Statisztikus Fizika Gyakorlat

2016. február 10.

I. rész

Néhány hasznos matematikai formula

1. Gauss-integrál

Vezessük le a következő integrált:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}. \tag{1}$$

Célszerű a kifejezés négyzetét vizsgálni!

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2-y^2} \mathrm{d}x\mathrm{d}y. \tag{2}$$

Az integrált írjuk át polárkoordinátákba!

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi, \qquad (3) \\ y &= r\sin\varphi, \\ \mathrm{d}x\mathrm{d}y &= r\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}r. \end{aligned}$$

A keresett integrál a következő alakot ölti:

$$I^2 = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-r^2} r\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}r = 2\pi \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-r^2} r\mathrm{d}r. \tag{4}$$

Végezzünk el még egy változó cserét!

$$\begin{aligned} u &= r^2, \qquad (5) \\ \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} &= 2r \to \mathrm{d}u = 2r\mathrm{d}r. \end{aligned}$$

Így már elemi integrációs szabályokkal kiértékelhető összefüggésre jutunk:

$$I^2 = 2\pi \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-u}}{2} \mathrm{d}u = \pi \left[-\mathrm{e}^{-u}\right]_0^{\infty} = \pi. \tag{6}$$

A keresett integrál tehát:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}. \tag{7}$$

Egy egyszerű változó cserével lássuk be a Gauss-integrál egyszerű általánosítását:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ax^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \tag{8}$$

$$ax^2 = t^2, \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} = \sqrt{a} \to \mathrm{d}t = \sqrt{a}\mathrm{d}x. \tag{10}$$

Kapjuk tehát hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ax^2} \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-t^2} \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{a}} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \tag{11}$$

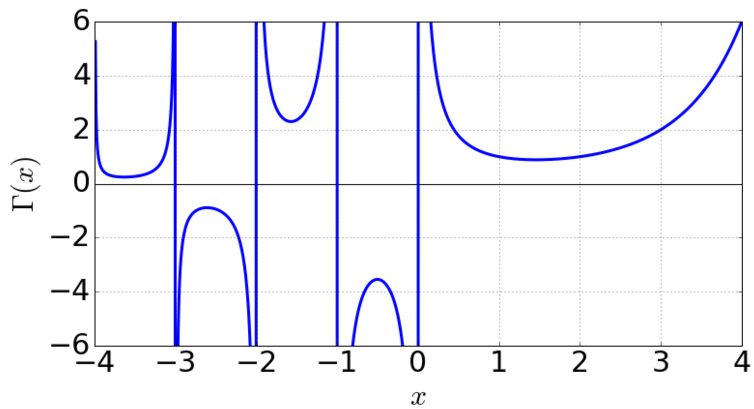
HF-01: Lássuk be hogy ha $a > 0$ valós szám akkor:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ax^2+bx+c}\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}+c} \tag{12}$$

Útmutatás:

- Alakítsuk teljes négyzetté a kitevőben szereplő polinomot!
- A Gauss-integrál invariáns az integrandus „eltolására”!
- A négyzetes tag együtthatójától egy alkalmas változó cserével szabadulhatunk meg.

2. A Gamma-függvény néhány tulajdonsága



1. ábra. A Gamma függvény

A Gamma-függvény:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-t} t^{z-1}\mathrm{d}t, \quad \mathrm{Re}(z) > 0, \tag{13}$$

A fenti definíció segítségével lássuk be hogy

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x). \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma(x+1) &= \int_0^{\infty} \underbrace{\mathrm{e}^{-t}}_{v'} \underbrace{t^x}_{u} \mathrm{d}t && (15)\\
&= \underbrace{\left[t^x(-\mathrm{e}^{-t})\right]_0^{\infty}}_{0} - \int_0^{\infty} \underbrace{-\mathrm{e}^{-t}}_{v} \underbrace{xt^{x-1}}_{u'} \mathrm{d}t && (16)\\
&= x\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-t} t^{x-1}\mathrm{d}t && (17)\\
&= x\Gamma(x) && (18)
\end{aligned}$$

ahol kihasználtuk a parciális integrálás szabályát

$$\int u(t)v'(t)\mathrm{d}t = u(t)v(t) - \int u'(t)v(t)\mathrm{d}t \tag{19}$$

és az alábbi két ismert összefüggést

$$\int \mathrm{e}^{\alpha t}\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{e}^{\alpha t}}{\alpha}, \tag{20}$$

$$\partial_t t^\alpha = \alpha t^{\alpha-1}. \tag{21}$$

Lássuk be a következő két összefüggést is!

$$\Gamma(1) = 1 \tag{22}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \tag{23}$$

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t}t^{1-1}\mathrm{d}t \tag{24}$$

$$= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t}\mathrm{d}t \tag{25}$$

$$= [-\mathrm{e}^{-t}]_0^\infty = 1 \tag{26}$$

Felhasználva a (14) és (22) összefüggéseket a $\Gamma(x)$ függvényt tetszőleges pozitív egész számokra meghatározhatjuk:

$$\Gamma(2) = 1\Gamma(1) = 1 \tag{27}$$

$$\Gamma(3) = 2\Gamma(2) = 2\cdot 1 \tag{28}$$

$$\Gamma(4) = 3\Gamma(3) = 3\cdot 2\cdot 1 \tag{29}$$

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad n \in \mathbb{N} \tag{30}$$

$$\Gamma(1/2) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t}t^{1/2-1}\mathrm{d}t \tag{31}$$

$$= \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{t^{1/2}}\mathrm{d}t \tag{32}$$

Hajtsuk végre a következő változó cserét:

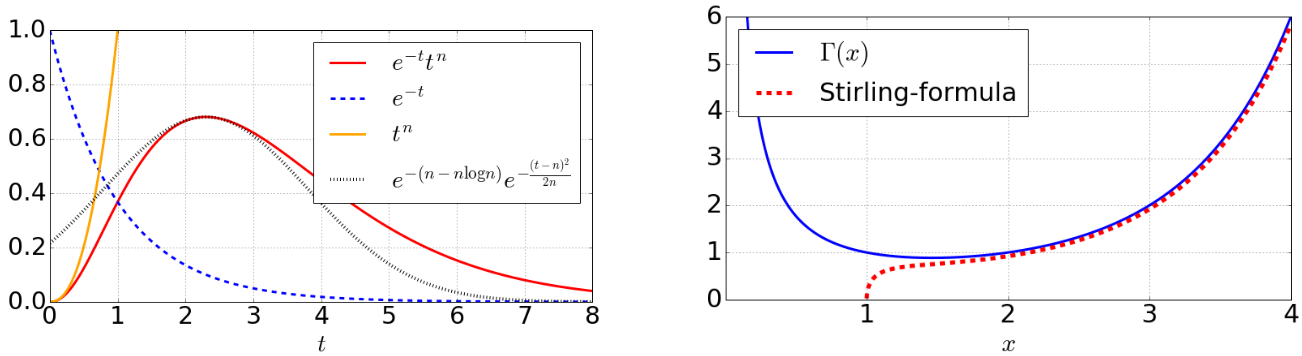
$$u = t^{1/2}, \tag{33}$$

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2}\frac{1}{t^{1/2}}. \tag{34}$$

Így kapjuk hogy

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{t^{1/2}}\mathrm{d}t = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-u^2}2\mathrm{d}u, \tag{35}$$

$$= \int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-u^2}\mathrm{d}u = \sqrt{\pi}. \tag{36}$$



(a) A Stirling-formula levezetése során alkalmazott közelítés

(b) A Stirling-formula és a Γ-függvény

2. ábra. Stirling közelítés

Termodinamikai határesetek vizsgálata során sokszor fogunk találkozni olyan esetekkel amikor a $\Gamma(n)$ függvényt a $n \gg 1$ értékekre kell kiértékelnünk.

Lássuk be a következő hasznos közelítő formulát:

Stirling-formula:

$$n! = n^n \mathrm{e}^{-n}\sqrt{2\pi n}\left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)\right) \tag{37}$$

$$\begin{aligned} n! = \Gamma(n+1) &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} t^n \mathrm{d}t \\ &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t + n\ln t}\mathrm{d}t \\ &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-f_n(t)}\mathrm{d}t, \end{aligned} \tag{38}$$

$$f_n(t) = t - n\ln t. \tag{39}$$

Fejtsük sorba az $f_n(t)$ függvényt a minimuma körül!

$$\partial_t f_n(t) = 1 - \frac{n}{t}, \tag{40}$$

$$\partial_t f_n(t_0) = 0 \to t_0 = n. \tag{41}$$

Elegendő elvégezni a sorfejtést másod rendig. Azaz a következő közelítéssel élünk:

$$f_n(t) \approx f_n(t_0) + \partial_t f_n(t_0)\,(t - t_0) + \frac{1}{2}\partial_t^2 f_n(t_0)\,(t-t_0)^2\,, \tag{42}$$

$$\partial_t^2 f_n(t) = \frac{n}{t^2} \to \partial_t^2 f_n(t_0) = \frac{n}{n^2} = \frac{1}{n}, \tag{43}$$

$$f_n(t) \approx n - n\ln n + \underbrace{\partial_t f_n(t_0)\,(t-t_0)}_{\text{by def=0}} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{n}\right)(t-n)^2\,. \tag{44}$$

Vissza írva ezt a (38) kifejezésbe:

$$\begin{aligned} n! &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} t^n \mathrm{d}t \\ &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-f_n(t)}\mathrm{d}t \\ &\approx \mathrm{e}^{-(n - n\ln n)}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{(t-n)^2}{2n}}\mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{45}$$

A kifejezésben szereplő integrál alsó határát kiterjeszthetjük $-\infty$-ig hiszen feltettük hogy $n \gg 1$:

$$\begin{aligned} n! &\approx \mathrm{e}^{-(n-n\ln n)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(t-n)^2}{2n}} \mathrm{d}t \\ &= \mathrm{e}^{-(n-n\ln n)}\sqrt{2\pi n}. \end{aligned} \tag{46}$$

Ahol felhasználtuk a Gauss-integrálra vonatkozó (8) azonosságot. A kapott eredmény pedig nem más mint maga a (37) Stirling-formula. Sokszor fogunk találkozni a Stirling-formula logaritmusával:

$$\ln n! \approx n\ln n - n + \frac{1}{2}\ln(2\pi n) \tag{47}$$

$$\ln\Gamma(n) \approx n\ln n - n + \mathcal{O}(\ln n) \tag{48}$$

3. D-dimenziós gömb térfogata

Sokszor szükségünk lesz több dimenziós integrálok elvégzésére. Ezen integrálok elvégzésében rendszerint segítségünkre lesz az adott dimenzióbeli gömb térfogata. Vizsgáljuk meg hát hogy hogyan függ a térfogat kifejezése a dimenziótól:

dimenzió	$V_D(r)$	$S_D(r)$
1	$2r$	
2	πr^2	$2\pi r$
3	$\frac{4}{3}\pi r^3$	$4\pi r^2$
$\vdots$		
D	$C_D r^D$	$C_D D r^{D-1}$

Egy adott dimenzióban egy adott sugarú gömb térfogata $V_D(r)$ és a felülete között az alábbi általános összefüggés teremt kapcsolatot:

$$V_D(r) = \int_0^r S_D(\varrho)\mathrm{d}\varrho, \tag{49}$$

$$C_D r^D = C_D D \int_0^r \varrho^{D-1}\mathrm{d}\varrho \tag{50}$$

Határozzuk meg $C_D$értékét! Induljunk ki D darab Gauss-integrál szorzatából:

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x\right]^D = \pi^{D/2} \tag{51}$$

Mivel az integrandus „gömb szimmetrikus” ezért elég csak a sugár irányú integrálra koncentrálnunk.

$$\begin{aligned} \pi^{D/2} &= \int \underbrace{\mathrm{e}^{-\left(x_1^2+x_2^2+\cdots+x_D^2\right)}}_{e^{-r^2}} \overbrace{\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_1\ldots\mathrm{d}x_D}^{DC_D r^{D-1}\mathrm{d}r} \\ &= DC_D \int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{D-1}\mathrm{d}r \end{aligned} \tag{52}$$

Alkalmazzunk egy változó cserét:

$$u = r^2, \tag{53}$$

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} = 2r \to \mathrm{d}u = 2r\mathrm{d}r.$$

$$\mathrm{d}r = u^{-\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{d}u}{2} \tag{54}$$

$$\pi^{D/2} = DC_D \int_0^\infty e^{-u} u^{\frac{D}{2}-1} \frac{\mathrm{d}u,}{2} \tag{55}$$

$$\pi^{D/2} = C_D \frac{D}{2} \Gamma\left(\frac{D}{2}\right) = C_D \Gamma\left(\frac{D}{2}+1\right). \tag{56}$$

A keresett együttható tehát:

$$C_D = \frac{\pi^{D/2}}{\Gamma\left(\frac{D}{2}+1\right)}. \tag{57}$$

Kiértékelve ezt az összefüggést vissza kapjuk a már ismert együtthatókat:

$$D = 1 \to C_1 = \frac{\pi^{1/2}}{\Gamma(3/2)} = \frac{\pi^{1/2}}{\frac{1}{2}\Gamma(1/2)} = 2 \tag{58}$$

$$D = 2 \to C_2 = \frac{\pi^{2/2}}{\Gamma(2)} = \pi \tag{59}$$

$$D = 3 \to C_3 = \frac{\pi^{3/2}}{\Gamma\left(\frac{3}{2}+1\right)} = \frac{\pi^{3/2}}{\frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} = \frac{\pi^{3/2}}{\frac{3}{2}\times\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} = \frac{\pi}{\frac{3}{2}\times\frac{1}{2}} = \frac{4}{3}\pi \tag{60}$$

4. Pauli mátrixok és $\frac{1}{2}$-spin algebra

4.1. A $\hat{\rho}$ sűrűségmátrix általános tulajdonságai

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha w_\alpha \left|\alpha\right\rangle \left\langle\alpha\right| \tag{61}$$

Feltesszük hogy a bázis teljes ortonormált rendszert alkot:

$$\left\langle\beta\right.\left|\alpha\right\rangle = \delta_{\alpha,\beta}. \tag{62}$$

és természetesen a $w_\alpha > 0$ súlyok összege egységnyi:

$$\sum_\alpha w_\alpha = 1. \tag{63}$$

Ezekből

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \tag{64}$$

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1, \tag{65}$$

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2 \leq 1. \tag{66}$$

Az utolsó egyenlőség tiszta állapotokra áll fenn, azaz ha igaz, hogy

$$\hat{\rho} = \left|\varphi\right\rangle \left\langle\varphi\right|. \tag{67}$$

4.2. Két állapotú kvantum rendszerek

$$\left|\uparrow\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left|\downarrow\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{68}$$

$$\left|\varphi\right\rangle = a\left|\uparrow\right\rangle + b\left|\downarrow\right\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{69}$$

$$\left\langle\varphi\right.\left|\varphi\right\rangle = 1, \to aa^* + bb^* = 1 \tag{70}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{71}$$

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{72}$$

II. rész
Mikrokanonikus sokaság

Állapotok száma adott E energia alatt:

$$\text{Klasszikus rendszer: } \Omega_0(E) = \frac{1}{h^N} \int\limits_{H(\mathbf{p},\mathbf{q})<E} (\mathrm{d}p\mathrm{d}q)^N \tag{73}$$

$$\text{Kvantumos rendszer: } \Omega_0(E) = \sum_{E_n<E} 1 = \sum_n \Theta\left(E - E_N\right) \tag{74}$$

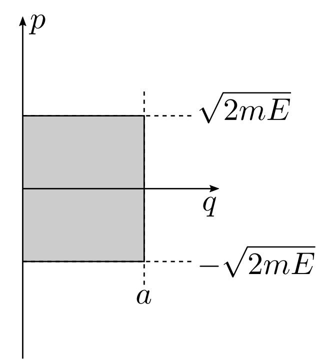
Weyl-szabály:

$$h = \mathrm{d}p\mathrm{d}q \tag{75}$$

5. Egy darab, dobozba zárt, egy dimenziós részecske

5.1. Klasszikus

$$\Omega_0\left(E\right) = \int\limits_{\frac{p^2}{2m}<E} \frac{\mathrm{d}p\mathrm{d}q}{h} = \frac{2a}{h}\sqrt{2mE} \tag{76}$$



3. ábra. Klasszikus dobozba zárt részecske fázistere

5.2. Kvantumos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi = E\psi \tag{77}$$

$$\psi_k^\infty(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{78}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{79}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{80}$$

a) Zárt peremfeltétel

$$\psi\left(0\right) = \psi\left(a\right) = 0 \tag{81}$$

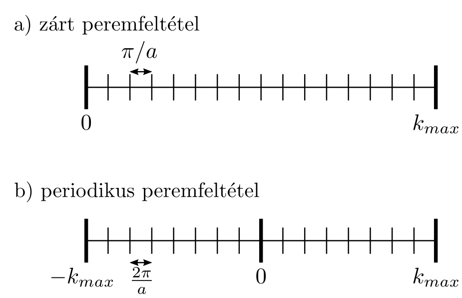
$$\psi_k^{\text{zárt}}\left(x\right) = \frac{\psi_k^\infty\left(x\right) - \psi_{-k}^\infty\left(x\right)}{2\mathrm{i}} = \sin\left(kx\right) \tag{82}$$

$$\psi(a) = 0 \to k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, \dots n_{max} \tag{83}$$

$$k_{max} = \frac{n_{max}\pi}{a} \tag{84}$$

$$E_{max} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_{max}\pi}{a}\right)^2 \tag{85}$$

$$\Omega_0\left(E\right) = \left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}\right] = \left[\frac{2a}{h}\sqrt{2mE}\right] \tag{86}$$



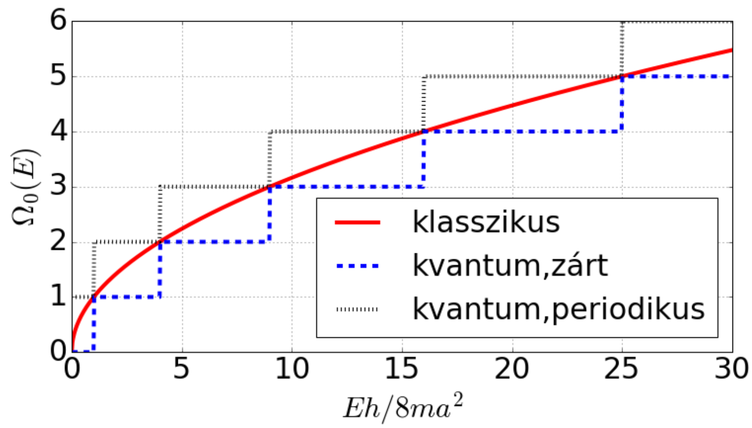
4. ábra. Kvantumos dobozba zárt részecske hullámszámtérben

b) Periodikus peremfeltétel

$$\psi_k^{\text{periodikus}}\left(x\right) = \psi_k^\infty(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{87}$$

$$\psi(x+a) = \psi(x), \tag{88}$$
$$\rightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx+\mathrm{i}ka} \tag{89}$$
$$\rightarrow ka = 2n\pi \tag{90}$$
$$n = -n_{max} \dots 0 \dots n_{max} \tag{91}$$

$$\Omega_0(E) = 2\left[\frac{a}{2\pi}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right] + 1 = 2\left[\frac{a}{h}\sqrt{2mE}\right] + 1 \tag{92}$$

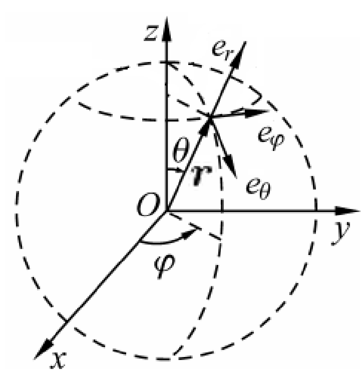


5. ábra. Dobozba zárt részecske állapotainak száma

6. Rotátor

A rotátor egy egy térbeli tömegpont melynek r távolsága a koordináta rendszer középpontjától időben állandó.

6.1. Klasszikus



6. ábra. Rotátor és a gömbi koordináta rendszer

$$\begin{aligned} x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\ y &= r\sin\vartheta\sin\varphi \\ z &= r\cos\vartheta \end{aligned} \tag{93}$$

$$\begin{aligned} \dot{x} &= r\left(\dot{\vartheta}\cos\vartheta\cos\varphi - \dot{\varphi}\sin\vartheta\sin\varphi\right) \\ \dot{y} &= r\left(\dot{\vartheta}\cos\vartheta\sin\varphi + \dot{\varphi}\sin\vartheta\cos\varphi\right) \\ \dot{z} &= -r\dot{\vartheta}\sin\vartheta \end{aligned} \tag{94}$$

$$\begin{aligned} \dot{x}^2 &= r^2\left(\dot{\vartheta}^2\cos^2\vartheta\cos^2\varphi + \dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta\sin^2\varphi - \frac{\dot{\vartheta}\dot{\varphi}\sin(2\vartheta)\sin(2\varphi)}{2}\right) \\ \dot{y}^2 &= r^2\left(\dot{\vartheta}^2\cos^2\vartheta\sin^2\varphi + \dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta\cos^2\varphi + \frac{\dot{\vartheta}\dot{\varphi}\sin(2\vartheta)\sin(2\varphi)}{2}\right) \\ \dot{z}^2 &= r^2\dot{\vartheta}^2\sin^2\vartheta \end{aligned} \tag{95}$$

$$\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2\right) = r^2\left[\dot{\vartheta}^2\underbrace{\left(\cos^2\vartheta\cos^2\varphi+\cos^2\vartheta\sin^2\varphi+\sin^2\vartheta\right)}_{1}+\dot{\varphi}^2\overbrace{\left(\sin^2\vartheta\sin^2\varphi+\sin^2\vartheta\cos^2\varphi\right)}^{\sin^2\vartheta}\right] \tag{96}$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + y^2 + \dot{z}^2\right) \tag{97}$$

$$= \frac{1}{2}mr^2\left[\dot{\vartheta}^2 + \dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta\right] \tag{98}$$

$$= \frac{1}{2}\Theta\left[\dot{\vartheta}^2 + \dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta\right] \tag{99}$$

$$\mathcal{L} = E_{kin}, \to p_\vartheta = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\vartheta}} = \Theta\dot{\vartheta}, \quad p_\varphi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} = \Theta\sin^2\vartheta\dot{\varphi} \tag{100}$$

$$H = E_{kin} = \frac{1}{2\Theta}\left(p_\vartheta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\vartheta}\right) \tag{101}$$

6.2. Kvantumos

7. Harmonikus oszcillátor