

1. statisztikus fizika gyakorlat

1. Termodinamika ismételés:

Termodinamika főtételei:

0. létezik a termikus egyensúly mint ekvivalenciareláció (ha A és B és A és C is egyensúlyban vannak, akkor B és C is), jellemző mennyiségekkel (p, V, T, N, \dots)
- I. $dE = \delta Q + \delta W$, energiát hő és munkavégzés formájában lehet közölni egy rendszerrel. Reverzibilis folyamatban $\delta Q^{\text{rev}} = TdS$, $\delta W^{\text{rev}} = \sum_i X_i d\xi_i$, legtöbbször $\delta W^{\text{rev}} = -pdV + \mu dN$.
- II. Nincs $\eta = 1$ hatásfokú hőerőgép (Planck); nincs olyan spontán folyamat, amely pusztán abból állna, hogy a hő hidegebb helyről melegebb helyre megy (Clausius)
- III. Homogén anyagokra $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$, következésképpen ez a fajhőkre is igaz lesz.

Entrópia:

- termikus kölcsönhatást jellemző extenzív mennyiség, $\delta Q^{\text{rev}} = TdS$
- $dS = \frac{1}{T}dE + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN$, izolált rendszerben ez ≥ 0 (II. főtételel)
- $S(E, V, N)$ természetes változók
- kifejezés dS -re, abszolút S -hez kell a III. főtételel

Legendre-transzformáció: tekintsük az $f(x_1, x_2)$ kétváltozós (konvex) függvényt, amelynek parciális deriváltjai legyenek

$$y_1(x_1, x_2) = \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1}, \quad (1)$$

$$y_2(x_1, x_2) = \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2}. \quad (2)$$

Definiáljuk az alábbi függvényt:

$$g(y_1, x_2) = y_1 \cdot x_1 - f(x_1, x_2). \quad (3)$$

Az így bevezetett függvényben lényegében lecseréltük az x_1 változót a neki megfelelő parciális deriváltra, y_1 -re, ugyanis a két függvény teljes differenciáljait megvizsgálva

$$df(x_1, x_2) = \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} dx_2 = y_1 dx_1 + y_2 dx_2, \quad (4)$$

$$dg(y_1, x_2) = d(y_1 \cdot x_1) - df(x_1, x_2) = x_1 dy_1 + y_1 dx_1 - df(x_1, x_2) = x_1 dy_1 - y_2 dx_2. \quad (5)$$

A teljes differenciálokban megjelenő infinitezimális mennyiségek jelzik az egyes függvények természetes változóit. Többé-kevésbé a $g(y_1, x_2)$ függvényt nevezzük az $f(x_1, x_2)$ (első változója szerinti) Legendre-transzformáltjának, a termodinamikában ennek a függvénynek a mínusz egyszerűsítését szoktuk megkonstruálni a termodinamikai potenciálok definíciójához.

Példa Legendre-transzformációra a termodinamikában szokásos konvenció szerint:

$$\mathcal{L}_x[f(x, y, z)] = g(p, y, z) \quad (6)$$

$$= \min_x [f(x, y, z) - px] \quad (7)$$

$$= f(x^*, y, z) - px^* \quad (8)$$

ahol x^* a megoldása a

$$\left. \frac{\partial f(x, y, z)}{\partial x} \right|_{x=x^*} = p \quad (9)$$

egyenletnek. Termodinamika:

$$F(T, V, N) = E(S^*, V, N) - TS^*, \quad (10)$$

ahol

$$\left. \frac{\partial}{\partial S} [E(S, V, N) - TS] \right|_{S=S^*} = 0, \quad (11)$$

azaz

$$\left. \frac{\partial E(S, V, N)}{\partial S} \right|_{S=S^*} = T. \quad (12)$$

Ebból:

$$F(T, V, N) = \mathcal{L}_S[E(S, V, N)] = E(S, V, N) - TS. \quad (13)$$

Belső energia:

- $dE = TdS - pdV + \mu dN$, $E(S, V, N)$ természetes változói a belső energiának
- $dE = \underbrace{\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N}}_T dS + \underbrace{\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S,N}}_{-p} dV + \underbrace{\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V}}_{\mu} dN$
- $E(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda E(S, V, N)$ elsőrendű homogén függvény, λ szerint deriválva $\lambda = 1$ -ben:
- $E(S, V, N) = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N} S + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S,N} V + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V} N = TS - pV + \mu N$ Euler-összefüggés
- $dE = d(TS - pV + \mu N) = SdT + TdS - Vdp - pdV + Nd\mu + \mu dN = dE + (SdT - Vdp + Nd\mu)$
 \Rightarrow Gibbs-Duhem-reláció: $SdT - Vdp + Nd\mu = 0$.

Termodinamikai potenciálok: belső energia Legendre-transzformáltjai (plusz az entrópia)

- $S(E, V, N)$: maximuma határozza meg az izolált rendszer egyensúlyát
- $E(S, V, N) \rightarrow F(T, V, N) = E(S, V, N) - TS = -pV + \mu N$ szabadenergia (Helmholtz free energy), minimuma releváns ha nincs hőszigetelés (termikus kapcsolat van környezet és alrendszer között)
 $dF = -SdT - pdV + \mu dN$
- $H(S, p, N) = E(S, V, N) - (-p)V = TS + \mu N$ entalpia (enthalpy), minimuma releváns ha változhat az alrendszer térfogata
 $dH = TdS + Vdp + \mu dN$
- $G(T, p, N) = E(S, V, N) - TS + pV = \mu N$ szabadentalpia (Gibbs free energy), minimuma releváns
 $dG = -SdT + Vdp + \mu dN$
- Maxwell-relációk: potenciálok vegyes második deriváltjaiból, Young-tétel alapján, pl.
 $\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T} = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$

2. Valószínűségszámítás ismétlés:

- véletlen események, lehetséges kimenetek halmaza az Ω eseménytér
- $\mathcal{F} \subseteq \mathcal{P}(\Omega)$ (Ω hatványhalmazának egy részhalmaza) egy σ -algebra ($\Omega \in \mathcal{F}$; \mathcal{F} zárt a komplementumképzésre; \mathcal{F} zárt a megszámlálható unióképzésre)
- valószínűség: $\mathbb{P} : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ halmazfüggvény valószínűségi mérték: nemnegatív; diszjunkt eseményekre megszámlálhatóan additív (σ -additív); $\mathbb{P}(\Omega) = 1$
- kézzelfogható jelentés: lényegében relatív gyakoriság
- feltételes valószínűség: $\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}$, következésképp $\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A|B) \mathbb{P}(B)$
- teljes valószínűség tétele: ha $\{B_i\}_{i=1}^n$ teljes eseményrendszer ($B_i \cap B_j = \emptyset$ ha $i \neq j$ és $\bigcup_{i=1}^n B_i = \Omega$), akkor $\mathbb{P}(A) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(A|B_i) \mathbb{P}(B_i)$
- A és B események akkor függetlenek, ha $\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) \mathbb{P}(B)$; ilyenkor $\mathbb{P}(A|B) = \mathbb{P}(A)$.

- valószínűségi változó: $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mérhető függvény. Lényegében: elemi eseményekhez való számot rendelő függvény; egy véletlen szám (ha úgy tetszik). Diszkrét/folytonos az értékkészlete számosságától függően.
- diszkrét valószínűségi változó eloszlása: $p : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ függvény, $p(x_i) = \mathbb{P}(X = x_i)$.
- folytonos valószínűségi változó eloszlásfüggvénye: $F : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ függvény, $F(x) = \mathbb{P}(X < x)$.
- abszolút folytonos valószínűségi változó sűrűségfüggvénye: $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$
- várható érték: $\mathbb{E}X = \sum_i x_i p(x_i)$ diszkrét, $\mathbb{E}X = \int x f(x) dx$ folytonos.
- szórás: $\mathbb{D}X = \sqrt{\mathbb{E}[(X - \mathbb{E}X)^2]}$

3. **Gamma-függvény:** lényegében a faktoriális általánosítása. Definíció:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad \operatorname{Re} z > 0 \quad (14)$$

(15)

amiből

$$\int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt = \int_0^{\infty} e^{-t} \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dt} t^z \right) dt \quad (16)$$

$$= \frac{1}{z} \underbrace{[e^{-t} t^z]_0^{\infty}}_0 + \frac{1}{z} \int_0^{\infty} e^{-t} t^z dt \quad (17)$$

$$= \frac{1}{z} \Gamma(z+1), \quad (18)$$

vagyis

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (19)$$

(v.ö. $(n+1)! = (n+1) \cdot (n!)$).

Nevezetes helyeken az értéke:

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} e^{-t} dt = 1 \quad (20)$$

$$\Gamma(2) = 1 \cdot \Gamma(1) = 1 \quad (21)$$

$$\Gamma(3) = 2 \cdot \Gamma(2) = 2 \quad (22)$$

$$\Gamma(4) = 3 \cdot \Gamma(3) = 2 \cdot 3 = 6 \quad (23)$$

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-\frac{1}{2}} dt = 2 \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} \end{aligned} \quad (25)$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (26)$$

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \quad (27)$$

$$\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{5}{2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{5 \cdot 3 \cdot 1}{2 \cdot 2 \cdot 2} \sqrt{\pi} = \frac{15}{8} \sqrt{\pi} \quad (28)$$

$$\Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi} \quad (29)$$

4. n -dimenziós gömb V_n térfogata és A_n felszíne:

$$V_n(r) = C_n r^n = \int_0^r dV_n(r') = \int_0^r A_n(r') dr' \quad (30)$$

$$A_n(r) = \frac{dV_n(r)}{dr} = nC_n r^{n-1}. \quad (31)$$

Vegyük észre, hogy az

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_1^2 - x_2^2 - \dots - x_n^2} dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad (32)$$

$$= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \right)^n = \pi^{\frac{n}{2}} \quad (33)$$

integrál gömbi polárkoordinátákban felírt alakja

$$I_n = \int_0^{\infty} e^{-r^2} A(r) dr = \int_0^{\infty} e^{-r^2} nC_n r^{n-1} dr, \quad (34)$$

amiből $y = r^2$ helyettesítéssel

$$I_n = \frac{nC_n}{2} \int_0^{\infty} e^{-y} y^{\frac{n}{2}-1} dy \quad (35)$$

$$= \frac{nC_n}{2} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right). \quad (36)$$

Összevetve (32) és (36) egyenlet jobb oldalát:

$$C_n = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\frac{n}{2} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)}. \quad (37)$$

Az első pár dimenzióra:

$$C_1 = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} = 2 \quad \Rightarrow \quad V_1(r) = 2r \quad (38)$$

$$C_2 = \frac{\pi}{\Gamma(2)} = \pi \quad \Rightarrow \quad V_2(r) = r^2 \pi \quad (39)$$

$$C_3 = \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} = \frac{4}{3} \pi \quad \Rightarrow \quad V_3(r) = \frac{4}{3} r^3 \pi \quad (40)$$

$$C_4 = \frac{\pi^2}{\Gamma(3)} = \frac{\pi^2}{2} \quad \Rightarrow \quad V_4(r) = \frac{\pi^2}{2} r^4 \quad (41)$$

$$C_5 = \frac{\pi^{\frac{5}{2}}}{\Gamma\left(\frac{7}{2}\right)} = \frac{8}{15} \pi^2 \quad \Rightarrow \quad V_5(r) = \frac{8}{15} \pi^2 r^5 \quad (42)$$

Egy R sugarú gömb külső, dR vastag gömbhéjának térfogata a teljes térfogat arányában

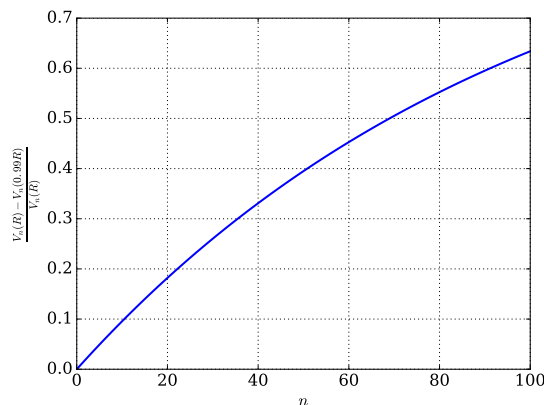
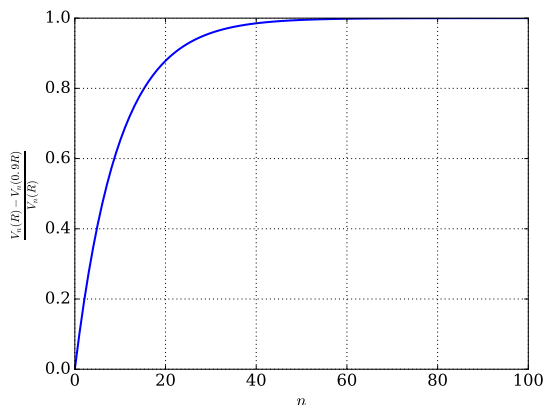
$$\frac{A_n(R) dR}{V_n(R)} = \frac{nC_n R^{n-1} dR}{C_n R^n} = n \frac{dR}{R} \quad (43)$$

Látjuk, hogy minél magasabb dimenziós a tér, annál nagyobb hányadát teszi ki a gömbnek a felszíni gömbhéja. Ez olyannyira igaz, hogy nagyon nagy dimenziószámok esetén egyre kisebb dR esetén lesz csak érvényes a közelítés, miszerint a gömbhéj térfogata $A_n(R) dR$ (ugyanis mi történik, ha $n > \frac{R}{dR}$, azaz $n \frac{dR}{R} > 1$?). Láthatóan a fő üzenet világos, még a látszólag téves $n \frac{dR}{R} \rightarrow \infty$ határeset ellenére is. Azaz az, hogy a infinitezimális gömbhéj sokkal nagyobb lesz mint maga a gömbhéj azt mutatja, hogy kicsi

gömbhéjak hozzáadása esetén hatalmasat változik a térfogat, vagyis a teljes térfogat igazából “kiszorul a gömb felszínére”. Azonban, hogy egzaktabban vizsgáljuk, hogy milyen konvergencia tulajdonságokkal rendelkezik a gömbhéj és a térfogat aránya, a következőt írjuk fel:

$$\frac{V_n(R) - V_n(R - dR)}{V_n(R)} = \frac{C_n R^n - C_n (R - dR)^n}{C_n R^n} = 1 - \left(1 - \frac{dR}{R}\right)^n, \quad (44)$$

ahol a második tag látványosan 0-hoz tart n szerint fix dR/R arány esetén. Dimenziófüggetlen $dR = 0.1R$ illetve $dR = 0.01R$ esetén:



Megjegyezzük, hogy ez afenti határáték szorosan függ attól, hogy a deriválást $R + dR$ vagy $R - dR$ módon végezzük el. Ha az elbit tettük volna, akkor ebbe na megközelítésben is a korábbi “furcsa” végtelen határértéket kaptuk volna:

$$\frac{V_n(R + dR) - V_n(R)}{V_n(R)} = \frac{C_n (R + dR)^n - C_n R^n}{C_n R^n} = \left(1 + \frac{dR}{R}\right)^n - 1 \rightarrow \infty.$$

(45)

5. Stirling-formula: Állítás: nagyon nagy N -re ($N \gg 1$)

$$\ln(N!) \sim N \ln N - N \quad (46)$$

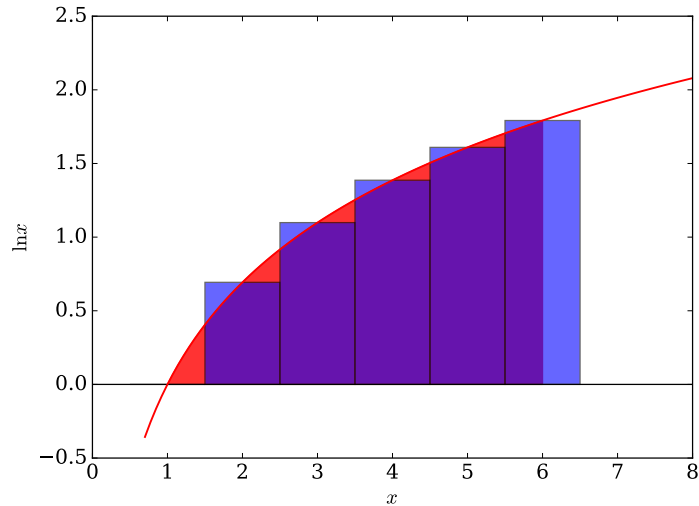
$$N! \sim \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N \quad \text{“} \sim \text{”} \left(\frac{N}{e}\right)^N, \quad (47)$$

aminek a pontos értelmezésével azért óvatosan kell bánni, lásd mindjárt.

Az első alakhoz:

$$\ln(N!) = \sum_{n=1}^N \ln n \approx \underbrace{\int_1^N \ln x dx}_{[x \ln x - x]_1^N} + \frac{1}{2} \underbrace{\ln 1}_0 + \frac{1}{2} \ln N, \quad (48)$$

ugyanis a baloldali szumma lényegében a jobboldali integrál közelítő összege:



A közelítés hibája ugyanúgy legfeljebb logaritmus nagyságrendű, mint (47) egyenlet jobb oldalának utolsó tagja, vagyis

$$\ln(N!) = N \ln N - N + O(\ln N) = N \ln \left(\frac{N}{e} \right) + O(\ln N), \quad (49)$$

ahol az integrál konstans 1 járulékat is elhanyagoltuk (vagy ha úgy jobban tetszik, beleolvastottuk a hibatagba). Itt a hibatag logaritmus nagyságrendje alatt matematikailag precízen azt kell érteni, hogy a hiba nagy N -ekre felülről becsülhető $c \cdot \ln N$ -nel, alkalmas c konstans esetén. Egy alternatív megfogalmazás szerint

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln(N!)}{N \ln N - N} = 1, \quad (50)$$

ezt kell érteni a fenti $\ln(N!) \sim N \ln N - N$ közelítés alatt.

A Stirling-formula második alakjával óvatosabban kell bánni:

$$N! = e^{\ln(N!)} = c_N \left(\frac{N}{e} \right)^N, \quad (51)$$

ahol $c_N = O(N)$. Azt állítjuk, hogy vezető rendben $c_N = \sqrt{2\pi N}$, tehát a precíz közelítés:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N!}{\sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e} \right)^N} = 1, \text{ vagy} \quad (52)$$

$$N! \sim \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e} \right)^N. \quad (53)$$

Vegyük észre, hogy bár a legerősebb függést a második tényező tartalmazza, mégis a gyakran használt

$$N! \sim \left(\frac{N}{e} \right)^N \quad (54)$$

közéltés elfedi azt a tényt, hogy ezzel tévedünk egy kb. $2.5\sqrt{N}$ faktort (ahol $N \gg 1$).

6. **Riemann-zeta:** kvantumgázok leírásánál elő fognak kerülni az alábbi alakban felírt integrálok:

$$I(s) = \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx, \quad (55)$$

melyek végesek amennyiben $s > 1$. Átalakítva:

$$I(s) = \int_0^{\infty} e^{-x} \frac{x^{s-1}}{1 - e^{-x}} dx \quad (56)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{s-1} e^{-nx} dx \quad (57)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^{s-1} e^{-nx} dx \quad (58)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \int_0^{\infty} y^{s-1} e^{-y} dy \quad (59)$$

$$= \Gamma(s) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}. \quad (60)$$

Az itt megjelenő végtelen sor definiálja a Riemann-féle zeta-függvényt:

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}. \quad (61)$$

Nevezetesebb értékei:

$$\zeta(1) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots = \infty \quad (62)$$

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2.612 \quad (63)$$

$$\zeta(2) = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \dots = \frac{\pi^2}{6} \quad (64)$$

$$\zeta\left(\frac{5}{2}\right) \approx 1.341 \quad (65)$$

$$\left(\zeta(0) = \sum_{n=1}^{\infty} 1 = \infty \text{ helyett } -\frac{1}{2}\right) \quad (66)$$

Példák otthoni gyakorlásra:

1. Mutassuk meg, hogy $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$. (Tipp: számoljuk ki ennek a mennyiségnek a négyzetét síkbeli polárkoordináták segítségével!)
2. Határozzuk meg az $f(x_1, x_2) = x_1^2 (x_2^4 - 1)$ függvény $g(y_1, x_2) = y_1 x_2 - f(x_1, x_2)$ Legendre-transzformáltját, ahol $y_1 = \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1}$.
3. Az egyatomos ideális gáz állapotegyenlete $pV = Nk_B T$, belső energiája $E = \frac{3}{2} Nk_B T$. Határozzuk meg az $\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$ hőtágulási tényezőt, a $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$ izoterm kompresszibilitást és az izobár illetve az izochor hőkapacitás $c_p - c_V$ különbségét! $\left(c_p = \left(\frac{\delta Q}{dT} \right)_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p, \quad c_V = \left(\frac{\delta Q}{dT} \right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \right)$
- *4. A van der Waals-gáz állapotegyenlete $\left(p + \frac{N^2}{V^2} a^2 \right) (V - Nb) = Nk_B T$. Határozzuk meg a hőtágulási tényezőt, az izoterm kompresszibilitást és az izobár illetve az izochor hőkapacitás különbségét!
(Tipp: $c_p - c_V = \frac{TV\alpha^2}{\kappa_T}$)