ELTE TTK

Statisztikus fizika gyakorlat - feladatok

Olar Alex

2018

1. Lássuk be, hogy ha $0 < a$ valós szám, akkor:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{4a}+c}$$

(1. Gyakorlat)

Egyszerűen belátható, hogy:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx+c}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\left(x^2-\frac{b}{a}x-\frac{c}{a}\right)}dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\left(\left(x-\frac{b}{2a}\right)^2-\frac{b^2}{4a^2}-\frac{c}{a}\right)}dx$$

$$u = \left(x - \frac{b}{2a}\right) \qquad du = dx$$

$$e^{\frac{b^2}{4a}+c}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-au^2}du$$

Az helyettesítés után a Gauss-integrált átírva kapjuk:

$$e^{\frac{b^2}{4a}+c}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-au^2}du = e^{\frac{b^2}{4a}+c}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{1}$$

2. Lássuk be, hogy

$$exp(i\alpha(\vec{a}\vec{\sigma})) = \sigma_0 cos\alpha + i(\vec{a}\vec{\sigma})sin\alpha$$

(2. Gyakorlat.)

Először is vegyük az egyenlet bal oldalát és fejtsóük azt sorba

$$exp(i\alpha(\vec{a}\vec{\sigma})) = \sigma_0 + \frac{(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{a}\vec{\sigma})}{2!}(i\alpha)^2 + \frac{(\vec{a}\vec{\sigma})^3}{3!}(i\alpha)^3 + ...$$

A második tagban felhasználva, hogy:

$$(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{a}\vec{\sigma}) = a^2\sigma_0 + i(\vec{a}\times\vec{a})\vec{\sigma} = a^2\sigma_0$$

Ezt beírva, és a többi tagban is felhasználva, hogy minden párosadik hatványon:

$$(\vec{a}\vec{\sigma})^{2k} = a^{2k}\sigma_0$$

Ebből már egyenesen következik, hogy két részre esik szét a sor:

$$exp(i\alpha(\vec{a}\vec{\sigma})) = \sigma_0 + \frac{a^2}{2!}\sigma_0(i\alpha)^2 + \frac{a^4}{4!}\sigma_0(i\alpha)^4 + ...\frac{a^2(\vec{a}\vec{\sigma})}{3!}(i\alpha)^3 + \frac{a^4(\vec{a}\vec{\sigma})}{5!}(i\alpha)^5 + ...$$

Ebből már szépen látszik, hogy:

$$exp(i\alpha(\vec{a}\vec{\sigma})) = \Big(\sigma_0 + \frac{a^2}{2!}\sigma_0(i\alpha)^2 + \frac{a^4}{4!}\sigma_0(i\alpha)^4 + ...\Big) + \Big(\frac{a^2(\vec{a}\vec{\sigma})}{3!}(i\alpha)^3 + \frac{a^4(\vec{a}\vec{\sigma})}{5!}(i\alpha)^5 + ...\Big) =$$
$$\sigma_0\Big(1 - \frac{a^2\alpha^2}{2!} + \frac{a^4\alpha^4}{4!} - ...\Big) + \frac{1}{a}(\vec{a}\vec{\sigma})\Big(\frac{(i\alpha a)^3}{3!} + \frac{(i\alpha a)^5}{5!} + ...\Big) =$$

$$\sigma_0 cos(\alpha a) + \frac{1}{a}(\vec{a}\vec{\sigma})sin(\alpha a)$$

Azaz, ha $a = 1$, akkor:

$$\exp(i\alpha(\vec{a}\vec{\sigma})) = \sigma_0 cos\alpha + (\vec{a}\vec{\sigma})sin\alpha \tag{2}$$

(Nem tudom, hogy itt a feladat nem kötötte ki, hogy $a = 1$ vagy én számoltam-e el valamit, de átnéztem egy párszor és nem tudom, hogy hol lehet a hiba.)

3. Tekintsünk egy két állapotú rendszer két ($|\alpha\rangle$ és $|\beta\rangle$)) nem ortogonális állapotból ($\langle\alpha|\beta\rangle = x$) p valószínűséggel kevert állapotot. Határozzuk meg $Tr(\rho^2)$! (3. Gyakorlat.)

A feladat szerint a sűrűség-operátor

$$\rho = p\,|\alpha\rangle\langle\alpha| + (1-p)\,|\beta\rangle\langle\beta|$$

Ennek négyzete ekkor:

$$\rho^2 = p^2\,|\alpha\rangle\langle\alpha| + (1-p)^2\,|\beta\rangle\langle\beta| + (p-p^2)\,|\beta\rangle\langle\alpha|\,\langle\beta|\alpha\rangle + (p-p^2)\,|\alpha\rangle\langle\beta|\,\langle\alpha|\beta\rangle$$

Ahol az utóbbi két tagból az egyiket kiírva a jobb oldalról:

$$Tr\Big((p-p^2)\,|\beta\rangle\langle\alpha|\,\langle\beta|\alpha\rangle\Big) = (p-p^2)\Big((\alpha_1\beta_1^* + \alpha_2\beta_2^*)\dot{(}\alpha_1^*\beta_1 + \alpha_2^*\beta_2)\Big) = (p-p^2)|\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2$$

A másik hasonlóra ugyan ez, és beírva, hogy a két állapot szorzata x:

$$Tr\rho^2 = p^2 + (1-p)^2 + 2(p-p^2)|x|^2$$

4. Határozzuk meg a klasszikus állapotok Ω_0 számát adott E energia alatt a következő rendszerekre! (5. Gyakorlat.)

4.1. Pattogó labda - $H = \frac{p^2}{2m} + mgx, \quad 0 \leq x$

Mikrokanonikus eloszlás, ekkor:

$$\Omega_0(E) = \int_{H<E} \frac{dxdp}{h}$$

Mivel E adott így van egy maximális pattogási magassás és egy maximális impulzus is, ameddig az integrálok mennek. Továbbá figyelembe kell venni, hogy a kitérés nem lehet negatív így csak 2 síknegyedre kell integrálni 4 helyett.

$$p(x=0) = p_{max} = \sqrt{2mE}$$

Így p szerint integrálni 0 és p_{max} között kell, míg x megy 0 és $\frac{E}{mg} - \frac{p^2}{2m^2g}$ között a belső integrálban, tehát:

$$\Omega_0(E) = \int_{H<E} \frac{dxdp}{h} = 2\int_0^{\sqrt{2mE}} dp \int_0^{\frac{E}{mg}-\frac{p^2}{2m^2g}} dx \frac{1}{h} =$$

$$= \frac{2}{h}\int_0^{\sqrt{2mE}} dp (\frac{E}{mg} - \frac{p^2}{2m^2g}) = \frac{2}{h}\Big[\frac{E}{mg}p - \frac{p^3}{6m^2g}\Big]_0^{\sqrt{2mE}}$$

Elvégezve a behelyettesítést:

$$\Omega_0(E) = \int_{H<E} \frac{dxdp}{h} = \frac{4}{3}\frac{\sqrt{2mE^3}}{mgh} \tag{3}$$

4.2. Relativisztikus oszcillátor - $H = c|p| + \frac{1}{2}\alpha\omega^2 x^2$

Most a kitérés lehet negatív és így $|p|$ miatt mindenhol két impulzuságra integrálunk 4 síknegyedben. A külső integrál megint p-re megy $p_{max} = \frac{E}{c}$, míg x szerint most $\sqrt{(\frac{E}{c} - p)\frac{2c}{\alpha\omega^2}}$-ig megyünk 0-tól. Ekkor tehát:

$$\Omega_0(E)=\frac{1}{h}2\int_0^{\frac{E}{c}}dp\int_0^{\sqrt{(\frac{E}{c}-p)\frac{2c}{\alpha\omega^2}}}dx\cdot 4=\frac{8}{h}\int_0^{\frac{E}{c}}\sqrt{(\frac{E}{c}-p)\frac{2c}{\alpha\omega^2}}=$$

$$=\frac{8}{h}\int_0^{\frac{E}{c}}\sqrt{\frac{2E}{\alpha\omega^2}-p\frac{2c}{\alpha\omega^2}}=-\frac{8\alpha\omega^2}{2ch}\Big[\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2E}{\alpha\omega^2}-p\frac{2c}{\alpha\omega^2}}^3\Big]_0^{\frac{E}{c}}$$

Ezt behelyettesítve:

$$\Omega_0=\frac{16E}{3hc}\sqrt{\frac{2E}{\alpha\omega^2}} \tag{4}$$

4.3. Relativisztikus pattogó labda - $H=c|p|+mgx, \quad 0\leq x$

Két síknegyedre kell csak integrálni ugyanis csak azokban nem negatív x és a külső integrálnak ismét p-t véve 0-tól $\frac{E}{c}$-ig a belső integrál 0-tól $\frac{E-cp}{mg}$-ig megy, hiszen az adott tartományon p végig pozitív. Ekkor:

$$\Omega_0=\frac{2}{h}\int_0^{\frac{E}{c}}dp\int_0^{\frac{E-cp}{mg}}dx=\frac{2}{h}\Big[\frac{Ep-\frac{p^2c}{2}}{mg}\Big]_0^{\frac{E}{c}}$$

Ebből tehát:

$$\Omega_0=\frac{E^2}{mghc} \tag{5}$$

5. Határozzuk meg a hőmérséklet, a nyomás és a kémiai potenciálra vonatkozó összefüggéseket a klasszikus relativisztikus „foton" gáz esetére! Azaz ha egy részecskére vonatkozó Hamilton-függvény - $H=c|p|$. (6. Gyakorlat.)

N db részecskére a Hamilton-függvény $H=\sum_i c\sqrt{p_{x,i}^2+p_{y,i}^2+p_{z,i}^2}$. Szükség van Ω_0-ra, ezt pedig:

$$\Omega_0=\frac{1}{h^{3N}N!}\int_{H<E}d^{3N}pd^{3N}q=\frac{V^N}{h^{3N}N!}\int_{H<E}d^{3N}p$$

Viszgálva ezt 1 részecskére:

$$\Omega_0^1=\frac{V}{h^3 1!}\int_{c|\vec{p}|<E_1}d^3p=\frac{V}{h^3}\frac{4}{3}\Big(\frac{E_1}{c}\Big)^3\pi$$

Ahol kihasználtam, hogy az impulzusra vett integrál egy gömb térfogata lényegében. Két részecskére:

$$\Omega_0 = \frac{V^2}{h^6 2!} \int_{c(|\vec{p}_1|+\vec{p}_2)<E} d^3p_1 d^3p_2 = \frac{V^2}{h^6 2!} \int_0^{|\vec{p}_1|} d^3p_1^{'} \int_0^{E-c|\vec{p}_1^{'}|} d^3p_2$$

Ebből a belső integrál egy gömb térfogata, így:

$$\Omega_0 = \frac{V^2}{h^6 2!} \int_0^{|\vec{p}_1|} d^3p_1^{'} \int_0^{E-c|\vec{p}_1^{'}|} d^3p_2 =$$

$$= \int_0^{|\vec{p}_1|} 4\pi p_1^{'2} dp_1^{'} \frac{4}{3}(E - c|\vec{p}_1|)^3 \pi \frac{V^2}{h^6 2!} = \frac{V^2}{h^6 2!} 16\pi^2 \frac{(E - c|\vec{p}_1|)^6}{3 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 6} 2 \cdot 1$$

Innen már látható a logika. Nem végzem el a rekurziós lépést, mivel túl sok felesleges gépelésbe kerülne. Jó fizikus módjára higgyük el (kísérleti teológia):

$$\Omega_0^N = \frac{V^N}{h^{3N} N!} (4\pi)^N \frac{(E - c|\vec{p}|)^{3N} \cdot 2^N}{(3N)!} \tag{6}$$

Ekkor már számolhatunk entrópiát $S = k_B T ln(\Omega_0^N)$. A Striling-formulát természetesen használni kell majd $ln(N!) = N - N \cdot ln(N)$. Így tehát:

$$S = k\Big[Nln(V) + Nln(8\pi) + 3Nln(\frac{E}{c}) - 3Nln(h) - Nln(N) + N - 3Nln(3N) + 3N\Big]$$

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}\Big|_{V,N} = k\Big[3N\frac{\frac{1}{c}}{\frac{E}{c}}\Big] = \frac{3Nk}{E}$$

Tehát a hőmérséklet egy ilyen rendszerben $T = \frac{E}{3Nk}$. Felhasználva, hogy $\frac{\partial S}{\partial V}\Big|_{E,N} = \frac{p}{T}$, már a nyomás is számolható, ami egyszerűen

$$p = T\frac{kN}{V}$$

A Gibbs-Duham-relációból $E = TS - pV + \mu N$. Mivel T és p is ismert már, így μ:

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

Ezt már nem helyettesítettem vissza.

6. Határozzuk meg az előző feladatban kiszámított entrópiát mikrokanonikus formalizmusban is! (7. Gyakorlat.)

Mikrokanonikus formalizmusban egy két állapotú renszer $E_1 = 0$-ban g-szeresen degenerált. Ekkor $\Omega_0 = \sum_{\sum_n E_n < E} 1 \approx \Omega(E)$, vagyis:

$$E = -(N-m)\epsilon \approx \Omega(E) = g^M \binom{N}{M}$$

Ahol M a degenerált, 0 energiás állapotban lévő részecskék száma, míg N az összes részecske száma. Ekkor $S = kln(\Omega)$:

$$\begin{aligned} S = k\Big(Mln(g) + ln(\frac{N!}{M!(N-M)!})\Big) = \\ = kMln(g) + k(NlnN - MlnM - (N-M)ln(N-M)) \end{aligned} \tag{7}$$

7. Vizsgáljunk feles spinű részecskék inkoherens szuperpozícióját! Legyen $t = 0$-ban... (10. Gyakorlat.)

$S_z + \frac{\hbar}{2}$ sajátállapota az $(1, 0)$ vektornak feleltethető meg, legyen $|\uparrow\rangle$, míg $S_x - \frac{hbar}{2}$ állapota a $(0, 1)$ vektornak felel meg, legyen ez $|\downarrow\rangle$. A feladat szövege szerint a sűrűségmátrix $t = 0$-ban:

$$\rho_0 = \frac{3}{5} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + \frac{2}{5} |\downarrow\rangle \langle\downarrow|$$

Ekkor az 'állapotokat' idő fejlesztve:

$$|\uparrow\rangle \sim |\uparrow\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = |\uparrow\rangle \Big(\sigma_0 cos\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) - i \cdot sin\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big)\sigma_y\Big)$$
$$|\downarrow\rangle \sim |\downarrow\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = |\downarrow\rangle \Big(\sigma_0 cos\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) - i \cdot sin\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big)\sigma_y\Big)$$

Ahol felhasználtam a feladat által megadott, korábban itt bebizonyított összefüggést. Továbbá, ki kell még használni, hogy σ operátorok hermitikusak, így 'balra is hathatnak':

$$|\uparrow_T\rangle = |\uparrow\rangle cos\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) - sin\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) |\downarrow\rangle$$
$$|\downarrow_T\rangle = |\downarrow\rangle cos\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) + sin\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) |\uparrow\rangle$$

Ezután $t = T$-ben a sűrűségmátrix:

$$\rho_T = \frac{3}{5} |\uparrow_T\rangle \langle\uparrow_T| + \frac{2}{5} |\downarrow_T\rangle \langle\downarrow_T|$$

Amit az eredeti állapotokra visszaírva:

$$\rho_T = \frac{3}{5}\Big(\left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| cos^2\alpha - \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| sin\alpha cos\alpha - sin\alpha cos\alpha \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| + sin^2\alpha \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| \Big) \quad + \\ + \quad \frac{2}{5}\Big(\left|\downarrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| cos^2\alpha + \left|\downarrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| sin\alpha cos\alpha + sin\alpha cos\alpha \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\downarrow\right| + sin^2\alpha \left|\uparrow\right\rangle \left\langle\uparrow\right| \Big)$$

Mivel a feladat az S_z operátor várható értékére kíváncsi $t = T$-ben, így egyből mondhatjuk, hogy:

$$< \hat{S}_z >= Tr(\hat{S}_z\hat{\rho}) = Tr\Big(\frac{3}{5}\Big[\frac{\hbar}{2}cos^2\alpha(\uparrow\uparrow) - sin^2\alpha\frac{\hbar}{2}(\downarrow\downarrow)\Big] \quad + \\ + \quad \frac{2}{5}\Big[-\frac{\hbar}{2}(\downarrow\downarrow)cos^2\alpha + (\uparrow\uparrow)\frac{\hbar}{2}sin^2\alpha\Big]\Big)$$

Ahol felhasználtam, hogy $\hat{S}_z$, $\left|\uparrow\right\rangle$ és $\left|\downarrow\right\rangle$ állapotokat megfordítja és ± 1-el szorozza és természetesen $\alpha = \frac{\mu B}{2}T$. Valamint, hogy a vegyes tagok trace-e 0, továbbá, hogy az ugyanolyan tagok trace-e 1, így:

$$< \hat{S}_z >= Tr(\hat{S}_z\hat{\rho}) = \frac{3}{5}\Big[\frac{\hbar}{2}cos^2\alpha - sin^2\alpha\frac{\hbar}{2}\Big] + \frac{2}{5}\Big[-\frac{\hbar}{2}cos^2\alpha + \frac{\hbar}{2}sin^2\alpha\Big] \quad = \\ = \frac{\hbar}{10}cos^2\Big(\frac{\mu B}{2}T\Big) \tag{8}$$

8. Egy pont részecske két dimenziós mozgást végez. A rendszer Hamilton-operátora... (11. Gyakorlat.)

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + A(x^2 - xy + 3y^2)^2$$

Ekkor felhasználva, hogy $< x_i\partial_j H >= k_B T\delta_{ij}$ tetszőleges változóra igaz kapjuk a következő egyenleteket:

$$< x\partial_x H >= k_B T = 2A < 2x^4 - 3x^3y + 7x^2y^2 - 3y^3x > \\ < y\partial_y H >= k_B T = 2A < 7x^2y^2 - 9y^3x - x^3y + 18y^4 >$$

Valamint ha csak szimplán vesszük $4 < U >$ várható értéket, akkor az:

$$4 < U >= 4 < A(x^2 - xy + 3y^2)^2 >= 2A < 2x^4 + 14x^2y^2 + 18y^4 - 4x^3y - 12xy^3 >$$

Jól látható, hogy ha az előző két egyenletet levonjuk az utóbbiból, akkor kapjuk, hogy:

$$4 < U > -2k_BT = 0 \qquad < U >= \frac{1}{2}k_BT \tag{9}$$

És mivel még p_x és p_y szerinti várható érték is ugyan ennyi a korábbi elv alapján így

$$E = \frac{3}{2}k_BT \tag{10}$$

9. Vizsgáljunk N darab két atomos molekula ideális gázát... (13. Gyakorlat.)

Ekkor $H^{(1)} = \frac{p_1^2+p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}K(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)^2$-ből következik, hogy N db részecskére $H = \sum_i H_i^{(1)}$. Ahhoz, hogy Z-t ki tudjuk számolni nem maradhat ebben az alakban a Hamilton-függvény. Áttérve TKP-i rendszerbe:

$$\vec{r}_0 = \frac{m_1\vec{r}_1 + r_2\vec{m}_2}{m_1 + m_2} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$$

$$\vec{r}_2 - \vec{r}_1 = \vec{R}$$

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_0 - \frac{\vec{R}}{2}$$
$$\vec{r}_2 = \vec{r}_0 + \frac{\vec{2}}{2}$$

Ekkor az új impulzusok:

$$\vec{p}_1 = m\dot{\vec{r}}_1 = m(\dot{\vec{r}}_0 - \frac{\dot{\vec{R}}}{2})$$
$$\vec{p}_2 = m\dot{\vec{r}}_2 = m(\dot{\vec{r}}_0 + \frac{\dot{\vec{R}}}{2})$$

$$\vec{p} = m\dot{\vec{r}}_0$$
$$\vec{P} = m\dot{\vec{R}}$$

Ebből a Hamilton-egyenlet egy molekulára:

$$H^{(1)} = \frac{p^2}{2m} + \frac{P^2}{8m} + \frac{1}{2}K\vec{R}^2$$

Így felírva a kanonikus integrált Z-re:

$$Z = \frac{1}{2^N h^{3N} N!} \int d^3R \int d^3p \int d^3P e^{-\beta H}$$

Mivel a Hamilton-függvény átírásával puszta Gauss-integrálokat kapunk így:

$$Z = \frac{1}{2^N h^{3N} N!} \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{\frac{3N}{2}} \left(\frac{8m\pi}{\beta}\right)^{\frac{3N}{2}} \left(\frac{2\pi}{\beta K}\right)^{\frac{3N}{2}} \sim \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{\frac{9N}{2}}$$

Ekkor $ln(Z)$-ben a 'fontos' tag $\frac{9N}{2}\frac{ln(2m\pi)}{\beta}$, amiből az energia $E = -\partial_\beta ln(Z)$:

$$E = \frac{9N}{2\beta} \tag{11}$$

A szabad energia $-k_B T$-szerese $ln(Z)$-nek. Ez egy szimpla behelyettesítés. A hőkapacitás viszont $\frac{\partial E}{\partial T}$, ami:

$$C = \frac{9N}{2} k_B \tag{12}$$

(Megjegyzés: Itt nem tudom, hogy ez jön-e ki a számolásból, vagy valamit elnéztem, de ugye fura, hogy nem $\frac{6}{2}$ van mindenhol, hanem $\frac{9}{2}$.)

10. Relativisztikus labda átlagos magassága... (14. Gyakorlat.)

Hát a relativisztikus labdára korábban volt, hogy $H = c|p| + mgx, 0 \leq x$. Ebben az esetben lényegében $< x >$-re van szükség. Deriváljunk például x szerint:

$$< x\partial_x H >= k_B T = mg < x > \quad \rightarrow \quad < x >= \frac{k_B T}{mg} \tag{13}$$