6. statisztikus fizika gyakorlat

2022. március 28.

1. Tekintsünk két D állandójú rugóval összekapcsolt részecskét, melyek ugyanolyan erősségű rugókkal egy-egy merev falhoz is csatlakoztatva vannak.
   (a) Vezessük be az X tömegközépponti és x relatív koordinátákat, ileltv amegfelelő kanonikus impulzusokat és írjuk át ezek segítségével a Hamilton függvényt!
   (b) Most a megfelelő Gauss integrálok segítsétével mutassuk meg, hog ekkor a relatív és tömegközépponti koordinátákra teljesl az ekvipartíció tétele
   (c) Mutassuk meg továbbá, hogy $\langle Xx \rangle = 0$.
   (d) Ezek segítségével fejezzk ki az eredeit koordináták második momentumait és mutassuk meg, hogy ezekre is érvényben marad az ekvipartíció tétele.
2. Tekintsünk egy H_2O molekulát és annak rezgési módusait, forgáss és transzlációs energiáját.
   (a) A vízmolekula 3 rezgési módussal rendelkezik, melyek frekevenciái $\omega_1 \approx 1.078 \times 10^{14}$, $omega_2 \approx 1.109 \times 10^{14}$, $\omega_3 \approx 4.795 \times 10^{13}$. Számoljuk az ehhez tartozó partciós függvényt és adjuk meg az egyes módusokhoz tartozó tipikus hőmérsékleteket, melyek a kvantumos és klasszikus tartomáynokat szeparálja.
   (b) Becsüljük meg a vízmolekula tehetetlenségi nyomatékát abban az esetben, ha a két H és az O molekulák egy egyenesre esnek.
   (c) Ennek segítségével adjuk meg a partíciós függvény forgási és transzlációs részét és adjuk meg azt a tipiks hőmrésklet skálát, ahol a forgáis rész közelítőleg lerírható klasszikus megközelítéssel.
   (d) Határozzuk meg a hőkapacitást az egyes klasszikus és kvantumos határesetekben.
3. Tekintsünk két elektront, melyek egy a oldalhosszúságú kocka különböző csúcsain helyezkedhetnek el és egymást a szokásos Coulomb törvány szerint taszítják.
   (a) Határozzuk meg a rendszer állapotösszegét!
   (b) Adjuk meg ebből a hely marginális eloszlás függvényét a hőmérséket függvényében (Figyeljnk a normálásra)!
   (c) Határozzuk meg a két elektron közti átlagos távolságot és annak szórását!
4. **Maxwell-Boltzmann eloszlás**
   Vizsgáljuk a háromdimenzióban mozgó szabad O_2 molekulákból álló gáz problémáját annak sebességének tekintetében $T = 300K$-en. Mint ismert a sebesség eloszlást a Maxwell-Boltzmann eloszlás írja le

$$\mathcal{P}(v) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-\beta \frac{m}{2} v^2}, \tag{1}$$

   illetve a molekulák tömegei $m = 5.312 \times 10^{-26}$ kg.
   (a) Adjuk meg a sebesség várható értékét!
   (b) Adjuk meg a sebesség tipikus értékét (móduszát)!
   (c) Adjuk meg a sebesség szórását!

Példák otthoni gyakorlásra:

1. Mutassuk meg, hogy ha az x változó csak egy αx^n tagban szerepel egy rendszer Hamilton-függvényében, akkor T hőmérsékleten $\langle \alpha x^n \rangle = \frac{k_B T}{n}$. Mekkora a $H = \frac{p^2}{2m} + \alpha x^n$ Hamilton-függvény által leírt anharmonikus oszcillátor hőkapacitása?

2. Tekintsünk egy N részecskés kvantummechanikai rendszert! Egyetlen részecskének a 0 energiájú alapállapota felett van egy ε és egy 2ε energiájú gerjesztett állapota. Határozzuk meg T hőmérsékleten (diszkutálva a releváns határeseteket)
   (a) a Z kanonikus állapotösszeget,
   (b) a rendszer $P(E)$ energia szerinti eloszlását,
   (c) az $\langle E \rangle$ átlagenergiát
   (d) és a C_V hőkapacitást!

3. Tegyük fel, hogy egy ideális gázatomokból álló rendszert csapdába tudunk ejteni egy háromdimenziós harmonikus potenciállal, vagyis a potenciális energia $V(\mathbf{r}) = \alpha r^2$ minden részecskére nézve. A csapdázás elég hatékony, így a részecskéket tartalmazó dobozt végtelen nagynak tekinthetjük.
   (a) Határozzuk meg T hőmérsékleten az egyrészecskés kanonikus állapotösszeget!
   (b) Határozzuk meg a kanonikus sűrűségből egyetlen gázatom $\varrho(\mathbf{r})$ eloszlását! Legyen ennek a normálása $\int \varrho(\mathbf{r})\, \mathrm{d}^3 r = 1$.
   (c) A normális eloszlás szórásából becsüljük meg T hőmérsékleten a gázfelhő r_0 sugarát! Hogyan függ ez a hőmérséklettől?