Csillag Barnabás
COTNU3
2. ZH kidolgozás

(1.) A spin statisztikai tétel alapján ha egy részecske spinje $\frac{3}{2}$, akkor az fermion. Ezen spin vetülete egy irányba lehet $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ $\Rightarrow$ ez négyszeres degenerációt jelent az állapotok felösszegzése során.

Alkalmazzuk periodikus határfeltételt! Ekkor a hullámszám:

$$k_{x,y,z,zs} = n_{x,y,z,zs} \cdot \frac{2\pi}{L}$$

Ha fel akarunk írni egy összegzést valamilyen mennyiségre:

állapotokra összegzés

$$\sum_i (\dots) \longrightarrow 4 \cdot \frac{V}{(2\pi)^4} \int (\dots)\, d^4 k \longrightarrow \frac{V}{2^3 \pi^2} \int k^3 (\dots)\, dk \longrightarrow$$

áttérhetünk hullámszám változóra, és ha elég sűrűn vannak az energiaszintek, akkor integrálra

áttérünk gömbi koordinátákra, és elvégezzük a szögek szerinti integrálokat

$$V_d(R) = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)} R^d \qquad d = 4$$

$$\Rightarrow \frac{\pi^2 \cdot 3 \cdot R^3}{3 \cdot 2 \cdot \Gamma(1)} R^3 = \frac{\pi^2 R^3}{2}$$

négy dimenziós gömb esetén ezt adja a szögek szerinti integrál, ha a sugár szerintit meghagyjuk

$$p = \hbar k$$

$$\longrightarrow \frac{V}{8\pi^2 \hbar^4} \int p^3 (\dots)\, dp \longrightarrow \int \frac{V \varepsilon^{3/5}}{20 \hbar^4 \alpha^{8/5} \pi^2} (\dots)\, d\varepsilon$$

$$p = \left(\frac{\varepsilon}{\alpha}\right)^{2/5}$$

$$dp = \frac{1}{\alpha^{2/5}} \cdot \frac{2}{5} \varepsilon^{-3/5}\, d\varepsilon$$

$\Rightarrow$ az állapotsűrűség: $\boxed{D(\varepsilon) = \frac{V \varepsilon^{3/5}}{20 \hbar^4 \alpha^{8/5} \pi^2}}$

1. (folytatás)

Csillag Barnabás
COTNU3
2. ZH pótdolgozat

$$N=\int_0^\infty D(\varepsilon)f(\varepsilon)\,d\varepsilon \longrightarrow \text{fermion: } f(\varepsilon)=\frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$\mu=0$ esetet vizsgáljuk:

$$N=\int_0^\infty \frac{V\varepsilon^{3/5}}{20\hbar^4\alpha^{8/5}\pi^2}\,\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon}+1}\,d\varepsilon \overset{x=\beta\varepsilon}{=} \frac{V\cdot(k_BT)^{8/5}}{20\hbar^4\alpha^{8/5}\pi^2}\underbrace{\int_0^\infty \frac{x^{3/5}}{e^{-x}+1}\,dx}_{F_+(8/5,0)}$$

Órai anyag: $F_+(y,\lambda=0)=(1-2^{1-y})\cdot\zeta(y)$ ← Riemann-féle zeta függvény

$$\Rightarrow \boxed{T_{\mu=0}=\frac{1}{k_B}\left(\frac{N}{V}\cdot\frac{20\hbar^4\alpha^{8/5}\pi^2}{(1-2^{-3/8})\,\zeta\left(\frac{8}{5}\right)}\right)^{5/8}}$$

(2.) A CCl_4 (szén-tetraklorid) egy öt atomos molekula.

Csillag Barnabás
COTNU3
2. ZH kidolgozás

Mivel magas hőmérsékleten vagyunk, ezért a molekula viselkedését vizsgálhatjuk klasszikusan. Egy három dimenziós mozgó, kettőnél több atomos molekulának $f_t = 3$ transzlációs és $f_r = 3$ rotációs szabadsági foka van.

Egy öt atomból álló molekula teljes mozgását lineáris közelítésben egy 15×15-ös mátrix írja le. Ennek van 15 sajátértéke, amelyben a transzlációs és rotációs mozgáshoz tartozó sajátértékek nullák, így $15 - 6 = 9$ rezgési módus van.

Lineáris közelítésben a rezgések harmonikus oszcillátoroknak feleltethetők meg. Lineáris molekula esetén a rezgéshez tartozó Hamilton-függvény:

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

Többatomos molekula esetén a Hamilton-függvény ugyanilyen alakra hozható a megfelelő hely- és impulzuskoordináták lineárkombinációját véve, így minden rezgési módusra két kvadratikus tag jut.

A félév első felében gyakorlaton tanultuk, hogy ahány kvadratikus tag van a molekulák rezgését leíró Hamilton-függvényben, annyi rezgési szabadsági foka van a molekulának. Így tehát az összes szabadsági fok száma:

$$f = f_r + f_t + f_v = 3 + 3 + 2 \cdot 9 = 24$$

A gáz állandó térfogaton vett moláris hőkapacitása innen meghatározható az ekvipartíció-tétel segítségével:

$$c_V = \frac{C_V}{n} = \frac{1}{n} \frac{\partial E}{\partial T}\bigg|_{V,N} = \frac{f}{2} N_A k_B = \underline{\underline{12 N_A k_B}}$$

Csillag Barnabás
COTNU3
2. ZH kidolgozás

(4.) $f(x;\alpha) = C\,\alpha^{-x}$

$$\langle V \rangle_\alpha = \frac{A}{\ln(\alpha)}$$

A valószínűségi sűrűségfüggvénynek normáltnak kell lennie:

$$\int_0^\infty f(x;\alpha)\,dx \overset{!}{=} 1 \Rightarrow \int_0^\infty C\,\alpha^{-x}\,dx = C\int_0^\infty e^{-\ln(\alpha)x}\,dx = C\left[-\frac{e^{-\ln(\alpha)x}}{\ln(\alpha)}\right]_0^\infty = \frac{C}{\ln(\alpha)} \overset{!}{=} 1$$

$\alpha \overset{!}{>} 0$, mert csak itt értelmezhető a logaritmus függvény

$$\hookrightarrow \boxed{C = \ln(\alpha)}$$

$$\Rightarrow f(x;\alpha) = \ln(\alpha)\cdot e^{-\ln(\alpha)x}$$

A statisztikus fizika variációs elve alapján a legmegfelelőbb "α" paramétert az határozza meg, hogy a következő módon képzett szabadenergiának hol van minimuma:

$$F = \langle E \rangle - T S_{inf} \longrightarrow \langle E \rangle = \langle V \rangle_\alpha$$

$$S_{inf}[f] = -k_B\left\{\int_0^\infty f(x;\alpha)\ln(f(x;\alpha))\,dx\right\} = -k_B\int_0^\infty \ln(\alpha)\,e^{-\ln(\alpha)x}\left(\ln(\ln(\alpha)) - \ln(\alpha)x\right)dx =$$

$$= -k_B\left\{\ln(\ln(\alpha)) - \int_0^\infty \ln(\alpha)^2 x\, e^{-\ln(\alpha)x}\,dx\right\} =$$

$$= -k_B\left\{\ln(\ln(\alpha)) - \underbrace{\left[\ln(\alpha)x\,e^{-\ln(\alpha)x}\right]_0^\infty}_{\emptyset} + \underbrace{\int_0^\infty \ln(\alpha)\,e^{-\ln(\alpha)x}\,dx}_{1}\right\} = -k_B\left(\ln(\ln(\alpha)) - 1\right)$$

$$\Rightarrow F = \langle E \rangle - T S_{inf} = \frac{A}{\ln(\alpha)} + k_B T\left[\ln(\ln(\alpha)) - 1\right]$$

Ha F-nek extrémuma van α^*-ban, akkor $\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha}\right|_{\alpha^*} \overset{!}{=} 0$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha} = -\frac{A}{\ln(\alpha)^2}\frac{1}{\alpha} + k_B T\frac{1}{\ln(\alpha)}\frac{1}{\alpha}$$

$$\hookrightarrow k_B T \ln(\alpha^*) = A$$

$$\boxed{\alpha^* = e^{\frac{A}{k_B T}}}$$

Csillag Barnabás,
COTNU3
2. ZH indoklása

(4.) (folytatás)

F-nek a^* helyen minimuma van, ha $\left.\frac{\partial^2 F}{\partial a^2}\right|_{a^*} > 0$

$$\hookrightarrow \left.\frac{\partial^2 F}{\partial a^2}\right|_{a^*} = \frac{2A}{\ln(a^*)^3}\frac{1}{a^{*2}} + \frac{A}{\ln(a^*)^2}\frac{1}{a^{*2}} - k_B T \frac{1}{\ln(a^*)^2}\frac{1}{a^{*2}} - k_B T\frac{1}{\ln(a^*)}\frac{1}{a^{*2}} \overset{!}{>} 0$$

$$\Rightarrow \frac{2A}{\ln(a^*)^2} + \frac{A}{\ln(a^*)} - \frac{k_B T}{\ln(a^*)} - k_B T \overset{!}{>} 0 \qquad a^* = e^{\frac{A}{k_B T}}$$

$$\frac{2(k_B T)^2}{A} + k_B T - \frac{(k_B T)^2}{A} - k_B T \overset{!}{>} 0$$

$$\hookrightarrow \frac{(k_B T)^2}{A} \overset{!}{>} 0$$

$\Rightarrow a^* = e^{\frac{A}{k_B T}}$ minimumhelye F-nek, ha $A > 0$, és ezen értéken a^* a legmegfelelőbb választás "a"-ra.