható N_-/N_+, s ezzel a betöltési számok N_+/N és N_-/N hőmérsékletfüggése:

$$\frac{N_-}{N} = \frac{e^{\varepsilon_0/kT}}{e^{\varepsilon_0/kT}+e^{-\varepsilon_0/kT}} \quad \text{és} \quad \frac{N_+}{N} = \frac{e^{-\varepsilon_0/kT}}{e^{\varepsilon_0/kT}+e^{-\varepsilon_0/kT}}.$$

Tehát kanonikus eloszlást kaptunk.

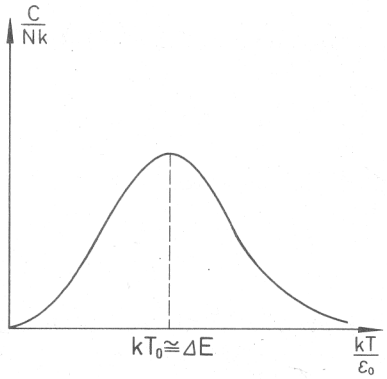
A hőkapacitás meghatározásához először $E(T)$-t számítjuk ki.

$$E = (N_+ - N_-)\varepsilon_0 = -N\varepsilon_0 \operatorname{th}\frac{\varepsilon_0}{kT},$$

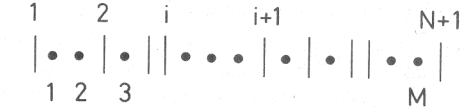
amelynek T szerinti deriválásából a fajhő:

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N = \frac{Nk\left(\frac{\varepsilon_0}{kT}\right)^2}{\operatorname{ch}^2\frac{\varepsilon_0}{kT}} = \frac{Nk\left(\frac{\Delta E}{kT}\right)^2 e^{\Delta E/kT}}{(1+e^{\Delta E/kT})^2},$$

ahol $\Delta E = 2\varepsilon_0$ a gerjesztés energiája. Ez az ún. Schottky-féle fajhő, amelynek jellegzetes maximuma gyakran megfigyelhető alacsony hőmérsékleten olyan rendszerekben, amelyekben a második gerjesztett állapot már nem játszik szerepet ($\varepsilon_2 - \varepsilon_0 \gg kT$).



11.11. a) $\Omega(E)$ kiszámításához meg kell határoznunk, hányféleképpen lehet M kvantumot szétosztani N oszcillátor között. (Az ábrán az i-edik és az $(i+1)$-edik pálcika közötti pontok száma



adja az i-edik oszcillátorra kiosztott kvantumok számát.) Az összes lehetséges szétosztást úgy kapjuk meg, hogy az $N-1$ pálcika és az M pont (összesen $N+M-1$ objektum) összes permutációjából kizárjuk a pálcikák egymás közötti és a pontok egymás közötti permutációit. Tehát

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

b) Ebből az entrópia

$$S = k\ln\Omega(E) =$$

$$= kN[(1+n)\ln(1+n) - n\ln n] + O(1),$$

ahol bevezettük az egy oszcillátorra átlagosan jutó kvantumok számát:

$$n = \frac{M}{N}.$$

A hőkapacitás kiszámításához meghatározzuk S hőmérsékletfüggését.

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_N \left(\frac{\partial M}{\partial E}\right)_N = \frac{k}{\hbar\omega}\ln\left(1+\frac{1}{n}\right),$$

amiből

$$n = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1},$$

és a hőkapacitás

$$C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_N = T\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)_N \frac{\partial n}{\partial T} = Nk\frac{\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)^2}.$$

Látható, hogy $(\partial S/\partial T) > 0$ tetszőleges T-re. Behelyettesítve $n(T)$-t S kifejezésébe, könnyen belátható az is, hogy $S \to 0$, ha $T \to 0$, azaz az entrópia pozitív minden hőmérsékleten, tehát a kvantumok bevezetése megoldást adott az entrópia negativitásával kapcsolatos klasszikus problémákra (lásd a 11.14. példát).

11.12. A termodinamika főtételei szerint, rögzített térfogat és részecskeszám esetén

$$T\,dS = dE = AkT^n\,dT,$$

amiből

$$S(T) = AkT^n/n + S_0,$$

ahol S_0 állandó. A rendszer energiája

$$E = E_0 + AkT^{n+1}/(n+1).$$

Az $S = k \ln \Omega$ összefüggés segítségével kapjuk, hogy

$$\Omega(E) \sim \exp\left[\frac{(n+1)^{n/(n+1)}}{kn}(Ak(E-E_0)^n)^{1/(n+1)} + S_0\right].$$

Az $n=3$ eset leírja például a sugárzási teret (l. a II. kötet 14.1. feladatát). Az $n \to 0$ határátmenetet vizsgálva azt találjuk, hogy $S(T)$ kifejezése csak akkor lesz véges, ha S_0-t Ak/n-nek választjuk. A $\lim_{n\to 0} \dfrac{x^n-1}{n} = \ln x$ összefüggést felhasználva

$$S = Ak \ln T,$$

és

$$\Omega(E) \sim E^A$$

adódik. Természetesen ugyanezt kaptuk volna, ha a $C_V = A$ hőkapacitású rendszert (ami például az egyatomos ideális gáznak felel meg) vizsgáltuk volna.

11.13. A rendszer hőmérséklete:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial(k \ln \Omega)}{\partial E} = \frac{1}{T^*} + \frac{\alpha N k}{E},$$

amiből

$$E = Nk\frac{\alpha T T^*}{T^* - T}.$$

Mivel $T \to T^*$ esetén E divergens, így a hadronanyag hőmérséklete sohasem nőhet T^* fölé. Eszerint T^* a hadronanyag maximális hőmérséklete.

11.14. Mivel független oszcillátorokról van szó

$$Z = Z_1^N,$$

ahol Z_1 egy oszcillátor állapotösszege:

$$Z_1 = \frac{1}{h^3}\int d\mathbf{p}\,d\mathbf{q} \exp\left[-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right)\right] = \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^3.$$

Az entrópiát a szabadenergiából számolhatjuk:

$$\mathcal{F} = -NkT \ln Z_1 = -3NkT \ln \frac{kT}{\hbar\omega},$$

s így

$$S = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}\right)_N = 3Nk\left(\ln \frac{kT}{\hbar\omega} + 1\right).$$

Ezek után a fajhő:

$$C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_N = 3Nk,$$

és az energia:

$$E = F + TS = 3NkT.$$

Megjegyzendő, hogy alacsony hőmérsékleten ($kT \ll \hbar\omega$) az entrópia negatívnak adódik, tehát a klasszikus leírás érvényét veszti.

11.15. Válasszuk az energia alapszintjét zérusnak. Az állapotösszeg:

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

ahol $\omega(E)$ az állapotsűrűség. $Z(\beta)$ és $\omega(E)$ tehát egymás Laplace-transzformáltjai. Könnyen ellenőrizhető, hogy

$$\omega(E) = \frac{AE^{\alpha N-1}}{\Gamma(\alpha N)}.$$

$\alpha = \frac{3}{2}$ esetén az egyatomos klasszikus ideális gáznak megfelelő összefüggéseket kapjuk, $\alpha = 3$ esetén pedig a háromdimenziós oszcillátorrendszernek megfelelőeket.

11.16. Kanonikus eloszlással számolva

$$E(T) = N\frac{2\varepsilon_0 e^{-\varepsilon_0/kT}}{1+2e^{-\varepsilon_0/kT}},$$

tehát

$$C(T) = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N = 2kN\frac{\left(\frac{\varepsilon_0}{kT}\right)^2 e^{\varepsilon_0/kT}}{(e^{\varepsilon_0/kT}+2)^2}.$$

11.17. Az állapotösszeg:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty}(n+1)e^{-\beta\hbar\omega(n+1)} =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial(\beta\hbar\omega)}\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\beta\hbar\omega(n+1)} =$$

$$= -\frac{\partial}{\partial(\beta\hbar\omega)}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2}.$$

A hőkapacitás:

$$C_v = \frac{Nk}{2}\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2\frac{1}{\mathrm{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)}.$$

Ezt az eredményt természetesen úgy is megkaphattuk volna, ha figyelembe vesszük, hogy minden kétdimenziós oszcillátor két egydimenzióssal (l. a 11.11. feladatot) ekvivalens.

11.18. Az elektron μ mágneses momentumának mágneses tér irányú komponense $\mu/2$ vagy $-\mu/2$, tehát egy részecske energiája $\varepsilon_\pm = \pm\mu B/2$ lehet. Mivel független spinekről van szó, a rendszer állapotösszege:

$$Z(T, B) = (e^{1/2(\beta\mu B)} + e^{-1/2(\beta\mu B)})^N,$$

energiája:

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = -N\frac{\mu B}{2}\mathrm{th}\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right),$$

entrópiája:

$$S = k\ln Z + E/T =$$

$$= Nk\left[\ln 2 + \ln\mathrm{ch}\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right) - \frac{\beta\mu B}{2}\mathrm{th}\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)\right],$$

hőkapacitása:

$$C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_B = Nk\frac{(\beta\mu B)^2}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)},$$

mágnesezettsége:

$$M = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial B} = N\frac{\mu}{2}\mathrm{th}\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right),$$

és szuszceptibilitása:

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T = N\beta\frac{(\mu/2)^2}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)}.$$

Zérus külső tér mellett

$$\chi_T = \frac{N(\mu/2)^2}{kT}.$$

11.19. Mivel a mágneses nyomaték négyzete mindenképpen $\mu^2/4$, így $\overline{M^2} = N\mu^2/4$. Természetesen ez adódik az

$$\overline{M^2} = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial(\beta B)^2}$$

összefüggés alkalmazásával is. A mágnesezettség szórása

$$(\overline{\Delta M^2})^{1/2} = (\overline{M^2} - \bar{M}^2)^{1/2} = N^{1/2}\frac{\mu/2}{\operatorname{ch}\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)}.$$

11.20. A rotátor energiája

$$E = \frac{1}{2}I(\dot{\vartheta}^2 + \sin\vartheta\dot{\varphi}^2) - Ed\cos\vartheta =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{p_\vartheta^2}{I} + \frac{p_\varphi^2}{I\sin^2\vartheta}\right) - Ed\cos\vartheta,$$

ahol p_ϑ, p_φ a kanonikus impulzusok, ϑ a rotátor tengelyének az E irányával bezárt szöge, φ pedig az azimutszög. Annak a valószínűsége, hogy a rendszer a $(\vartheta, \varphi, p_\vartheta, p_\varphi)$ fázistérbeli pont kis környezetében legyen, arányos az

$$\exp\left[-\frac{\beta}{2I}\left(p_\vartheta^2 + p_\varphi^2\frac{1}{\sin^2\vartheta}\right) + \beta Ed\cos\vartheta\right] d\vartheta\, d\varphi\, dp_\vartheta\, dp_\varphi$$

kifejezéssel. Ha csak az irány szerinti eloszlásra vagyunk kíváncsiak, p_ϑ-ra és p_φ-re integrálva kapjuk, hogy

$$P(\vartheta, \varphi)\, d\vartheta\, d\varphi \sim \exp(\beta Ed\cos\vartheta)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi,$$

amint azt a szemlélet alapján is várjuk.

11.21. A klasszikus rotátor állapotösszege:

$$Z_{kl} = \frac{1}{h^2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \iint_{-\infty}^{\infty} dp_\varphi\, dp_\vartheta \exp\left[-\frac{\beta}{2I}\left(p_\vartheta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\vartheta}\right)\right] =$$

$$= \frac{\pi}{h^2}\frac{2I}{\beta}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta = \frac{4\pi^2}{h^2}\frac{2I}{\beta} = \frac{2I}{\hbar^2}kT,$$

ahonnan $E = kT$ és $C = k$ az ekvipartíciós tétellel összhangban. A kvantumrotátor $\hbar^2 l(l+1)$ energiájú állapota $(2l+1)$-szeresen degenerált, ezért az állapotösszeg a következőképpen írható:

$$Z_{kv} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{2I}l(l+1)\right).$$

Alacsony hőmérsékleten csak az alapállapot és az első gerjesztett állapot lényeges:

$$Z \approx 1 + 3e^{-\beta\hbar^2/I} + \ldots,$$

s ezért

$$E \approx \frac{3\hbar^2}{I}e^{-\beta\hbar^2/I},$$

$$C \approx 3k\left(\frac{\hbar^2}{IkT}\right)e^{-\beta\hbar^2/I}.$$

A magashőmérsékleti $(T \to \infty)$ határesetet az állapotösszeg integrállá alakítása egyszerűsíti:

$$Z_{kv} = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_{l=0}^{\infty}(2\sqrt{\beta}l + \sqrt{\beta})\exp\left(-\sqrt{\beta}l(\sqrt{\beta}l + \sqrt{\beta})\frac{\hbar^2}{2I}\right) \approx$$

$$\approx \frac{1}{\beta}\int_0^{\infty} e^{(-\hbar^2/2I)x^2} 2x\, dx = \frac{2I}{\hbar^2}kT = Z_{kl},$$

tehát $C_{kv} = C_{kl} = k$.

11.22. A 11.20. feladat eredménye alapján a polarizáció:

$$P(T, E) = N\langle d\cos\vartheta\rangle = \frac{\int_{-1}^{1} e^{\beta dEx} x\, dx}{\int_{-1}^{1} e^{\beta dEx}\, dx} =$$

$$= Nd\left(\operatorname{cth}\beta Ed - \frac{1}{\beta Ed}\right) = NdL(\beta Ed),$$

ahol bevezettük az $L(x) = \operatorname{cth} x - \frac{1}{x}$ ún. Langevin-függvényt.

Könnyen belátható, hogy $x \ll 1$ esetén $L(x) = \frac{1}{3}x$, azaz $\beta E d \ll 1$ esetén

$$P(T, E) \approx \frac{1}{3} N d^2 \beta E,$$

amiből a szuszceptibilitás leolvasható:

$$\chi_T = \lim_{E \to 0} \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_T = \frac{N d^2}{3kT}.$$

11.23. Legyen $E_\perp$ az **E**-re merőleges erőtér nagysága. Az eredő tér irányába mutató **P** vektor nagysága ugyanúgy határozható meg, mint az előző feladatban, csak most a tér értéke $\sqrt{E^2 + E_\perp^2}$. Számunkra a polarizációs vektor $E_\perp$ irányú komponense az érdekes:

$$P_\perp = |\mathbf{P}| \frac{E_\perp}{\sqrt{E^2 + E_\perp^2}} = N d \frac{E_\perp}{\sqrt{E^2 + E_\perp^2}} L(\beta d \sqrt{E^2 + E_\perp^2}),$$

ahol $L(x)$ az előző feladatban bevezetett Langevin-függvény.

A keresett szuszceptibilitás kiszámításához a $\partial P_\perp / \partial E$ differenciálhányadost kell meghatároznunk az $E_\perp \to 0$ határesetben. Mivel $P_\perp \sim E_\perp$, a szuszceptibilitás azonnal leolvasható:

$$\chi_\perp = \lim_{E \to 0} \frac{\partial P_\perp}{\partial E_\perp} = \frac{N d L(\beta d E)}{E} = \frac{P(E)}{E}.$$

Most tehát maga a szuszceptibilitás is a Langevin-függvénnyel arányos. Az $E \to 0$ határesetben természetesen visszakapjuk az előző feladat eredményét.

11.24. a) $Z = \operatorname{Sp} e^{\beta \mathbf{B} \mathbf{M}}$, ennek alapján

$$M = \frac{1}{\beta Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial B} \right)_T = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial B} \right)_T = -\left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_T.$$

b) $Z = [e^{\beta\mu BJ}(1 + e^{-\beta\mu B} + e^{-2\beta\mu B} + \ldots + e^{-2J\beta\mu B})]^N = \left[\frac{\operatorname{sh}((2J+1)\beta\mu B/2)}{\operatorname{sh}(\beta\mu B/2)} \right]^N,$

így

$$M = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial B} \right)_T = NJ\mu \left\{ \frac{2J+1}{2J} \operatorname{cth} \left(\frac{2J+1}{2} \beta\mu B \right) - \frac{1}{2J} \operatorname{cth} \left(\frac{\beta\mu B}{2} \right) \right\}.$$

c) Ha $\mu B \ll kT$, akkor a mágnesezettség kifejezése egyszerűsödik

$$M \approx \frac{N\mu^2}{3kT} J(J+1)B,$$

amiből leolvasható a szuszceptibilitás:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{3kT} J(J+1).$$

d) A $J \to \infty$, $\mu \to 0$ és $\mu J \to \mu_0$ határátmenet a mágnesezettség kifejezésében végezhető el legkönnyebben, s az eredmény

$$M = N\mu_0 \left(\operatorname{cth} \beta\mu_0 B - \frac{1}{\beta\mu_0 B} \right),$$

azonos a klasszikus spinekre vonatkozó eredménnyel (lásd a 11.22. feladatot).

11.25. Egy részecske állapotösszege

$$Z_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(p^2/2m)}\, dp \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta \frac{m}{2} \omega^2 x^2 - \beta\alpha x^4 \right) dx.$$

Mivel feltevésünk szerint α kicsi, Z_1 jó közelítéssel így írható:

$$Z_1 = \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(m/2)\omega^2 x^2}(1-\beta\alpha x^4)\,dx =$$

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

N darab anharmonikus oszcillátorból álló rendszer állapot összege $Z=Z_1^N$, átlagenergiája pedig

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = -N\frac{\partial \ln Z_1}{\partial\beta} = Nk\left(1-\frac{3\alpha kT}{m^2\omega^4}\right)T.$$

A hőkapacitás:

$$C_v = Nk\left(1-\frac{6\alpha kT}{m^2\omega^4}\right).$$

Az eredményből leolvasható, hogy a közelítés addig jogos, amíg

$$\alpha \ll \frac{m^2\omega^4}{kT}.$$

11.26. a) Egy ω frekvenciájú oszcillátor állapotösszege:

$$Z = \frac{1}{2\,\mathrm{sh}\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)}.$$

Mivel független oszcillátorokról van szó:

$$E(T) = -\int_0^{\infty} d\omega g(\omega)\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_\omega =$$

$$= \int_0^{\infty} d\omega g(\omega)\frac{\hbar\omega}{2}\,\mathrm{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right),$$

$$C(T) = k\int_0^{\infty} d\omega g(\omega)\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)^2 \mathrm{sh}^{-2}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right).$$

b) Ha $g(\omega)$ nagy ω-ra elég gyorsan csökkenő függvény (reális kristályokban mindig van egy maximális ω_0 frekvencia, amely felett $g(\omega)=0$), akkor a $T\to\infty$ határeset könnyen kiszámolható:

$$E(T) \approx \int_0^{\omega_0} d\omega g(\omega) kT \approx NkT.$$

A $T\to 0$ határesetben (felhasználva, hogy $\mathrm{cth}\frac{x}{2} = 1+\frac{2}{e^x-1}$):

$$E(T) \approx \int_0^{\infty} d\omega g(\omega)\frac{\hbar\omega}{2} + \int_0^{kT/\hbar} d\omega g(\omega)\hbar\omega.$$

A feltétel szerint $\omega\to 0$ esetén $g(\omega)\sim\omega^\gamma$, és ekkor

$$E(T) \approx E(T=0) + AT^{\gamma+2}.$$

Pl. egy háromdimenziós kristályban $g(\omega)\sim\omega^2$, s így

$$E(T)-E(0) \sim T^4.$$

c) A $T\to\infty$ határesetben

$$\int_0^T C(T)\,dT = E(T)-E(T=0) \approx$$

$$\approx NkT - E(T=0) = C(\infty)T - E(T=0) =$$

$$= \int_0^T C(\infty)\,dT - E(T=0),$$

azaz

$$\lim_{T\to\infty}\int_0^T [C(\infty)-C(T)]\,dT = E(T=0).$$

11.27. Az átlagenergia az állapotösszegből számolható ki:

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z,$$

és harmonikus oszcillátorra

$$Z = \frac{1}{1-e^{-\beta\varepsilon_0}}.$$

Az $\varepsilon_0 \to 0$ határesetben $Z \to (\varepsilon_0\beta)^{-1}$, és ebből

$$\bar{\varepsilon} = kT.$$

Ezt az eredményt kapjuk az ekvipartíciótétel alapján is.

Ha az energiaspektrum $\varepsilon_n = \varepsilon_0 n^\alpha$ és a multiplicitás $g_n = g_0 n^\gamma$, akkor

$$Z = \sum_{n=0} g_0 n^\gamma \exp\{-\beta\varepsilon_0 n^\alpha\}.$$

Az $\varepsilon_0 \to 0$ esetben a fenti összeg $(\beta\varepsilon_0)^{-1}$ valamilyen hatványa szerint divergál. Ezt a hatványviselkedést úgy is megkaphatjuk, hogy az összeget integrállal helyettesítjük:

$$Z \approx \int_0^\infty x^\gamma \exp(-\beta\varepsilon_0 x)\, dx =$$

$$= \frac{1}{1+\gamma}(\beta\varepsilon_0)^{-(\gamma+1)/\alpha} \int_0^\infty \exp(-y^{\alpha/(1+\gamma)})\, dy.$$

Így

$$\ln Z = -\frac{1+\gamma}{\alpha}\ln(\beta\varepsilon_0)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1+\gamma}{\alpha}kT.$$

Milyen egydimenziós klasszikus rendszernek felel ez meg? Ha a potenciális energia az x homogén függvénye, $V(x) \sim |x|^s$, akkor a viriáltétel szerint a kinetikus és potenciális energia között a következő összefüggés áll fenn (lásd Landau–Lifsic: Mechanika 10. §)

$$2\bar{T} = s\bar{V},$$

és így

$$\bar{E} = \bar{T} + \bar{V} = \frac{s+2}{s}\bar{T}.$$

Felhasználva azt, hogy a kinetikus energiára $kT/2$ energia jut,

$$\bar{\varepsilon} = \frac{s+2}{2s}kT.$$

Mivel egydimenziós feladatnál a spektrum nem degenerált, ezért $\gamma = 0$, és így a két eredmény összehasonlításából azt kapjuk, hogy a $V(x) = A|x|^s$ potenciálban az energiaspektrum $\varepsilon_n = \varepsilon_0 n^\alpha$ alakú, ahol $\alpha = 2s/(s+2)$.

11.28. Az $m_1, \ldots, m_N$ darabokra való széttörés eloszlásfüggvénye:

$$P(m_1, \ldots, m_N) = \Theta(m_1)\ldots\Theta(m_N)\delta\left(M - \sum_{i=1}^N m_i\right),$$

ami nem más, mint a mikrokanonikus sokaság eloszlásfüggvénye, ha M-et a rendszer teljes energiájával, m_i-t pedig az egyes részecskék energiájával azonosítjuk.

A gyémánt várható értéke:

$$Q = N\frac{\int_{-\infty}^{\infty} m_1^2 P(m_1, \ldots, m_N)\, dm_1\ldots dm_N}{\int_{-\infty}^{\infty} P(m_1, \ldots, m_N)\, dm_1\ldots dm_N}.$$

Először az m_N szerinti integrálást végezzük el:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Theta(m_N)\delta\left(M - \sum_{i=1}^N m_i\right) dm_N = \Theta\left(M - \sum_{i=1}^{N-1} m_i\right).$$

Így az m_{N-1} szerinti integrál a következő lesz:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Theta(m_{N-1})\Theta\left(M-\sum_{i=1}^{N-1} m_i\right) dm_{N-1} =$$

$$=\left(M-\sum_{i=1}^{N-2} m_i\right)\Theta\left(M-\sum_{i=1}^{N-2} m_i\right).$$

Folytatva az integrálást, könnyű belátni, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(m_1, \ldots, m_N)\, dm_1 \ldots dm_N = \frac{M^{N-1}}{(N-1)!},$$

és

$$\int_{-\infty}^{\infty} m_1^2 P(m_1, \ldots, m_N)\, dm_1 \ldots dm_N = \frac{2M^{N+1}}{(N+1)!},$$

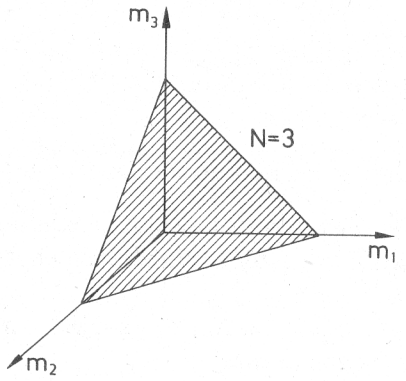
tehát

$$Q = \frac{2M^2}{N+1}.$$

11.29. Mikrokanonikus eloszlás esetén a $\sum_i^N m_i = M$, $m_i > 0$ feltételek által meghatározott síkon kell átlagolni. A kanonikus eloszlásra való áttérés azt jelenti, hogy feladjuk a „tömegmegmaradást", és a teljes $m_i > 0$ térrészre átlagolunk, de egy olyan eloszlással, amelynek $\tilde{M}\left(=\sum_i m_i\right)$ függvényében a fent leírt síkon van éles maximuma (vagyis M átlagos tömegű gyémántokat vizsgálunk). Az eloszlásfüggvényt az ideális gáz mintájára választjuk (ott a $\sum_i p_i^2/2m = E$ volt az a feltétel, amit feladtunk):

$$\exp\left[-\beta(m_1+\ldots+m_N)\right] dm_1 \ldots dm_N,$$

ahol az exponenciális tényező a levágó faktor, a fázistérfogat pedig $\tilde{M}$ gyorsan növekvő függvénye (nagy N esetén $dm_1 \ldots dm_N = d\Omega \sim \tilde{M}^{N-1}\, d\tilde{M}$). Az exponenciális tényezőben



szereplő β paramétert úgy választjuk meg, hogy a két tényező szorzatának a maximuma egybeessen az $M = \sum_i m_i$-vel meghatározott hipersíkkal. Ezt úgy érhetjük el, hogy β-t a

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} m_i \right\rangle = M$$

feltételből határozzuk meg. Az $\langle m_i \rangle$ átlag integrálással meghatározható:

$$\langle m_i \rangle = \frac{\int_0^\infty dm_1 \ldots \int_0^\infty dm_N m_i e^{-\beta(m_1+\ldots+m_N)}}{\int_0^\infty dm_1 \ldots \int_0^\infty dm_N e^{-\beta(m_1+\ldots+m_N)}} =$$

$$= \frac{\int_0^\infty dm_i m_i e^{-\beta m_i}}{\int_0^\infty dm_i e^{-\beta m_i}} = \frac{1}{\beta},$$

tehát

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} m_i \right\rangle = \frac{N}{\beta} = M,$$

s ekkor

$$Q = \left\langle \sum_{i=1}^{N} m_i^2 \right\rangle = \frac{2M^2}{N}.$$

Látszik, hogy ez az eredmény csak $O\left(\frac{1}{N^2}\right)$-ben különbözik a mikrokanonikus eloszlásból kapott eredménytől, tehát nagy N esetén a két módszer azonos eredményre vezet.

11.30. *I. megoldás:*

Legyen N_+ a jobbra, N_- pedig a balra mutató elemek száma. Ekkor a lánc hossza

$$x = a(N_+ - N_-)$$

és

$$N = N_+ + N_-.$$

Az állapotszám:

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

a megfelelő entrópia pedig

$$S(x) = k \ln \Omega(x) = -k\left\{N_+ \ln \frac{N_+}{N} + N_- \ln \frac{N_-}{N}\right\}.$$

Mivel az elemek szabadon elfordulhatnak, a belső energia nem függ x-től, ezért az erő a $p/T = (\partial S/\partial V)_E$ összefüggés analógiájára:

$$F_x = -T\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{kT}{2a} \ln \frac{N_+}{N_-} = \frac{kT}{2a} \ln \frac{1 + \frac{x}{Na}}{1 - \frac{x}{Na}}.$$

Amennyiben $x \ll Na$

$$F_x \approx \frac{kT}{Na^2} x,$$

tehát az erő arányos a kitéréssel.

II. megoldás:

Használjunk olyan sokaságot, melynek elemei F_x erőhatás alatt álló láncok T hőmérsékletű környezetben (a T–p sokaság analogonja). Az x_i hosszúságú állapot bekövetkezése $\exp(-\beta F_x x_i)$-vel arányos. Az állapotösszeg:

$$Y = \sum_i e^{-\beta F_x x_i} = \sum_{N_+=0}^{N} \binom{N}{N_+} \exp[-\beta F_x a(2N_+ - N)] =$$

$$= e^{\beta F_x a N} \sum_{N_+=0}^{N} \binom{N}{N_+} e^{-\beta F_x a 2N_+} =$$

$$= (e^{\beta F_x a} + e^{-\beta F_x a})^N.$$

Ebből

$$\bar{x} = -\frac{1}{F_x}\frac{\partial}{\partial \beta} Y = -Na \operatorname{th}(\beta F_x a),$$

ami megegyezik az előző eredménnyel.

11.31. Az egységek függetlenek, ezért elegendő közülük egyet vizsgálni. Használjunk T–F_x sokaságot! Annak a valószínűsége, hogy egy egység x irányában x_1 hosszúságú legyen, $e^{\beta F_x x_1}$-gyel arányos. $x_1 = a\cos\vartheta$, ahol ϑ a húzóerő és az elemi egység közötti szög. Annak a valószínűsége tehát, hogy az egység a ϑ körüli $d\vartheta\, d\varphi$ tartományba mutat,

$$e^{\beta F_x a \cos\vartheta} \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi / Y,$$

ahol

$$Y = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} e^{\beta F_x a \cos\vartheta} \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi.$$

A lánc két végpontja közötti átlagos távolság

$$\bar{x} = N\bar{x}_1 = Na \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \cos\vartheta e^{\beta F_x a \cos\vartheta} \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi / Y =$$

$$= NaL\left(\frac{aF_x}{kT}\right),$$

ahol $L(x)$ a Langevin-függvény (l. a 11.22. feladatot). Lineáris közelítésben

$$\bar{x} = \frac{Na^2}{kT} F_x,$$

vagyis érvényes a Hooke-törvény. $F_x = 0$ esetén $\bar{x} = 0$, ugyanis a lánc végének elmozdulása minden irányban egyformán valószínű.

11.32. *I. megoldás:*

A probléma analóg a háromdimenziós bolyongással, tehát

$$\overline{l^2} = Na^2,$$

ami lineárisan függ az elemek számától.

II. megoldás:

Az előző megoldásban használt módszert követve, adott x irányú vetületre:

$$\overline{x^2} = \frac{Na^2 \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2 \vartheta \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi}{\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi} = \frac{1}{3} Na^2.$$

Az átlagos négyzetes végtávolság:

$$\overline{l^2} = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2} = 3\overline{x^2} = Na^2.$$

11.33. A hosszúság x irányú vetülete egy adott konfigurációban

$$l_x = \sum_{i=1}^{N} a \cos \vartheta_i,$$

ahol ϑ_i az i-edik monomer iránya és az x tengely által bezárt szög. A négyzetes átlag:

$$\overline{l_x^2} = \overline{\left(\sum_{i=1}^{N} a \cos \vartheta_i \right)^2} = a^2 \sum_{i=1}^{N} \overline{\cos^2 \vartheta_i} + a^2 \sum_{i \neq j} \overline{\cos \vartheta_i \cos \vartheta_j}.$$

A szomszédos egységek egymástól függetlenek, tehát $\overline{\cos \vartheta_i \cos \vartheta_j} = \overline{\cos \vartheta_i}\,\overline{\cos \vartheta_j}$. Mivel azonos egységekről van szó, az átlag nem függ az i indextől, tehát

$$\overline{l_x^2} = Na^2 \overline{\cos^2 \vartheta_1} + 2\binom{N}{2} a^2 \overline{\cos \vartheta_{1\,2}}.$$

$\overline{\cos^2 \vartheta_1}$-ot meghatározva, valamint a 11.31. feladat eredményét felhasználva azt kapjuk, hogy

$$\overline{l_x^2} = Na^2 \left[1 - \frac{2}{\beta F_x a} L(\beta F_x a) - L^2(\beta F_x a) \right] + N^2 a^2 L^2(\beta F_x a),$$

ahol L a Langevin-függvény. Mivel kis argumentumértékekre $L(z) = \frac{1}{3} z$, azt látjuk, hogy $F_x \to 0$ esetén $\overline{l_x^2} \to \frac{1}{3} Na^2$. Másrészt viszont, ha $z \to \infty$, akkor $L(z)$ az 1-hez tart, ezért, ha $F_x \to \infty$, akkor $\overline{l_x^2} \to N^2 a^2$, ami a teljes megfeszítésnek felel meg. A molekula két végpontja nincs rögzítve, ezért x-re merőleges fluktuációk is előfordulnak. Az x-re merőleges vetület:

$$l_\perp = \sum_{i=1}^{N} a \sin \vartheta_i,$$

ennek átlaga

$$\overline{l_\perp^2} = \sum_{i=1}^{N} \overline{a^2 \sin^2 \vartheta_i} = Na^2 \overline{\sin^2 \vartheta_1} =$$

$$= Na^2 (1 - \overline{\cos^2 \vartheta_1}) = \frac{Na^2}{\beta F_x} L(\beta F_x a),$$

mivel $\sin \vartheta_i$ átlaga zérus. A teljes négyzetes végtávolság tehát

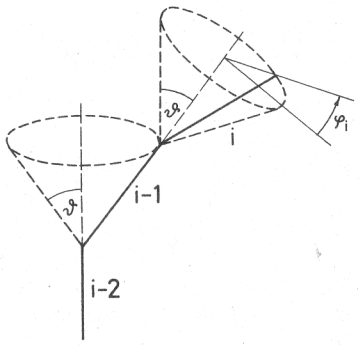
$$\overline{l^2} = \overline{l_x^2} + \overline{l_\perp^2} = Na^2 (1 - L^2(\beta F_x a)) + N^2 a^2 L^2(\beta F_x a),$$

ami Na^2 és $N^2 a^2$ között változhat.

11.34. Jellemezzük az i-edik egységet $\mathbf{a}_i$ vektorral, mely az egység irányába mutat, és hossza a. Ekkor

$$\overline{l^2} = Na^2 + 2\sum_{i=j} \overline{\mathbf{a}_i\mathbf{a}_j}.$$

Természetesen $\mathbf{a}_i\mathbf{a}_{i+1} = a^2\cos\vartheta$. Az $\overline{\mathbf{a}_i\mathbf{a}_{i+2}}$ meghatározásakor vegyük figyelembe, hogy minden φ érték egyformán valószínű.



ezért az $(i+2)$-edik elem $(i+1)$-edikre merőleges vetületének átlaga zérus, a párhuzamos vetülete viszont $a\cos\vartheta$. Ennek az i-edikre vett vetülete pedig $a\cos^2\vartheta$. Így

$$\overline{\mathbf{a}_i\mathbf{a}_{i+2}} = a^2\cos^2\vartheta,$$

és általában

$$\overline{\mathbf{a}_i\mathbf{a}_{i+k}} = a^2\cos^k\vartheta.$$

Ezért

$$\overline{l^2} = Na^2 + 2a^2 \sum_{1\le i<j\le N} x^{j-i},$$

ahol $x = \cos\vartheta$. Vezessük be az $l = j-i$ összegző indexet. Mivel x^l a fenti összegben $(N-l)$-szer fordul elő, írhatjuk, hogy

$$\overline{l^2} = Na^2 + 2a^2 \sum_{l=1}^{N-1} (N-l)x^l.$$

Ezt kiértékelve, az N-ben vezető rendű járulék

$$\overline{l^2} = Na^2\frac{1+\cos\vartheta}{1-\cos\vartheta},$$

ami ugyanakkora, mint az $a(1+\cos\vartheta)/(1-\cos\vartheta)$ hosszúságú elemekből álló szabadon forgó lánc átlagos négyzetes végtávolsága.

Megjegyezzük, hogy ez a feladat analóg a 11.6. példában tárgyalt „tehetetlenségi" bolyongással.

11.35. Klasszikus esetben

$$\frac{1}{2}\frac{\overline{p^2}}{m} = \frac{1}{2}kT \quad \text{és} \quad \frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2} = \frac{1}{2}kT,$$

tehát

$$\overline{p^2} = mkT \quad \text{és} \quad \overline{x^2} = \frac{kT}{m\omega^2}.$$

A kvantumos tárgyaláshoz x-et és p-t kifejezzük keltő (a^+) és eltüntető (a) operátorok segítségével.

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(a+a^+),$$

$$p = i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a-a^+).$$

Kihasználva, hogy

$$[a, a^+] = 1, \quad \langle aa\rangle = \langle a^+a^+\rangle = 0,$$

és

$$\overline{\langle a^+a\rangle} = n = (e^{\beta\hbar\omega}-1)^{-1},$$

így

$$\overline{\langle\hat{x}^2\rangle} = \frac{\hbar}{2\omega m}(1+2\langle a^+a\rangle) = \frac{\hbar}{2\omega m}\operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right),$$

és

$$\overline{\langle \hat{p}^2 \rangle} = \frac{\hbar\omega m}{2}(1+2\langle a^+ a\rangle) = \frac{\hbar\omega m}{2}\operatorname{cth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right).$$

Látható, hogy magas hőmérsékleten ($\hbar\omega \ll kT$) a kvantumos és klasszikus tárgyalás eredménye megegyezik.

Az eredmény összhangban van a határozatlansági relációval is, hiszen

$$\sqrt{\overline{\langle \hat{x}^2 \rangle \langle \hat{p}^2 \rangle}} = \frac{\hbar}{2}\operatorname{cth}(\beta\hbar\omega) \geqq \frac{\hbar}{2}.$$

Az egyenlőség csak a $T=0$ hőmérsékleten teljesül.

11.36. A polarizáltságot jellemezhetjük az $\mathbf{e} = \mathbf{E}/|\mathbf{E}|$ vektorral, ahol E az elektromos térerősség. Legyenek $\mathbf{e}_1$ és $\mathbf{e}_2$ a terjedés irányára és egymásra is merőleges egységvektorok. $\mathbf{e}$ mindig felírható a következő alakban

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 \cos\alpha + \mathbf{e}_2 \sin\alpha\, e^{i\beta} = \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}.$$

Nyilvánvaló, hogy ha $\alpha=0$ és $\beta=0$, vagy ha $\alpha = \frac{\pi}{2}$ és $\beta=0$, akkor a fény az $\mathbf{e}_1$, ill. az $\mathbf{e}_2$ irányban lineárisan polarizált, míg ha $\alpha = \pi/2$ és $\beta = \pi/2$, akkor körpolarizált fényről van szó. Általában, az $\mathbf{e}$-vel megadott állapotban teljes információnk van a rendszer polarizációjáról, azaz $\mathbf{e} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ tiszta állapotot ír le.

Így a sűrűségmátrixot ($\varrho_{ij} = C_i C_j^*$) azonnal felírhatjuk:

$$\hat{\varrho} = \begin{pmatrix} \cos^2\alpha & e^{-i\beta}\sin\alpha\cos\alpha \\ e^{i\beta}\sin\alpha\cos\alpha & \sin^2\alpha \end{pmatrix}.$$

Látható, hogy $\hat{\varrho}^+ = \hat{\varrho}$, $\operatorname{Sp}\hat{\varrho} = 1$ és teljesül a tiszta állapotokat leíró sűrűségmátrixokat jellemző $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$ összefüggés is.

Mivel tetszőleges 2×2-es hermitikus mátrixot, amelynek a nyoma 1, felírhatunk a Pauli-mátrixok

$$\left[\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right]$$

és az egységmátrix (I) lineáris kombinációjaként, kevert állapotban a polarizációt leíró sűrűségmátrix a következő alakú:

$$\frac{1}{2}(I + P_1\sigma_1 + P_2\sigma_2 + P_3\sigma_3) = \frac{1}{2}(I + \mathbf{P}\boldsymbol{\sigma}),$$

ahol a P_i-k valós paraméterek. E paraméterek jelentéséről némi képet kapunk, ha megadjuk értéküket különböző, tiszta állapotokban:

1) $P_1=1,\ P_2=P_3=0$: $\alpha = \frac{\pi}{4},\ \beta=0,$

lineárisan polarizált fény;

2) $P_1=0,\ P_2=1,\ P_3=0$: $\alpha = \frac{\pi}{4},\ \beta = \frac{\pi}{2},$

körpolarizáció;

3) $P_1=P_2=0,\ P_3=1$: $\alpha=0,\ \beta=0,$

$\mathbf{e}_1$ irányában lineárisan polarizált fény.

11.37. Egy 1/2 spinű részecskét leíró hullámfüggvény kétkomponensű, tehát a spint leíró $\hat{\varrho}$ sűrűségmátrix egy 2×2-es hermitikus mátrix, amelynek nyoma 1. Egy ilyen mátrix mindig felírható a 11.36. példában megadott alakban:

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{2}(I + P_1\sigma_1 + P_2\sigma_2 + P_3\sigma_3) = \frac{1}{2}(I + \mathbf{P}\boldsymbol{\sigma}),$$

és P_i nem más, mint a spin i-edik komponensének az átlagértéke:

$$\langle\sigma_i\rangle = \operatorname{Sp}\hat{\varrho}\sigma_i = \frac{1}{2}\operatorname{Sp}\sigma_i + \frac{P_i}{2}\operatorname{Sp}\sigma_i^2 +$$

$$+ \sum_{j\neq i}\frac{P_j}{2}\operatorname{Sp}(\sigma_i\sigma_j) = P_i.$$

Tiszta állapotban $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$. Mivel

$$\hat{\varrho}^2 = \frac{1+\mathbf{P}^2}{4} I + \frac{1}{2}\mathbf{P}\boldsymbol{\sigma},$$

így tiszta állapotban a $\mathbf{P}^2 = 1$ feltételnek kell teljesülnie.

11.38. A rendszer Hamilton-operátora:

$$\hat{\mathscr{H}} = -\mu B \sigma_3,$$

ahol μ a részecske mágneses momentuma, B a z irányba mutató mágneses tér nagysága, σ_3 pedig a $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ Pauli-mátrix.

A megfelelő sűrűségmátrix:

$$\hat{\varrho} = \frac{e^{-\beta\mathscr{H}}}{\operatorname{Sp} e^{-\beta\mathscr{H}}} = \frac{e^{\beta\mu B\sigma_3}}{2\operatorname{ch}(\beta\mu B)} =$$

$$= \frac{1}{2\operatorname{ch}(\beta\mu B)} [I \operatorname{ch}(\beta\mu B) + \sigma_3 \operatorname{sh}(\beta\mu B)] =$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\operatorname{th}(\beta\mu B) & 0 \\ 0 & 1-\operatorname{th}(\beta\mu B) \end{pmatrix},$$

tehát a mágnesezettség:

$$M = \mu\langle\sigma_3\rangle = \mu \operatorname{Sp}(\hat{\varrho}\sigma_3) = \mu \operatorname{th}(\beta\mu B).$$

11.39. A rendszer Hamilton-operátora

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_0 - \hat{M}_z B,$$

ahol $\hat{\mathscr{H}}_0$ a mágneses tér nélküli atom Hamilton-operátora, amelynek két sajátfüggvénye $|+\rangle$ és $|-\rangle$, és $-\hat{M}_z B$ a mágneses térrel való kölcsönhatás operátora. A $|+\rangle$, $|-\rangle$ bázisban $\hat{\mathscr{H}}$ a következőképpen írható:

$$\hat{\mathscr{H}} = \frac{\Delta}{2}\sigma_3 - Bm\sigma_1,$$

így a rendszer sűrűségmátrixa:

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{2}\left\{ I - \frac{\operatorname{th}\beta\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2}}{\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2}} \left(\frac{\Delta}{2}\sigma_3 - Bm\sigma_1\right) \right\}.$$

$\hat{\varrho}$ kiszámításához felhasználtuk, hogy

$$(a\sigma_3 + b\sigma_1)^2 = a^2 + b^2 + ab(\sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_3) = a^2 + b^2,$$

tehát

$$(a\sigma_3 + b\sigma_1)^n =$$

$$= \begin{cases} (a^2+b^2)^{n/2}, & \text{ha} \quad n = 2k, \\ (a^2+b^2)^{(n-1)/2}(a\sigma_3 + b\sigma_1), & \text{ha} \quad n = 2k+1, \end{cases}$$

s így

$$\hat{\varrho} = \frac{1}{Z}\exp\left(-\beta\frac{\Delta}{2}\sigma_3 + \beta Bm\sigma_1\right) =$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{\beta\Delta}{2}\sigma_3 + \beta Bm\sigma_1\right)^n =$$

$$= \frac{1}{Z}\left\{\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\beta^{2k}}{(2k)!}\left[\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2\right]^{1/2\cdot 2k} + \right.$$

$$\left. + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\beta^{2k}}{(2k+1)!}\left[\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2\right]^{1/2\cdot 2k}\left(-\frac{\beta\Delta}{2}\sigma_3 + \beta Bm\sigma_1\right)\right\} =$$

$$= \frac{1}{Z}\left\{\operatorname{ch}\beta\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{\operatorname{sh}\beta\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2}}{\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2}}\left(-\frac{\beta\Delta}{2}\sigma_3 + Bm\sigma_1\right)\right\}.$$

Mivel $\mathrm{Sp}\,\hat{\varrho} = 1$, $Z = \mathrm{ch}\,\beta\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2}$. A mágnesezettség N független spin esetén:

$$\langle M_z \rangle = Nm\,\mathrm{Sp}\,\hat{\varrho}\sigma_1 =$$

$$= NBm^2\,\mathrm{th}\,\beta\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2}\Big/\sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + (Bm)^2},$$

amiből a szuszceptibilitás:

$$\chi = \frac{\partial\overline{\langle \hat{M}_z \rangle}}{\partial B}\Bigg|_{B=0} = Nm^2\,\mathrm{th}\,\beta\frac{\Delta}{2}.$$

A két határesetben:

$$\beta\Delta \ll 1, \quad \chi \approx \frac{Nm^2}{kT},$$

és

$$\beta\Delta \gg 1, \quad \chi \approx \frac{2Nm^2}{\Delta}.$$

11.40. a) A hullámfüggvény

$$\Phi_E(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

ahol a $\mathbf{k}$ hullámszámvektor komponensei

$$k_i = \frac{2\pi}{L_i}n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

A sűrűségmátrix

$$\hat{\varrho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_E \frac{1}{Z}e^{-\beta E}\Phi_E(\mathbf{r})\Phi_E^*(\mathbf{r}') =$$

$$= \frac{1}{VZ}\sum_{\mathbf{k}}\exp\left[-\beta\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right].$$

Mivel a doboz makroszkopikus méretű, áttérhetünk a k szerinti integrálásra:

$$\sum_k \to \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k = \frac{V}{h^3}\int d^3p$$

(l. a 11.8. feladatot). A kitevőben fellépő kvadratikus alakot teljes négyzetté alakítva, majd kiszámítva a Gauss-integrált, azt kapjuk, hogy

$$\hat{\varrho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{Z}\sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}}\exp\left[-\frac{mkT}{2\hbar^2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\right].$$

b) A mátrix nyoma

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\varrho} = \frac{V}{Z}\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = 1,$$

amiből

$$Z = V\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

Tehát

$$\hat{\varrho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V}\exp\left[-\frac{mkT}{2\hbar^2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\right].$$

A diagonális elem, vagyis az $\mathbf{r}$ helyen levés valószínűsége $\hat{\varrho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V^{-1}$, függetlenül a helytől, ahogyan azt várjuk is. Az energia átlaga:

$$\langle \hat{\mathscr{H}} \rangle = \mathrm{Sp}\,(\hat{\varrho}\hat{\mathscr{H}}) =$$

$$= \frac{1}{V}\int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\exp\left(-\frac{mkT}{2\hbar^2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\right)\right]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}d^3\mathbf{r} =$$

$$= \frac{kT}{2V}\int\left[\left(3-\frac{mkT}{\hbar^2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\right)\exp\left[-\frac{mkT}{2\hbar^2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\right]\right]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}d^3\mathbf{r} =$$

$$= \frac{3}{2}kT.$$

c) Impulzus-reprezentációban

$$\hat{\varrho}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \frac{1}{VZ}\sum_{\mathbf{r}} \exp\left[-\beta\frac{p^2}{2m} + i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\mathbf{r}/\hbar\right] =$$

$$= \frac{1}{Z} e^{-\beta(p^2/2m)}\delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}.$$

$\hat{\varrho}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$-nek tehát csak diagonális elemei vannak, ami érthető, hiszen az impulzus felcserélhető az energiával.

12. Klasszikus ideális gázok

12.1. A termodinamikai határátmenetben a fázistér dimenziója végtelenhez tart, s ekkor az E energiájú hiperfelület körüli réteg és a hiperfelület által határolt térfogat közötti különbség elhanyagolható.

Ideális gáz esetében az E energiájú hiperfelület által határolt térfogat:

$$\Omega_0(E, V, N) = \frac{V^N}{h^{3N}N!}\iint\limits_{\sum p_i^2 \leq 2mE}\!\!\cdots\!\int dp_1\ldots dp_{3N} =$$

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

s ugyanakkor az E és $E+\Delta E$ közötti állapotok száma

$$\Omega(E, V, N) = \frac{\partial\Omega}{\partial E}\Delta E = \frac{3N}{2}\frac{\Delta E}{E}\Omega_0(E).$$

Tehát

$$\ln\Omega(E, V, N) = \ln\Omega_0(E, V, N) + O(1).$$

12.2. Mikrokanonikus sokaság esetén:

$$\Omega_0(E, V, N) = \frac{1}{N!}\frac{1}{h^{3N}}\int\limits_{\sum p_i^2 \leq 2mE} d^{3N}q\, d^{3N}p =$$

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

az entrópia:

$$S(E, V, N) = k\ln\Omega_0 = Nk\left\{\ln\frac{V}{N} + \frac{3}{2}\ln\frac{E}{N} + \right.$$

$$\left. + \ln\left[e^{5/2}\left(\frac{4\pi m}{3h^2}\right)^{3/2}\right]\right\}.$$

Kanonikus sokaság esetén:

$$Z = \frac{1}{N!}Z_1^N = \frac{1}{N!}\frac{1}{h^{3N}}\int d^{3N}q d^{3N}p \exp\left(-\beta\sum_i\frac{p_i^2}{2m}\right) =$$

$$= \int_0^\infty e^{-\beta E}\frac{\partial\Omega_0}{\partial E}dE = \frac{V^N}{h^{3N}N!}(2\pi mkT)^{3N/2};$$

a szabadenergia:

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

$$= -NkT\left\{\ln\frac{V}{N} + \frac{3}{2}\ln kT + \ln\left[e\left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{3/2}\right]\right\}.$$

Nagykanonikus sokaság esetén:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty}\frac{e^{\beta\mu N}}{N!}Z_1^N = \exp\{Z_1 e^{\beta\mu}\};$$

ekkor a termodinamikai potenciál:

$$\Phi(T, \mu, V) = -pV = -kT \ln Z = $$

$$= -kTV\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} e^{\mu/kT}.$$

T–p sokaság esetén:

$$Z = \int_0^\infty dV \int d^{3N}\tilde{p}\, d^{3N}q \frac{1}{N!} \frac{1}{h^{3N}} \exp\left[-\beta\left(\sum \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} + pV\right)\right] =$$

$$= \left(\frac{kT}{p}\right)^{N+1} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3N/2};$$

a Gibbs-potenciál:

$$G(T, p, N) = -kT \ln Z =$$

$$= -NkT \ln \frac{kT}{p} - \frac{3NkT}{2} \ln\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right).$$

12.3. Felhasználva a 12.2. feladatban kiszámolt termodinamikai potenciálokat:

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = -kT \ln\left[\frac{V}{N}\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}\right] =$$

$$= -kT \ln\left[\frac{m}{\varrho}\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}\right],$$

és

$$\mu = \frac{G}{N} = -kT \ln\left[\frac{kT}{p}\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}\right].$$

12.4. Az előző feladat eredménye alapján a kémiai potenciál pozitív a $(0, T_0)$ intervallumban, ahol

$$T_0 = \left[\frac{h^3 p}{k^{5/2}(2\pi m)^{3/2}}\right]^{2/5}.$$

A He tömegével számolva, T_0-ra 1 K nagyságrendű érték adódik, s mivel T_0 a tömeg $(-3/5)$-ödik hatványával arányos, nagyobb tömegű nemesgázok esetén T_0 még kisebb. Ilyen kis hőmérsékleten a klasszikus közelítés már egyáltalán nem alkalmazható.

12.5. a) $$\overline{|v|^n} = 4\pi\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int_0^\infty e^{-mv^2/2kT} v^{n+2}\, dv =$$

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

$$\overline{|v|^{2r+1}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2kT}{m}\right)^{r+1/2} (r+1)!, \qquad r = 0, 1, 2, \ldots,$$

$$\overline{|v|^{2r}} = \overline{v^{2r}} = \left(\frac{kT}{m}\right)^r (2r+1)!!.$$

b) $$(\Delta|v|)^2 = \overline{|v|^2} - \overline{|v|}^2 = \frac{kT}{m}\left(3 - \frac{8}{\pi}\right).$$

c) $$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2} m\overline{v^2} = \frac{3}{2} kT,$$

$$\overline{\varepsilon^2} = \frac{1}{4} m^2 \overline{v^4} = \frac{3 \cdot 5}{4} (kT)^2,$$

$$\overline{(\Delta\varepsilon)^2} = \frac{3}{2} (kT)^2.$$

12.6. Az átlagos sebesség, a sebesség szórása és a mozgási energia a 12.5. feladat megoldásából következik, a legvalószínűbb sebességet pedig az $f(v) = Av^2 e^{-mv^2/2kT}$ eloszlássűrűség maximumhelyének meghatározásából kapjuk.

	800 K	1000 K
$\overline{\lvert v \rvert}$	$7{,}7 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	$8{,}7 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
$\sqrt{\overline{\Delta v^2}}$	$3{,}2 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	$3{,}7 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
ε_{kin}	$1{,}7 \cdot 10^{-20}$ J	$2{,}1 \cdot 10^{-20}$ J
$v_{\text{legval.}}$	$6{,}8 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	$7{,}7 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$

12.7. A kinetikus energia eloszlásfüggvényét a Maxwell-eloszlásból származtatjuk:

$$W(p)d^2p = \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} \exp\left[-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2mkT}\right] dp_x\, dp_y\, dp_z =$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-p^2/2mkT} p^2\, dp = \frac{1}{\sqrt{\pi}(kT)^3} e^{-\varepsilon/kT} \sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon =$$

$$= \tilde{W}(\varepsilon)\, d\varepsilon.$$

Egy atom – tehát nem makroszkopikus rendszer energia-eloszlásáról van szó, ezért lapos az $\tilde{W}(e)$ eloszlásfüggvény, s ezért mérhető össze az energia fluktuációja az energia átlagértékével. A 12.5. feladat c) részének eredményei $\tilde{W}(\varepsilon)$ ismeretében közvetlenül is megkaphatók.

12.8. Az E és $E+dE$ energiaértékek közé eső energiájú állapotok száma $\frac{d\Omega_0}{dE} dE$, ezért a valószínűségeloszlás

$$P(E)\, dE = \frac{1}{Z} \frac{d\Omega_0}{dE} e^{-\beta E}\, dE.$$

A 12.1. feladat eredményeit felhasználva,

$$P(E) = \frac{E^{(3N/2)-1} e^{-\beta E}}{(kT)^{(3/2)N} \Gamma\left(\frac{3N}{2}\right)}.$$

$P(E)$ maximuma az

$$\tilde{E} = \left(\frac{3N}{2} - 1\right) kT$$

értéknél van, ami az $N \gg 1$ esetben jó közelítéssel megegyezik az $\bar{E} = \frac{3}{2} NkT$ átlagértékkel.

12.9. Minden egyensúlyi állapotban fenn kell állnia a $pA = Mg$ összefüggésnek, ahol A a dugattyú felülete. Az állapotváltozás tehát állandó nyomáson történik. A T–p sokaságot használva, az állapotösszeg:

$$Y = \int \exp\left[-\frac{\sum_{i=1}^{3N} \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} + \frac{P^2}{2M} + pV}{kT}\right] \frac{d\tilde{\Gamma}}{N!h^{3N}} \frac{dP}{h} dV.$$

Itt P a dugattyú impulzusa, melyre $(-\infty)$-től $(+\infty)$-ig integrálunk. Az integrálásokat elvégezve:

$$Y = \frac{\sqrt{2m\pi}^{3N+1} \sqrt{M/m}}{h^{3N+1} p^{N+1}} (kT)^{(5N+3)/2}.$$

A Gibbs-potenciál meghatározása után az állapotegyenlet

$$V = \frac{(N+1)kT}{p},$$

ahol $p = Mg/A$. Mivel N mellett az 1 elhanyagolható, ez azt jelenti, hogy ilyenkor a gáz állapotegyenlete ugyanaz, mintha nem lenne tömege a dugattyúnak, és a nyomás Mg/A lenne.

12.10. Az adszorbeált rendszer állapotösszege:

$$Z = \sum_{N=0}^{B} \binom{B}{N} e^{(u_0+\mu)/kT} = (1+e^{(u_0+\mu)/kT})^B,$$

ahonnan az adszorbeált atomok száma:

$$N = kT \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \frac{B}{1+e^{-(u_0+\mu)/kT}}.$$

Mivel egyensúlyban az adszorbeált rendszer és a fölötte levő gáz kémiai potenciálja egyenlő, μ-t az ideális gázra kapott összefüggésből fejezhetjük ki (lásd a 12.3. feladatot), s így

$$\frac{\bar{N}}{B} = \frac{1}{1+\dfrac{kT}{P}\left(\dfrac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} e^{-u_0/kT}}.$$

12.11. A Z állapotösszeg egy molekula Z_1 állapotösszegéből kiszámítható:

$$Z = \frac{1}{N!} Z_1^N,$$

ahol

$$Z_1 = \sum_k e^{-\beta\varepsilon_k} \frac{1}{(2\pi h^2)^{3/2}} \int dV \int d\mathbf{p} e^{-\beta p^2/2m} =$$

$$= v\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} \sum_k e^{-\beta\varepsilon_k}.$$

Mivel a belső szabadsági fokokból adódó járulék csak a hőmérséklettől függ, a szabadenergiát a következőképpen írhatjuk:

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln \frac{V}{N} + Nf(T),$$

amiből az állapotegyenlet

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{NkT}{V}.$$

12.12. Mivel $\Delta E/kT \approx 38$, a magasabb gerjesztett állapotok elhanyagolhatók, s így

$$\frac{N_{E_1}}{N_{E_0}} = \frac{3e^{-\Delta E/kT}}{1+\ldots} \approx 10^{-16}.$$

12.13. Jelölje Z_0 a gerjeszthetőség elhanyagolásával kapott állapotösszeget. Az első gerjesztett állapot figyelembevétele a következőképpen változtatja meg Z_0-t:

$$Z = Z_0(1+g_1 e^{-\beta\varepsilon_1})^N,$$

amiből a szabadenergia:

$$F = F_0 - N\beta^{-1} \ln(1+g_1 e^{-\beta\varepsilon_1}).$$

A szabadenergiából C_v és μ meghatározható:

$$C_v = -T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_v = C_v^0 + Nkg_1\left(\frac{\varepsilon_1}{kT}\right)^2 \frac{e^{\varepsilon_1/kT}}{(g_1+e^{\varepsilon_1/kT})^2},$$

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \mu^0 - kT \ln(1+g_1 e^{-\varepsilon_1/kT}).$$

Látható, hogy amennyiben g_1 egységnyi nagyságrendű, akkor mind C_v, mind pedig μ a $kT \gtrapprox \varepsilon_1$ tartományban kezd eltérni a nem gerjesztett esetben kapott értéktől.

12.14. $$\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H}\, dx_1 \ldots dx_N, \qquad (1)$$

ahol

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta H}\, dx_1 \ldots dx_N.$$

Parciális integrálással az (1) egyenlet jobb oldalát a következőképpen alakíthatjuk:

$$\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = -\frac{kT}{Z} x_i e^{-\beta H} \Big|_{-\infty}^{\infty} +$$

$$+kT \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} e^{-\beta H}\, dx_1 \ldots dx_N.$$

Mivel az integrálási tartomány határán x_i vagy $e^{-\beta H}$ rendszerint eltűnik, így

$$\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = kT\delta_{ij}.$$

12.15. Egy-egy transzlációs, rotációs, ill. vibrációs szabadsági fok fajhőjáruléka $k/2$, $k/2$, ill. k. Így

a) $C = C_{tr} + C_{rot} + C_{vib} = \frac{3}{2}k + \frac{2}{2}k + k = \frac{7}{2}k.$

b) $C = \frac{3}{2}k + \frac{2}{2}k + 4k = \frac{13}{2}k.$

Itt csak a vibrációs szabadsági fokok leszámolása problematikus. A 4 független rezgési módus a következő:

1. ○→ ○ ←○

2. ○→ ←○ ○→

és

3. (kétszeresen degenerált)

c) A molekulában levő két atom relatív mozgása egydimenziós, ezért a kinetikus energia fajhőjáruléka $k/2$, míg a potenciális energiából adódó járulékot a 12.14. feladat alapján számolhatjuk ki:

$$\overline{ax^4} = \frac{1}{4}x\overline{\frac{\partial H}{\partial x}} = \frac{1}{4}kT,$$

s így a vibrációs szabadsági fok fajhőjáruléka

$$C = \frac{k}{2} + \frac{k}{4} = \frac{3}{4}k,$$

és a teljes fajhő:

$$C = \frac{3}{2}k + \frac{2}{2}k + \frac{3}{4}k = \frac{13}{4}k.$$

12.16. Igen. Feltételezve, hogy a H_2O-molekula lineáris, a vízgőz fajhőjére elég magas hőmérsékleten $C = 6{,}5k$ értéket kapunk (lásd a 12.15. példát). Amennyiben a molekula alakja lényegesen eltér a lineáristól, csak három független rezgési módusa van (I. kötet, 10.30.) tehát

$$C = C_{tr} + C_{rot} + C_{vib} = \frac{3}{2}k + \frac{3}{2}k + 3k = 6k.$$

A mérések természetesen ez utóbbi feltételezést támasztják alá.

12.17. A 12.14. feladat megoldását felhasználva

$$\left\langle p_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right\rangle = \left\langle \frac{p_i^2 c^2}{\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}} \right\rangle = kT \qquad i = 1, 2, 3, \qquad (1)$$

mivel $\mathcal{H} = \varepsilon = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ egy részecske energiája, ahol m a nyugalmi tömege, p pedig az impulzus abszolút értéke. Felhasználva, hogy $\varepsilon = mc^2/\sqrt{1 - v^2/c^2}$, az (1) egyenlet a következőképpen írható:

$$\frac{1}{2}\left\langle \frac{mv^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right\rangle = \frac{3}{2}kT.$$

Ultrarelativisztikus határesetben ($mc \ll p$) az ekvipartíció tétele:

$$\langle pc \rangle = 3kT,$$

míg nemrelativisztikus határesetben visszakapjuk a klasszikus eredményt:

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{3}{2}kT.$$

12.18. Az állapotösszeg:

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int e^{-\beta \sum_i^N cp_i} \, d\Gamma = \frac{1}{N!} \left(\frac{8\pi V (kT)^3}{h^3 c^3} \right)^N.$$

A belső energia:

$$E = 3NkT,$$

a hőkapacitás:

$$C = 3Nk,$$

az állapotegyenlet:

$$pV = NkT = \frac{1}{3} E.$$

12.19. Annak a valószínűsége, hogy egy molekula sebessége v és z magasságban tartózkodik:

$$P(v, z)\, dz\, 4\pi v^2\, dv =$$

$$= C \exp\left[-\frac{1}{kT} \left(\frac{1}{2} mv^2 + mgz \right) \right] dz\, 4\pi v^2\, dv,$$

amiből a sűrűségeloszlás:

$$\varrho = \varrho_0 e^{-mgz/kT},$$

a belső energia:

$$E = \frac{3}{2} NkT + NkT = \frac{5}{2} NkT,$$

tehát a hőkapacitás

$$C = \frac{5}{2} Nk.$$

Mivel a súlypont koordinátájának definíciója

$$z_s = \frac{\left\langle \sum_{i=1}^N mgz_i \right\rangle}{\sum_{i=1}^N mg} = \langle z_i \rangle,$$

a potenciális energia átlaga arányos z_s-sel, s így

$$E = \frac{3}{2} NkT + Nmgz_s.$$

12.20. A tartomány kicsi, ezért benne a z koordináta állandónak tekinthető, s így a szabadenergia

$$F = -kT \ln (e^{-\beta mgzN} Z_0),$$

ahol Z_0 a részrendszer állapotösszege, amennyiben az a Föld felszínén helyezkedik el. Ebből

$$\mu(z) - \mu(0) = mgz$$

(l. a II. kötet 17.1. feladatát).

12.21. Mivel a felszállás lassú és a doboz hőszigetelt, a folyamatot kvázistacionáriusnak és adiabatikusnak tekinthetjük, azaz

$$S(T, g) = \text{konst.}, \tag{1}$$

ahol g a gravitációs gyorsulás az adott magasságban, T pedig a dobozban levő gáz hőmérséklete. A hőmérséklet változására (1) idő szerinti deriválásával kapunk egyenletet:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_g \dot{T} + \left(\frac{\partial S}{\partial g} \right)_T \dot{g} = 0. \tag{2}$$

Mivel a felszállás lassú, a $(\partial S/\partial T)_g$ és $(\partial S/\partial g)_T$ deriváltakat a pillanatnyi T és g értékek mellett kiszámolhatjuk

$$S = \beta(E - F) = \left(-\beta \frac{\partial}{\partial \beta} + 1 \right) \ln Z.$$

$(\partial S/\partial g)_T$-t kifejezhetjük a gáz dobozhoz viszonyított súlypont-

jának $\langle z \rangle$ átlagos koordinátája segítségével:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial g}\right)_T = \left(1-\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right)\frac{\partial \ln Z}{\partial g} = M\beta^2\frac{\partial\langle z\rangle}{\partial\beta} = -\frac{M}{k}\frac{\partial\langle z\rangle}{\partial T},$$

ahol M a dobozban levő gáz tömege.

Mivel $(\partial S/\partial T)_g = C_{v,g}/T$, ezért $\dot{T}$ a következőképpen írható:

$$\dot{T} = \frac{TM}{C_{v,g}}\frac{\partial\langle z\rangle}{\partial T}\dot{g}.$$

Tudjuk, hogy $C_{v,g} > 0$ és $(\partial\langle z\rangle/\partial T) > 0$, valamint a felszállás során $\dot{g} < 0$, tehát

$$\dot{T} < 0,$$

azaz a gáz hőmérséklete csökken. Ugyanerre az eredményre jutunk a következő meggondolásból is. A felszálláskor a gravitációs potenciál csökken, tehát a molekulák egyre egyenletesebben töltik be a dobozt. Ez azt jelenti, hogy a rendszer koordinátatérbeli rendezetlensége nő. Mivel az entrópia állandó, ez csak úgy történhet meg, hogy az impulzustérbeli rendezetlenség csökken, azaz a gáz lehűl.

12.22. $P(\mathbf{r}, \mathbf{v})\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{v} = C\exp\left[-\left(\frac{1}{2}mv^2 - \gamma\frac{Mm}{r}\right)\right] d\mathbf{r}\, d\mathbf{v}.$

Ez az eloszlásfüggvény nem normálható, tehát használhatatlan. A Föld atmoszférája nem izotermikus, s ez a „nemegyensúlyiság" akadályozza meg az atmoszféra elszökését.

12.23. Legyen a hengerben N darab m tömegű molekula. Ekkor

$$\varrho(r) = Ae^{m\omega r^2/2kT},$$

ahol

$$A^{-1} = \frac{2\pi lkT}{Nm^2\omega^2}(e^{m\omega^2R^2/2kT} - 1).$$

12.24. A 12.23. feladatban meghatározott eloszlásfüggvényt alkalmazva:

$$I = Nm\left(R^2\frac{e^{\alpha R^2}}{e^{\alpha R^2}-1} - \frac{1}{\alpha}\right),$$

ahol

$$\alpha = \frac{m\omega^2}{2kT}.$$

Határesetek:

a) $T\to\infty$, $I \to N\frac{mR^2}{2}$ (egyenletesen elosztott anyag).

b) $T\to 0$, $I \to NmR^2$ (az összes atom a henger palástján helyezkedik el).

12.25. A tömeghatás törvényét alkalmazva a $J_2 \rightleftarrows 2\,J$ folyamatra:

$$\frac{C_J^2}{C_{J_2}} = \frac{Z_J^2}{Z_{J_2}} = K, \qquad (1)$$

ahol magas hőmérsékleten

$$Z_J \approx \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$Z_{J_2} \approx \left(\frac{2\pi 2mkT}{h^2}\right)^{3/2}\frac{2I}{\hbar^2}kT\frac{kT}{\hbar\omega}e^{ED/kT}.$$

A Z_{J_2}-ben szereplő $\exp(E_D/kT)$ a J_2-molekula E_D kötési energiáját veszi figyelembe. Behelyettesítve az (1) egyenletbe

$$\frac{C_J^2}{C_{J_2}} = \text{konst.}\frac{e^{-ED/kT}}{(kT)^{1/2}}.$$

Látható, hogy az egyensúlyi koncentrációviszonyok hőmérsékletfüggését elsősorban a J_2-molekula kötési energiája határozza meg.

12.26. A tömeghatás törvénye szerint

$$\frac{C_{DCl}C_{HBr}}{C_{DBr}C_{HCl}} = \frac{Z_{DCl}Z_{HBr}}{Z_{DBr}Z_{HCl}} = K,$$

ahol C_i az i komponens egyensúlyi koncentrációja és Z_i a V^{-1} szorzótól eltekintve a megfelelő egyrészecske állapotösszeg magas hőmérsékleten:

$$Z_i \approx \left(\frac{2\pi m_i kT}{h^2}\right)^{3/2} \frac{2I_i}{\hbar^2} kT \frac{kT}{\hbar\omega_i}.$$

Itt nem írtuk ki a spindegenerációból jövő szorzót, mivel az a $Z_{DCl}Z_{HBr}$ szorzatban ugyanaz, mint a $Z_{DBr}Z_{HCl}$ tényezőben, s így nem befolyásolja K értékét. Megmutatjuk, hogy $K \approx 1$, tehát

$$\frac{C_{DCl}}{C_{DBr}} = \frac{C_{HCl}}{C_{HBr}}.$$

A $K \approx 1$ egyenlőség belátásához észre kell vennünk, hogy a tehetetlenségi nyomatékot ($I = \mu r_0^2$) meghatározó egyensúlyi távolság r_0 és a körfrekvenciát ($\omega = \sqrt{k/\mu}$) meghatározó k rugóállandó csak a molekulák elektronszerkezetétől függ, tehát a DCl- és a HCl-, valamint a DBr- és HBr-molekulákra ezek az állandók gyakorlatilag azonosak. Így a K-t meghatározó törtből az r_0 és k állandók kiesnek, és csak a redukált tömegtől ($\mu^{-1} = \mu_A^{-1} + \mu_B^{-1}$) való függés marad meg. Egyszerű behelyettesítéssel megmutatható, hogy ez a függés is csak látszólagos, és $K = 1$.

12.27. Szobahőmérsékleten a rotációs állapotösszeg már helyettesíthető a klasszikus kifejezésével a vibrációs állapotösszeg azonban még nem. Ezért

$$K = \frac{Z_{HD}^2}{Z_{H_2}Z_{D_2}} = \left(\frac{m_{HD}^2}{m_{H_2}m_{D_2}}\right)^{3/2} 4\frac{I_{HD}^2}{I_{H_2}I_{D_2}} \times$$

$$\times \exp\left(-\beta\hbar\left[\omega_{HD} - \frac{\omega_{H_2}+\omega_{D_2}}{2}\right]\right) \times$$

$$\times \frac{(1-e^{-\beta\hbar\omega_{H_2}})(1-e^{-\beta\hbar\omega_{D_2}})}{(1-e^{-\beta\hbar\omega_{HD}})^2}.$$

Felhasználtuk, hogy az alapállapoti energia mindhárom molekulában azonos, valamint azt, hogy azonos atomokból álló kétatomos molekulákban a spindegenerációs faktorban fellép egy 1/2 szorzó. A 12.26. feladat megoldásakor használt gondolatmenetet követve, a frekvenciák arányára azt kapjuk, hogy

$$\omega_{HD} : \omega_{H_2} : \omega_{D_2} = 1 : \frac{2}{\sqrt{3}} : \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Szobahőmérsékleten tehát mindegyik frekvenciára igaz, hogy $\beta\hbar\omega \gg 1$. A tehetetlenségi nyomatékot a tömegarányokkal kifejezve, végül azt kapjuk, hogy

$$K = 3\sqrt{2}\exp\left[-\beta\hbar\omega_{HD}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{6}}\right)\right] =$$

$$= 4{,}24e^{-62{,}3\ K/T}.$$

13. Ideális kvantumgázok

13.1. a) A termikus hullámhosszat az átlagos kinetikus energiából becsülhetjük:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{h^2}{2m\lambda_T^2} \approx kT.$$

Mivel egy d-dimenziós rendszerben a részecskék átlagos távolsága $R = (V/N)^{1/d}$, a klasszikustól eltérő viselkedés akkor válik lényegessé, ha $R \lessapprox \lambda_T$, azaz

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/d} \lessapprox \frac{h}{\sqrt{2mkT}}.$$

b) Felhasználva az ideális gáz állapotegyenletét:

$$\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{d/2} (kT)^{(d+2)/2} \lessapprox p.$$

Az eltérés tehát nagy nyomáson, ill. alacsony hőmérsékleten várható, s minél kisebb a molekulák (atomok) tömege, annál hamarabb megjelennek a kvantumeffektusok.

13.2. a) Az állapotegyenletet a következő összefüggésekből határozhatjuk meg:

$$E = \frac{3}{2}pV = \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1} \approx$$

$$\approx \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{\Gamma(5/2)}{\beta^{5/2}}e^{\beta\mu}\left(1\mp\frac{e^{\beta\mu}}{2^{5/2}}\right),$$

és

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1} \approx$$

$$\approx \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{\Gamma(3/2)}{\beta^{3/2}}e^{\beta\mu}\left(1\mp\frac{e^{\beta\mu}}{2^{3/2}}\right),$$

ahol $g = 2S+1$ és S a részecskék spinje, s a felső előjelek fermionokra, míg az alsó előjelek bozonokra vonatkoznak. Kiküszöbölve a fenti egyenletekből a kémiai potenciált

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2}kT\left(1\pm\frac{\lambda_T^3 N}{2^{5/2}\pi^{3/2}gV}\right), \qquad \lambda_T = \left(\frac{h^2}{2mkT}\right)^{1/2},$$

s így az állapotegyenlet:

$$pV = NkT\left(1\pm\frac{1}{2^{5/2}\pi^{3/2}}\frac{\lambda_T^3 N}{gV}\right).$$

b) A $\varkappa_T$ izotermikus kompresszibilitás az állapotegyenletből származtatható:

$$\varkappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{V}{NkT}\left(1\mp\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{\lambda_T^3 N}{gV}\right),$$

a fajhőket pedig E-ből, ill. az entalpiából ($H = E+pV$) számíthatjuk ki:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{3}{2}Nk\left(1\mp\frac{1}{2^{7/2}\pi^{3/2}}\frac{\lambda_T^3 N}{gV}\right),$$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p = \frac{5}{2}Nk\left(1\mp\frac{3}{2^{7/2}\pi^{3/2}}\frac{\lambda_T^3 N}{gV}\right).$$

13.3. Az átlagos távolság:

$$R = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} = \left(\frac{2{,}2\cdot 10^{-2}\ \mathrm{m}^3}{6\cdot 10^{23}}\right)^{1/3} \approx 1{,}5\cdot 10^{-8}\ \mathrm{m}.$$

A termikus hullámhossz:

$$\lambda_T = \left(\frac{h^2}{2mkT}\right)^{1/2} \approx$$

$$\approx \frac{6{,}6\cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}}{\left(2\cdot 3\cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg}\ 1{,}4\cdot 10^{-23}\ \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}}\ 273\ \mathrm{K}\right)^{1/2}} \approx$$

$$\approx 10^{-11}\ \mathrm{m}.$$

Az állapotegyenlet (lásd a 13.2. példát):

$$pV = NkT\left(1-\frac{1}{2^{5/2}\pi^{3/2}}\left(\frac{\lambda_T}{R}\right)^3\right) \approx NkT(1-10^{-4}),$$

tehát a nyomást a kvantumeffektusok kb. 0,01%-nyit változtatják.

13.4. $pV = NkT\left(1\pm\frac{1}{2^7\pi}\frac{\lambda_T^3 N}{gV}\right)$,

ahol $\lambda_T = hc/(kT)$, a termikus hullámhossz, s a felső előjel a fermionokra, az alsó a bozonokra vonatkozik. Az energia kifejezése pedig

$$E = 3pV.$$

13.5. A Fermi-energia

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},$$

ahol k_F a sűrűségből számítható ki ($N = g \sum_{|k| < kF} 1$, ahol g a spindegeneráció):

$$k_F = \left(6\pi^2 \frac{N}{gV}\right)^{1/3}.$$

Megjegyezzük, hogy k_F független attól, milyen alakú az egyrészecske-energia. Így a Fermi-energia a különböző esetekben

a) $\frac{N}{V} \approx 10^{29}\ m^{-3}$, $\varepsilon_F \approx 5$ eV.

b) $\frac{N}{V} \approx \frac{A}{r_0^3 A} = r_0^{-3} \approx 10^{45}\ \mathrm{m}^{-3}$, $\varepsilon_F \approx 10^8$ eV.

c) $\frac{N}{V} \approx \frac{1}{46{,}2 \cdot 10^{-30}\ \mathrm{m}^3}$, $\varepsilon_F \approx 10^{-3}$ eV.

13.6. $\varrho \approx 10^{35}\ \mathrm{m}^{-3}$, a Fermi-felületen érvényes sebesség–sűrűség összefüggés alapján.

13.7. Mivel

$$kT_F = \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(6\pi^2 \frac{N}{gV}\right)^{2/3},$$

ezért a két Fermi-hőmérséklet aránya:

$$\frac{T_{F\,\mathrm{el}}}{T_{F\,\mathrm{prot}}} = \frac{m_{\mathrm{prot}}}{m_{\mathrm{el}}}.$$

13.8. $T = 0$ K hőmérsékleten $S = 0$, tehát

$$p = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N.$$

A teljes energia kifejezhető a Fermi-energia segítségével:

$$E = g \sum_{|k| < kF} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F = \frac{3}{5} N \frac{\hbar^2}{2m}\left(6\pi^2 \frac{N}{gV}\right)^{2/3},$$

s így

$$p = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \frac{\hbar^2}{2m}\left(6\pi^2 \frac{N}{gV}\right)^{2/3}.$$

13.9. Az elektrongáz energiája:

$$E = g \sum_{p < p_F} cp = \frac{gV}{(2\pi)^3} \frac{4\pi c}{\hbar^3} \int_0^{p_F} p^3\, dp =$$

$$= \frac{gV}{8\pi^2} c\hbar \left(6\pi^2 \frac{N}{gV}\right)^{4/3} \sim V^{-1/3},$$

s így a nyomás ($T = 0$ K, tehát $S = 0$):

$$p_0 = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_N = \frac{1}{3} \frac{E}{V}.$$

13.10. A fermionok közötti távolság $r = (V/N)^{1/3}$. A Fermi-energia relativisztikus esetben:

$$\varepsilon_F = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p_F^2} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 c^2}\left(6\pi^2 \frac{N}{gV}\right)^{2/3}} =$$

$$= mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3} \left(\frac{r_0}{r}\right)^2},$$

tehát ha $r_0/r \ll 1$, akkor

$$\frac{\varepsilon_F - mc^2}{mc^2} \approx \left(\frac{r_0}{r}\right)^2 \ll 1.$$

13.11. a) $N = \int_0^{\mu_0} D\, d\varepsilon = D\mu_0$, tehát $\mu_0 = N/D$.

$$E = \int_0^{\mu_0} \varepsilon D\, d\varepsilon = \frac{D\mu_0^2}{2} = \frac{N^2}{2D}.$$

Az energia extenzív, mivel az állapotsűrűség a térfogattal arányos ($D \sim V$).

b) Nemdegenerált határesetről akkor beszélünk, amikor $e^{-\beta\mu} \gg 1$. Ebben az esetben

$$N = e^{\beta\mu} \int_0^\infty e^{-\beta\varepsilon} D \, d\varepsilon = e^{\beta\mu} DkT,$$

tehát a nemdegeneráltság feltétele

$$e^{-\beta\mu} = \frac{DkT}{N} \gg 1,$$

azaz a kT intervallumban sokkal több állapot kell hogy legyen, mint ahány részecske van a rendszerben.

c) Bethe–Sommerfeld-sorfejtést alkalmazva (lásd a Függeléket):

$$\mu = \frac{N}{D}, \qquad E = \frac{D\mu^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} D(kT)^2 + O((kT)^4),$$

s így a fajhő:

$$C = k\frac{\pi^2}{3} DkT + O((kT)^3).$$

13.12. A Fermi-hőmérsékletnek az $\varepsilon_F = kT_F$ összefüggésből kapott értéke:

$$N = \frac{gV}{6\pi^2\hbar^3}(2mkT_F)^{3/2}.$$

A $\mu(T_1) = 0$ egyenlet által meghatározott karakterisztikus hőmérséklet pedig

$$N = \frac{gV}{2\pi^2\hbar^3}(2mkT_1)^{3/2} \int_0^\infty \frac{dx\, x^2}{e^{x^2}+1}.$$

E két egyenletből

$$\frac{T_F}{T_1} = \left(3\int_0^\infty \frac{dx\, x^2}{e^{x^2}+1}\right)^{2/3},$$

amiből látható, hogy $T_F \approx T_1$, mivel az integrál értéke egységnyi nagyságrendű.

13.13. Feltesszük, hogy az egyrészecske-energia $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m$. Ekkor az állapotsűrűség

$$D(\varepsilon) = \frac{gV}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \equiv A\varepsilon^{1/2},$$

s a minket érdeklő átlag:

$$\bar{f} = A\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{n+1/2}\, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}.$$

Bethe–Sommerfeld-sorfejtést alkalmazva (lásd a Függeléket)

$$f = A\frac{\mu^{n+3/2}}{n+\frac{3}{2}}\left\{1+\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(n+\frac{3}{2}\right)\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2 + O\left(\left(\frac{kT}{\mu}\right)^4\right)\right\}. \tag{1}$$

Ugyancsak a Bethe–Sommerfeld-sorfejtést alkalmazzuk μ alacsonyhőmérsékleti sorfejtésének meghatározására:

$$N = A\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}\, d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} =$$

$$= A\frac{\mu^{3/2}}{3/2}\left\{1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2 + O\left(\left(\frac{kT}{\mu}\right)^4\right)\right\},$$

ahonnan

$$\mu = \mu_0\left\{1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2 + O\left(\left(\frac{T}{T_F}\right)^4\right)\right\}.$$

Itt μ_0 a $T=0$ hőmérsékleti kémiai potenciál, és $kT_F=\mu_0$ a Fermi-hőmérséklet. Ezek után $\bar{f}$ alacsonyhőmérsékleti sorfejtése:

$$\bar{f} = A\frac{\mu_0^{n+3/2}}{n+\frac{3}{2}}\left\{1+n\left(n+\frac{3}{2}\right)\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+O\left(\left(\frac{T}{T_F}\right)^4\right)\right\}.$$

13.14. $$p = \frac{1}{4}\frac{NkT_F}{V}\left(1+\frac{2}{3}\pi^2\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right),$$

ahol

$$T_F = \frac{c\hbar}{k}\sqrt[3]{\frac{N}{V}\frac{3}{8\pi}}.$$

13.15. A spin-szuszceptibilitás (χ) kiszámításához a mágnesezettséget (M) kell meghatároznunk a $B\to 0$ határesetben ($M=\chi B$). Jelöljük μ_B-vel az elektron mágneses momentumát. Ekkor

$$M = \mu_B\left\{\int_0^\infty \frac{D(\varepsilon)\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu_B B-\mu)}+1} - \int_0^\infty \frac{D(\varepsilon)\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon+\mu_B B-\mu)}+1}\right\} \approx$$

$$\approx \mu_B\int_0^\infty \frac{D(\varepsilon+\mu_B B)-D(\varepsilon-\mu_B B)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,d\varepsilon \approx 2\mu_B^2 B\int_0^\infty \frac{D'(\varepsilon)\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1},$$

tehát

$$\chi = 2\mu_B^2\int_0^\infty \frac{D'(\varepsilon)\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}.$$

Az erősen degenerált határesetben a Bethe–Sommerfeld-sorfejtést alkalmazhatjuk:

$$\chi = 2\mu_B^2\left[D(\mu)+\frac{\pi^2}{6}D''(\mu)(kT)^2+\ldots\right].$$

Mivel a kémiai potenciál alacsonyhőmérsékleti sorfejtése

$$\mu = \mu_0 - \frac{\pi^2}{6}\frac{D'(\mu_0)}{D(\mu_0)}(kT)^2+\ldots,$$

a végeredmény

$$\chi = 2\mu_B^2 D(\mu_0)\left[1+\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\partial^2 \ln D}{\partial\mu^2}\right)_{\mu_0}(kT)^2+\ldots\right].$$

13.16. $$\chi = 2\mu_B^2\int_0^\infty \frac{D'(\varepsilon)\,d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \approx 2\mu_B^2\int_0^\infty D'(\varepsilon)e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\,d\varepsilon =$$

$$= 2\mu_B^2\beta\int_0^\infty D(\varepsilon)e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\,d\varepsilon = \mu_B^2\beta n = \frac{\mu_B^2 n}{kT},$$

ahol n az elektrongáz sűrűsége.

13.17. Mivel a kémiai potenciál zérussá válása jelzi a kondenzáció megjelenését, a kritikus sűrűséget meghatározó egyenlet:

$$\frac{N}{V} = 2\pi\left(\frac{2mkT}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \frac{dx\,x^{1/2}}{e^x-1},$$

és így

$$\varrho_c \sim T^{3/2}.$$

Amennyiben $\varrho>\varrho_c$, a kémiai potenciál zérus és a kondenzátumban levő részecskéket (N_0) külön kell választanunk, akkor

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{k}\neq 0}\overline{n_{\mathbf{k}}},$$

ahonnan

$$\frac{N_0}{N} = 1-\frac{\varrho_c}{\varrho}.$$

13.18. A kémiai potenciált meghatározó egyenlet az egy-, ill. kétdimenziós ideális Bose-gázban:

$$d=1: \quad \frac{N}{V}=\left(\frac{2mkT}{h^2}\right)^{1/2}\int_0^\infty \frac{dx}{e^{x^2+\alpha}-1},$$

$$d=2: \quad \frac{N}{V}=\frac{2\pi mkT}{h^2}\int_0^\infty \frac{dx}{e^{x+\alpha}-1}, \qquad \alpha=-\beta\mu>0.$$

Mivel az $\alpha\to 0$ határesetben az egyenletek jobb oldalán álló integrálok $(+\infty)$-hez tartanak, ezért α (azaz μ) megfelelő megválasztásával N/V állandónak tartható tetszőlegesen alacsony hőmérsékleten is. Így tehát kondenzáció nem lép fel.

13.19. Legyen a gázt tartalmazó edény magassága L, keresztmetszete S, és mutasson a gravitációs tér a z tengely irányába. Ekkor a kémiai potenciált meghatározó egyenlet:

$$N=S\int_0^L dz\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}+mgz-\mu)}-1},$$

a kritikus hőmérsékletet a $\mu=0$ feltételből kapjuk. Megfelelő változócserék után:

$$\frac{N}{V}=2\pi\left(\frac{2mkT_c}{h^2}\right)^{3/2}\frac{1}{L}\int_0^L dz\int_0^\infty \frac{x^{1/2}\,dx}{e^{x+qz}-1}=$$

$$=2\pi\left(\frac{2mkT_c}{h^2}\right)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\frac{1}{L}\int_0^L dz\,F^{(-)}\left(\frac{3}{2},qz\right),$$

ahol bevezettük a $q=mg/kT_c$ jelölést.

A gravitáció nélküli rendszer kritikus hőmérsékletét az

$$\frac{N}{V}=2\pi\left(\frac{2mkT_c^{(0)}}{h^2}\right)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)F^{(-)}\left(\frac{3}{2},0\right)$$

egyenlet adja. Így a $T_c/T_c^{(0)}$ hányadosára a következő kifejezést kapjuk:

$$\left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right)^{3/2}=\frac{1}{\frac{1}{L}\int_0^L dz\,\frac{F^{(-)}(3/2,qz)}{F^{(-)}(3/2,0)}}. \tag{1}$$

Amennyiben a részecskék átlagos potenciális energiája ($\approx mgL$) kisebb az átlagos kinetikus energiánál ($\approx kT_c^{(0)}$) a kritikus hőmérséklet eltolódása kicsi, és (1)-ből könnyen számolható. Mivel $mgL/kT_c^{(0)}\ll 1$, és az integrálban $F^{(-)}$ helyettesíthető a $qz\ll 1$ sorfejtéssel

$$F^{(-)}\left(\frac{3}{2},\alpha\right)=\zeta\left(\frac{3}{2}\right)+\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)\alpha^{1/2}+O(\alpha),$$

ahol ζ a Riemann-féle dzeta-függvény (lásd a Függeléket). Így a z szerinti integrál kiszámítása után:

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}}=1+\frac{8\sqrt{\pi}}{9\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\left(\frac{mgL}{kT_c^{(0)}}\right)^{1/2}.$$

13.20. a) Egy nem túlságosan szabálytalan alakú, V térfogatú dobozban a legkisebb, nem zérus energiájú állapot energiája

$$\varepsilon\sim\frac{\hbar^2}{mV^{2/3}},$$

tehát az állapot betöltöttsége

$$n_\varepsilon=\frac{1}{e^{\varepsilon/kT}-1}\approx\frac{kT}{\varepsilon}\sim\frac{mkTV^{2/3}}{\hbar^2}.$$

b) Az alapállapotban levő részecskék száma

$$N_0=N\left(1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right)=\frac{1}{e^{-\beta\mu}-1}\sim\frac{1}{\beta|\mu|},$$

tehát

$$|\mu| = O\left(\frac{1}{N}\right).$$

Megjegyezzük, hogy a kémiai potenciált elvileg figyelembe kellett volna vennünk az a) feladat megoldásában is. Mivel azonban

$$|\mu| \sim N^{-1} \sim V^{-1}, \text{ így azt az } \varepsilon \sim V^{-2/3}$$

energiához képest jogosan hanyagoltuk el.

13.21. $T=0$ hőmérsékleten minden részecske a $p=0$ impulzusú állapotban van. A részecskeszámot ekkor meghatározó

$$N = \int \bar{n}_0(p)\, d^3p = \int_0^\infty \bar{n}_0(p) 4\pi p^2\, dp$$

összefüggésből leolvasható, hogy

$$\bar{n}_0(p) = \frac{N\delta(p)}{2\pi p^2}.$$

A $T \neq 0$, de T_c alatti hőmérsékleten $N_0 = N(1-(T/T_c)^{3/2})$ számú részecske kondenzálódik, tehát a teljes eloszlás

$$n(p) = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_p}-1} + \frac{N_0\delta(p)}{2\pi p^2}.$$

13.22. Ideális Bose-gázban T_c alatt $\mu=0$, és így

$$E = 2\pi V\left(\frac{2mkT}{h^2}\right)^{3/2} kT \int_0^\infty \frac{x^{3/2}\, dx}{e^x-1} \sim T^{5/2}.$$

13.23. A kémiai potenciált meghatározó egyenlet:

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)}-1} + \sum_{\mathbf{k}} g_1 \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_1+\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)}-1}.$$

A $T=T_c$ hőmérsékleten $\mu=0$, tehát

$$N = 2\pi V\left(\frac{2mkT_c}{h^2}\right)^{3/2}\left[\int_0^\infty \frac{x^{1/2}\, dx}{e^x-1} + g_1\int_0^\infty \frac{x^{1/2}\, dx}{e^{x+\beta_c\varepsilon_1}-1}\right].$$

Felhasználva, hogy $\varepsilon_1 \gg kT_c$,

$$N = 2\pi V\left(\frac{2mkT_c}{h^2}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left[1+\frac{g_1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} e^{-\beta_c\varepsilon_1}\right].$$

A gerjesztett állapotok elhanyagolásával kapott kritikus hőmérséklet:

$$N = 2\pi V\left(\frac{2mkT_c^{(0)}}{h^2}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right),$$

így

$$\left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right)^{3/2} = 1 - \frac{g_1}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} e^{-\varepsilon_1/kT_c}.$$

Mivel a feltételezés szerint $\varepsilon_1 \gg kT_c$, így $T_c^{(0)}$ megváltozása kicsi, tehát

$$T_c = T_c^{(0)}\left[1 - \frac{2g_1}{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} e^{-\varepsilon_1/kT_c^{(0)}}\right].$$

13.24. A kémiai potenciált ($\alpha = -\mu/kT$), ill. a kritikus hőmérsékletet meghatározó egyenletek:

$$N = \frac{2\pi V(2mkT)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{h^3} F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, \alpha\right)$$

és

$$N = \frac{2\pi V(2mkT_c)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{h^3} F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, 0\right),$$

ahonnan

$$\left(\frac{T_c}{T}\right)^{3/2} = \frac{F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, \alpha\right)}{F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, 0\right)} = 1 + \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}{F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, 0\right)}\sqrt{\frac{-\mu}{kT}} =$$

$$= 1 - \frac{2\sqrt{\pi}}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}\sqrt{\frac{-\mu}{kT}},$$

tehát az átalakulási pont körül

$$\mu \cong -kT_c\left(\frac{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{4\sqrt{\pi}}\right)^2\left(\frac{T}{T_c}-1\right)^2.$$

Természetesen ez a kifejezés a $T \gtrless T_c$ esetben érvényes, T_c alatt $\mu = 0$.

13.25. Az izotermikus kompresszibilitást például a részecskeszám-fluktuációval fejezhetjük ki:

$$\varkappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{N,T} = \frac{V}{N^2}\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{V,T}.$$

A kémiai potenciált meghatározó egyenlet:

$$N = \frac{2\pi V(2mkT)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{h^3}F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, \alpha\right).$$

Mivel az átalakulási pont körül $\alpha \approx 0$ és

$$F^{(-)}\left(\frac{3}{2}, \alpha\right) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) - 2\sqrt{\pi}\,(-\mu/kT)^{1/2},$$

ezért

$$N = C_0 + C_1\sqrt{|\mu|},$$

tehát a keresett kompresszibilitás

$$\varkappa_T \sim \frac{\partial N}{\partial \mu} \sim \frac{1}{\sqrt{|\mu|}}.$$

Felhasználva a 13.24. feladat eredményét, látható, hogy $\varkappa_T$ divergens, ha $T \to T_c$:

$$\varkappa_T \sim \frac{1}{T - T_c}.$$

13.26. Az energia kifejezése T_c alatt, ill. fölött:

$$E_<(T) = 2\pi V\left(\frac{2mkT}{h^2}\right)^{3/2} kT\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)F^{(-)}\left(\frac{5}{2}, 0\right),$$

$$E_>(T) = E_<(T)\frac{F^{(-)}\left(\frac{5}{2}, \alpha\right)}{F^{(-)}\left(\frac{5}{2}, 0\right)}, \qquad \alpha = -\beta\mu > 0.$$

Mivel T_c közelében $\alpha \approx 0$ és $F^{(-)}$ sorfejtése kis α értékre

$$F^{(-)}\left(\frac{5}{2}, \alpha\right) = \Gamma\left(-\frac{3}{2}\right)\alpha^{3/2} + \zeta\left(\frac{5}{2}\right) - \zeta\left(\frac{3}{2}\right)\alpha + O(\alpha^2),$$

ezért

$$E_>(T) = E_<(T)\left[1 - \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}\left(-\frac{\mu}{kT}\right) + O\left(\left(\frac{\mu}{kT}\right)^{3/2}\right)\right]. \quad (1)$$

A 13.24. feladatból tudjuk, hogy az átalakulási pont körül

$$\mu \cong -kT_c\left(\frac{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{4\sqrt{\pi}}\right)^2\left(\frac{T}{T_c}-1\right)^2. \quad (2)$$

Tehát a hőkapacitásba ($C_v = \partial E/\partial T$), ill. annak deriváltjába

$(\partial C_v/\partial T)$ az elhanyagolt tagok nem adnak járulékot a kritikus hőmérsékleten.

Az (1) és (2) egyenletekből látható, hogy a fajhő folytonos T_c-nél, a deriváltja viszont ugrik:

$$C_v = \frac{5}{2} k 2\pi V \left(\frac{2\pi m k T_c}{h^2}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\zeta\left(\frac{5}{2}\right) =$$

$$= \frac{5}{2} Nk \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \approx 1{,}93Nk,$$

$$\Delta\left(\frac{\partial C_v}{\partial T}\right) = -E_<(T_c) \frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{\zeta\left(\frac{5}{2}\right)} 2 \left(\frac{3\zeta\left(\frac{3}{2}\right)}{4\sqrt{\pi}}\right)^2 \frac{1}{T_c^2} =$$

$$= -\frac{27\zeta^2\left(\frac{3}{2}\right)}{16\pi} \frac{Nk}{T_c} = -3{,}66 \frac{Nk}{T_c}.$$

13.27. Az állapotegyenlet:

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

és az energia

$$E = 2\frac{V}{(2\pi)^3}\int_0^\infty \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \frac{4\pi\omega^2\, d\omega}{c^3} =$$

$$= \frac{V}{4\pi^3}\frac{1}{\hbar^3}(kT)^4 \frac{4\pi}{c^3}\frac{\pi^4}{15} = V\frac{4\sigma}{c}T^4,$$

tehát

$$p = \frac{4}{3}\frac{\sigma}{c}T^4.$$

13.28. Egy T hőmérsékletű fekete test felületegységenként és időegységenként

$$W = \sigma T^4$$

energiát sugároz ki (Stephan–Boltzmann-törvény). A Föld esetében a kisugárzott teljesítmény

$$P_1 = 4\pi R_F^2 \sigma T_F^4.$$

Feltételezzük, hogy ezt az energiát teljes egészében a Naptól kapott sugárzás fedezi. D-vel jelölve a Nap–Föld távolságot, a Naptól időegységenként

$$P_2 = 4\pi R_N^2 \sigma T_N^4 \frac{\pi R_F^2}{4\pi D^2}$$

hőt kapunk. A teljesítmények egyenlőségéből

$$T_N = \left(\frac{2D}{R_N}\right)^{1/2} T_F \approx 5900 \text{ K}.$$

13.29. A fotonok számára (N) nincs megkötés, s így rögzített T és V mellett N egyensúlyi értékét meghatározó feltétel a szabadenergia minimuma:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = 0.$$

Másrészt $\partial F/\partial N = \mu$, és így a fenti feltétel $\mu = 0$ alakban is megfogalmazható.

13.30. Kondenzáció csak akkor következik be, ha a részecskeszám állandó. A fotonok száma viszont függ a hőmérséklettől és a térfogattól, s így nem jöhet létre Bose–Einstein-kondenzáció.