ELTE TTK

Statisztikus fizika gyakorlat - feladatok

Olar Alex

2018

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

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

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

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

Először is vegyük az egyenlet bal oldalát és fejtsöük 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:

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

(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 $Tr(\rho^2)$!

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!

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

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 - $H = c|p|$.

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:

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

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!

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 $S = kln(\Omega)$:

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