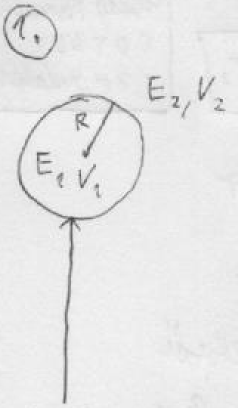
Gillay Barnabás
COTNV3
1. ZH kidolgozás

1.



Feltesszük, hogy a buborék gömb alakú:

$$V = \frac{4R^3\pi}{3} \longrightarrow R = \left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{1/3}$$

$$A = 4R^2\pi \longrightarrow A = 4\cdot\left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{2/3}\cdot\pi$$

$$E_f(V_1) = \alpha A = \alpha\cdot 4\cdot\left(\frac{3V_1}{4\pi}\right)^{2/3}\pi$$

Tekintsük a rendszert zártnak! Ekkor a teljes energia, és a teljes térfogat

$$E = E_1 + E_2 + E_f(V_1)$$

$$V = V_1 + V_2$$

Egyensúlyban azon termodinamikai mennyiségek fogják jellemezni a rendszert, amelyek esetében az állapotszám a legnagyobb. Az állapotszám az entrópia logaritmusával arányos, tehát az entrópia maximumánál kell keresni a megoldást.

$$S(E_1, E_2, V_1, V_2) = S_1(E_1, V_1) + S_2(E_2, V_2)$$

Mivel a rendszer zárt, figyelembe kell vennünk bizonyos kényszerfeltételeket. Ezt Lagrange-multiplikátorok segítségével tehetjük meg:

$$\Phi_1(E_1, E_2, V_2) = E_1 + E_2 + E_f(V_1) - E = 0$$

$$\Phi_2(V_1, V_2) = V_1 + V_2 - V = 0$$

$$\Rightarrow S_{teljes} = S + \lambda_1\Phi_1 + \lambda_2\Phi_2$$

Az entrópiának ott lesz maximuma, ahol a deriváltjai nullák

$$\frac{\partial S_{teljes}}{\partial E_1} = \frac{\partial S}{\partial E_1} + \lambda_1\frac{\partial \Phi_1}{\partial E_1} + \lambda_2\frac{\partial \Phi_2}{\partial E_2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_1}{\partial E_1} + \lambda_1 = 0$$

$$\frac{\partial S_{teljes}}{\partial E_2} = \frac{\partial S}{\partial E_2} + \lambda_1\frac{\partial \Phi_1}{\partial E_2} + \lambda_2\frac{\partial \Phi_2}{\partial E_2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_2}{\partial E_2} + \lambda_1 = 0$$

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

$$\Rightarrow -\lambda_1 = \frac{\partial S_1}{\partial E_1} = \frac{\partial S_2}{\partial E_2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2} \Rightarrow \boxed{T_1 = T_2 = T}$$

$$\Rightarrow \lambda_1 = -\frac{1}{T}$$

$$\frac{\partial S_{teljes}}{\partial V_1} = \frac{\partial S}{\partial V_1} + \lambda_1\frac{\partial \Phi_1}{\partial V_1} + \lambda_2\frac{\partial \Phi_2}{\partial V_1} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_1}{\partial V_1} + \lambda_2 + \lambda_1\frac{\partial E_f}{\partial V_1} = 0$$

$$\frac{\partial S_{teljes}}{\partial V_2} = \frac{\partial S}{\partial V_2} + \lambda_1\frac{\partial \Phi_1}{\partial V_2} + \lambda_2\frac{\partial \Phi_2}{\partial V_2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_2}{\partial V_2} + \lambda_2 \longrightarrow$$ általánosan $\left.\frac{dS}{dV}\right|_{E,N} = \frac{P}{T}$

$$\Rightarrow \lambda_2 = -\frac{P_2}{T}$$

1. (folytatás)

$$\Rightarrow \frac{\partial S_1}{\partial V_1} + \lambda_2 + \lambda_1 \frac{\partial E_f}{\partial V_1} = \frac{P_1}{T} - \frac{P_2}{T} - \frac{1}{T}\underbrace{\frac{\partial E_f}{\partial V_1}} = 0 \Rightarrow \boxed{P_1 = P_f + P_2}$$

$$P_f = \alpha \cdot 4 \cdot \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} \frac{2}{3} V^{-1/3} \pi$$

$$\hookrightarrow P_f \sim \frac{1}{R}$$

Végeredményben tehát azt kaptuk, hogy a külső és a belső hőmérséklet kiegyenlítődik, a belső nyomás pedig egyenlő lesz a külső nyomás és a buborék felületi feszültsége okozta nyomás összegével.

Csillag Barnabás,
COTNV3
1. ZH feladatmegoldás

(2.) Legyen N darab részecske!

$$\varepsilon_i = \pm \Delta$$

N_- darab részecske esetén $\varepsilon_i = -\Delta$, N_+ darab részecske esetén $\varepsilon_i = +\Delta$.

Ekkor a teljes energia:
$$\left.\begin{aligned} E &= N_+ \Delta - N_- \Delta \\ N &= N_+ + N_- \end{aligned}\right\} \quad \frac{N + E/\Delta}{2} = N_+ , \quad \frac{N - E/\Delta}{2} = N_-$$

N darab részecskéből $\frac{N!}{N_-! \cdot N_+!}$ -féleképpen lehet N_+ számú részecskét kiválasztani, így az állapotszám:

$$\boxed{\Omega_0(E) = \frac{N!}{\frac{N - E/\Delta}{2}! \; \frac{N + E/\Delta}{2}!}}$$

Ez az E energiájú makroállapothoz tartozó mikroállapotok száma.

Az entrópia:
$$S = k_B \ln\left(\Omega_0(E)\right) \underset{\text{Stirling-formula}}{=} k_B \left\{ N \ln(N) - N - \frac{N - E/\Delta}{2} \ln\left(\frac{N - E/\Delta}{2}\right) + \frac{N - E/\Delta}{2} + \right.$$
$$\left. - \frac{N + E/\Delta}{2} \ln\left(\frac{N + E/\Delta}{2}\right) + \frac{N + E/\Delta}{2} \right\} = k_B \left\{ N \ln N - \frac{N - E/\Delta}{2} \ln\left(\frac{N - E/\Delta}{2}\right) - \frac{N + E/\Delta}{2} \ln\left(\frac{N + E/\Delta}{2}\right) \right\}$$

$$\left.\frac{\partial S}{\partial E}\right|_{V,N} = \frac{1}{T}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{T} = k_B \left\{ \frac{1}{2\Delta} \ln\left(\frac{N - E/\Delta}{2}\right) - \frac{N - E/\Delta}{2} \frac{2}{N - E/\Delta} \cdot \frac{-1}{2\Delta} - \frac{1}{2\Delta} \ln\left(\frac{N - E/\Delta}{2}\right) + \right.$$
$$\left. - \frac{N + E/\Delta}{2} \frac{2}{N + E/\Delta} \frac{1}{2\Delta} \right\} = k_B \left\{ \frac{1}{2\Delta} \ln\left(\frac{N - E/\Delta}{N + E/\Delta}\right) + \frac{1}{2\Delta} - \frac{1}{2\Delta} \right\}$$

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{2\Delta}{k_B \ln\left(\frac{N - E/\Delta}{N + E/\Delta}\right)}}$$

Csillag Barnabás
COTNV3
1. ZH megoldások

(3.) Energiaszintek: $E_n = \varepsilon_0 n$, degeneráció: $g_n = n$

→ így az állapotösszeg: $Z = \sum\limits_{n=0}^{\infty} g_n e^{-\beta E_n} = \sum\limits_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta \varepsilon_0 n} =$

$$= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{d}{d\beta} e^{-\beta\varepsilon_0 n} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{d}{d\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_0 n} \overset{\uparrow}{=} -\frac{1}{\varepsilon_0}\frac{d}{d\beta}\frac{1}{1-e^{-\beta\varepsilon_0}} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_0}}{\left(1-e^{-\beta\varepsilon_0}\right)^2}$$

végtelen mértani sor

$$\Rightarrow \boxed{Z = \frac{e^{-\beta\varepsilon_0}}{\left(1-e^{-\beta\varepsilon_0}\right)^2}} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Az energia várható értéke:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\beta\varepsilon_0 - 2\ln\left(1-e^{-\beta\varepsilon_0}\right)\right) =$$

$$= \varepsilon_0 + \frac{2\, e^{-\beta\varepsilon_0}\cdot\varepsilon_0}{1-e^{-\beta\varepsilon_0}} = \varepsilon_0 + \frac{2\varepsilon_0}{e^{\beta\varepsilon_0}-1}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = \varepsilon_0 + \frac{2\varepsilon_0}{e^{\beta\varepsilon_0}-1}}$$ ennyi a belső energia várható értéke.

Alacsony hőmérsékleten: $T \to 0 \Rightarrow \beta \to \infty \Rightarrow \boxed{\langle E \rangle \to \varepsilon_0}$

Magas hőmérsékleten: $T \to \infty \Rightarrow \beta \to 0 \Rightarrow \boxed{\langle E \rangle \to \infty}$

↳ de ha T csak nagyon nagy:

$$e^{\beta\varepsilon_0} \cong 1 + \beta\varepsilon_0 + \dots$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = 2 k_B T + \varepsilon_0}$$

Csillag Barnabás
COTNU3
1. ZH kidolgozás

(4.)

$$\underline{\underline{H}} = \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{2}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$|3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad |4\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2}, \quad \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

(a) Az állapotösszeg: $Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}$, ahol az ε_i-k a $\underline{\underline{H}}$ sajátértékei, így meg kell oldanunk $\underline{\underline{H}}$ sajátértékproblémáját:

$$\det\left(\tfrac{1}{\Delta}\underline{\underline{H}} - \lambda \underline{\underline{1}}\right) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \end{vmatrix} =$$

$$= \lambda^4 - 2\lambda^2 - \lambda^2 - 1 + 1 - 1 - \lambda^2 + 1 = 0 \Rightarrow \lambda^4 = 4\lambda^2 \Rightarrow$$ a sajátértékek: $0, 0, -2, 2$

degeneráció

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i} = 1 + 1 + e^{-2\beta\Delta} + e^{2\beta\Delta} = 2 + 2\,\mathrm{ch}(2\beta\Delta)$$

$$\Rightarrow \boxed{Z(\beta) = 2 + 2\,\mathrm{ch}(2\beta\Delta)}$$

(b) Ha $\underline{\underline{H}}$ és $\underline{\underline{A}}$ kommutálnak, akkor létezik közös sajátvektor rendszerük. Ez alapján érdemes lehet főtengely transzformációt végezni $\underline{\underline{H}}$-n, és ugyanezt végrehajtani $\underline{\underline{A}}$-n:

$\underline{\underline{A}}' = \underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{V}}$, ahol $\underline{\underline{U}}$-ban vízszintesen vannak a sajátvektorok, $\underline{\underline{V}}$-ben pedig függőlegesen.

$$\underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ -\frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{2}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{2}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{2}{\sqrt{2}} \\ 3/2 & 3/2 & 3/2 & 3/2 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{A}}' = \underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{V}} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ -\frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{2}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 3/2 & 3/2 & 3/2 & 3/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 \\ -1/2 & 0 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \\ 1/2 & -1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 \\ -1/2 & 0 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

nem diagonális, mert vannak degenerált sajátértékei

Csillag Barnabás
COTNU3
1. ZH kidolgozás

(4.) (folytatás)

Bár $\underline{\underline{H}}$ sajátértékeit ismerjük, azt nem tudjuk, hogy főtengely-transzformáció esetén melyik sajátérték lesz melyik diagonálelem, így a transzformációt itt is el kell végezni.

$$\underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{H}}' = \underline{\underline{U}}\,\underline{\underline{H}}\,\underline{\underline{V}} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 \\ -1/2 & 0 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \\ 1/2 & -1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 \\ -1/2 & 0 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$\underline{\underline{\rho}}' = \frac{1}{Z} e^{-\beta \underline{\underline{H}}'} = \sum_i \frac{1}{Z} e^{-\beta \varepsilon_i} \underline{\underline{P}}_i'$, ahol $\underline{\underline{P}}_i'$-k $\underline{\underline{H}}'$ projektorai, amelyek mivel $\underline{\underline{H}}'$ diagonális, a következő alakot öltik:

$$\underline{\underline{P}}_1' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{P}}_2' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ \dots$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\rho}}' = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-2\beta\Delta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{2\beta\Delta} \end{pmatrix}.$$

Mivel a trace bázisfüggetlen $Tr(\underline{\underline{\rho}}'\underline{\underline{A}}') = Tr(\underline{\underline{\rho}}\,\underline{\underline{A}}) = \langle A \rangle$

$$\rightarrow \underline{\underline{\rho}}'\underline{\underline{A}}' = \begin{pmatrix} e^{-2\beta\Delta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3e^{2\beta\Delta} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle A \rangle = \frac{e^{-2\beta\Delta} + 3e^{2\beta\Delta} - 4}{2 + 2\,ch(2\beta\Delta)}}$$