5. statisztikus fizika gyakorlat

1. **Mágneses térbe helyezett 1/2-es spinű részecske**
Tekintsünk B mágneses térbe helyezett $\frac{1}{2}$ spinű részecskéket! Ha a koordinátarendszer z tengelyét a tér irányában vesszük fel, akkor egy részecske energiáját $\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\mu B}{\hbar}\hat{S}_z$ adja meg. Határozzuk meg T hőmérsékleten

   (a) a $Z(T)$ kanonikus állapotösszeget,
   (b) a rendszer $P(E)$ energia szerinti eloszlását,
   (c) az $\langle E \rangle$ átlagenergiát
   (d) és az átlagos mágnesezettséget ás a mágnesezettség varianciáját!
   (e) Mekkora a kis terű limeszben a mágnesezettség?
   (f) Milyen a szuszceptibilitás hőmérsékletfüggése?
   (g) Határozzuk meg a hőkapacitást!

   Egyrészecskés Hamilton-operátor:
$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\mu B}{\hbar}\hat{S}_z, \tag{1}$$
ahol a z-tengely irányát a külső mágneses térrel párhuzamosnak választottuk meg, $\mathbf{B} \parallel \hat{\mathbf{z}}$. Továbbá, ahol $\hat{S}_z$ az $\hat{\mathbf{S}}$ spin operátor z komponense, ahol a sajátértékek:
$$\hat{\mathbf{S}}^2 \left|s, m\right\rangle = \hbar^2 s\,(s+1) \left|s, m\right\rangle, \tag{2}$$
$$\hat{S}_z \left|s, m\right\rangle = m\hbar \left|s, m\right\rangle. \tag{3}$$
Ahol $m = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$, összesen $2s+1$ értéket vehet fel rögzített s mellett, azaz az $|s, m\rangle$ állapot $2s+1$-eresen degenerált a spin vektor négyzetére, $\underline{\hat{S}}^2$-re, nézve. Esetünkben 1/2-es spinű részecskéket vizsgálunk, $m = \pm 1/2$, azaz az egyrészecske Hamilton-operátor két sajátértéke: $E_\pm = \mp\frac{\mu B}{2}$.

   (a) Állapotösszeg:
   Mivel ismét nem kölcsönható részecskékről van szó, egyszerűen elegendő kiszámolnunk az egyrészecskés állapotösszeget, majd vennünk az N-edik hatványát. Definíció alapján az egyrészecskés partíciós függvény
$$Z_1(\beta) = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu} = \sum_{m=\pm 1/2} e^{-\beta m \mu B} = 2\cosh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right). \tag{4}$$
   Vagyis a teljes, N részecskés állapotösszeg: $Z_N(\beta) = Z_1^N(\beta) = \left(2\cosh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)\right)^N$.
   Ezt az eredményt megkaphatjuk explicit számolással is, ahol direkten az N részecskés állapotösszeget számítjuk ki. Ehhez először paraméterezzük az energiát azszerint, hogy hány részecske található az $|m = +1/2\rangle$ állapotban, ezek száma legyen N_+, ekkor az energia világos, hogy $E_{N_+} = (N_- - N_+)\frac{\mu B}{2} = (N - 2N_+)\frac{\mu B}{2}$, illetve ehhez az energiához tartozó degenerációs faktor, azaz azon állapotok száma, melyek ezzel az energiával rendelkeznek, a szokásos módon a $g(N_+) = \binom{N}{N_+}$ binomiális együttható-val adható meg, amivel a részecskék megkülönböztethetetlenségét is figyelembe vettük. Ekkor a teljes, N részecskés állapotösszeget a következő módon írjuk fel: A definíció szerinti összegzés, ami minden mikorállapotra történik felírható az egyes energiaértékek szerinti összegzésként, hiszen az összegzés argumentuma csak az energiától függ. Az egyetlen dolog amiről itt gondoskodnunk kell, hogy figyelembe vegyük hány állapot rendelkezik egy adott energiával:
$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= \sum_{N_+=0}^{N} \binom{N}{N_+} e^{-(N-2N_+)\beta\mu B/2} = \sum_{N_+=0}^{N} \binom{N}{N_+} \left(e^{-\beta\mu B/2}\right)^{N-N_+} \left(e^{\beta\mu B/2}\right)^{N_+} = \ldots \\ \cdots &= \left(e^{-\beta\mu B/2} + e^{\beta\mu B/2}\right)^N = \left(2\cosh\left(\beta\mu B/2\right)\right)^N \equiv Z_1^N(\beta). \end{aligned} \tag{5}$$
   Ahol az utolsó előtti lépésben az összegzés elvégzésére a binomiális tételt alkalmaztuk.

(b) Energia szerinti eloszlás egy részecske esetén:

$$P_1\left(E_\pm\right) = \frac{e^{-\beta E_\pm}}{Z_1(\beta)} = \frac{e^{\pm\beta\mu B/2}}{2\cosh(\beta\mu B/2)} = \frac{1}{e^{\mp\beta\mu B}+1} = \frac{1}{e^{\beta E_\pm}+1}. \tag{6}$$

Ezt követően megadjuk az általános kifejezést az N részecskés esetre, ahol, ahogyan korábban kifejezetük az energiát az $|m=+1/2\rangle$-es állapotban lévő részecskék számának segítségével, $E_{N_+} = (N-2N_+)\frac{\mu B}{2}$ módon paraméterezzük. Ezt követően az energiát tartalmazó exponenciális kifejezést be kell még szoroznunk azon különböző állapotok számával, melyek az adott energiával rendelkeznek, vagyis E_{N_+} $g(N_+) \equiv \binom{N}{N_+}$ degenerációs faktorával:

$$P_N\left(E_{N_+}\right) = \binom{N}{N_+}\frac{e^{-(N-2N_+)\beta\mu\hbar B/2}}{\left(2\cosh\left(\beta\mu\hbar B/2\right)\right)^N} = \binom{N}{N_+}\frac{e^{N_+\beta\mu\hbar B}}{\left(e^{\beta\mu\hbar B}+1\right)^N}. \tag{7}$$

(c) Átlagos energia:
Először egy részecske esetén számítjuk ki két különböző módon az átlagos energiát. Elsőként a hagyományos módon, diszkrét valószínűségi súlyfüggvények esetén definíció alapján:

$$\langle E_1\rangle = \sum_{m=\pm1/2} E_\pm \frac{e^{-\beta E_\pm}}{Z_1(\beta)} = \frac{\mu B}{2}\frac{e^{-\beta\mu B/2}-e^{\beta\mu B/2}}{2\cosh(\beta\mu B/2)} = -\frac{\mu B}{2}\tanh(\beta\mu B/2)\,. \tag{8}$$

Most az előadáson tanultak alapján, a partíciós függvény logaritmusából származtatva:

$$\langle E_1\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_1(\beta)) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(\cosh(\beta\mu B/2)) = -\frac{\frac{\partial}{\partial\beta}\cosh\beta\mu B/2}{\cosh(\beta\mu B/2)} = -\frac{\mu B}{2}\tanh(\beta\mu B/2)\,. \tag{9}$$

Most kiszámítjuk ismét kétféleképpen N részecske esetén is a teljes energia átlagos értékét.
Először az állapotösszeg logaritmusának ismeretében, triviális módon:

$$\langle E_N\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_N(\beta)) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\!\left(Z_1^N(\beta)\right) = N\langle E_1\rangle = -N\frac{\mu B}{2}\tanh(\beta\mu B/2)\,. \tag{10}$$

Majd a diszkrét valószínűségi súlyok nyelvén:

$$\begin{aligned}\langle E_N\rangle &= \frac{1}{Z_N(\beta)}\sum_{N_+=0}^{N}\binom{N}{N_+}e^{-\beta(N-2N_+)\frac{\mu B}{2}}(N-2N_+)\frac{\mu B}{2} = -\frac{1}{Z_N(\beta)}\frac{\mu B}{2}\frac{\partial}{\partial p}\sum_{N_+=0}^{N}\binom{N}{N_+}e^{-(N-2N_+)p}\Bigg|_{p=\beta\mu B/2} = \\ \cdots &= -\frac{1}{Z_N(\beta)}\frac{\mu B}{2}\frac{\partial}{\partial p}\left(2\cosh(p)\right)^N\Bigg|_{p=\beta\mu B/2} = -\frac{1}{\left(2\cosh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)\right)^N}\frac{\mu B}{2}N\left(2\cosh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)\right)^{N-1}2\sinh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right) = \ldots \\ \cdots &= -N\frac{\mu B}{2}\tanh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right) = N\langle E_1\rangle\,.\end{aligned} \tag{11}$$

(d) Átlagos mágnesezettség:
Ismét először a konvencionális módon adjuk meg a mágnesezettség várható értékét: A mágnesezettség két lehetséges értéke attól függ, hogy éppen merre mutat a vizsgált részecske spinje, a mágnesezettség értéke pedig kiolvasható a Hamilton-operátor alakjából (Emlékeztető: Elektrodinamikából ismert, hogy egy mágneses dipólusra külső $\underline{B}$ mángeses térben, $E = -\mathbf{BM}$ alakú potenciál által keltett erő hat, ahonnan $\mathbf{M} = \frac{\mu}{\hbar}\mathbf{S}$) $M_\pm = \pm\mu/2$:

$$\langle M_1\rangle = \sum_{m=\pm1/2}\frac{e^{-\beta E_\pm}}{Z_1}M_\pm = \frac{\mu}{2}\frac{e^{\beta\mu B/2}-e^{-\beta\mu B/2}}{2\cosh(\beta\mu B/2)} = \frac{\mu}{2}\tanh(\beta\mu B/2)\,. \tag{12}$$

Most az állapotösszeg logaritmusának segítségével is megadjuk az átlagos mágnesezettséget:

$$\langle M_1\rangle = -\frac{\partial}{\partial B}F_1 = k_BT\frac{\partial}{\partial B}\ln(Z_1) = k_BT\frac{\partial}{\partial B}\ln(\cosh(\beta\mu B/2)) = \frac{\mu}{2}\tanh(\beta\mu B/2)\,. \tag{13}$$

Látható, hogy a szabadenergiának a Hamilton-operátorban megjelenő külső tér szerinti deriváltja adja meg az adott külső térhez csatolódó operátor (esetünkben a küslő mágneses térhez csatolódik a spinek segítségével kifejezett mágnesezettség operátor) várható értékét. Ezt most igazoljuk az N részecskés esetre is, először definíció szerint összegezve az egyes N részecske konfigurációkhoz tartozó mágnesezettség értékeket, súlyozva a megfelelő valószínűségekkel. Teljesen analóg módon az energia várható érték számítással a mágnesezettséget az $|m = +1/2\rangle$ állapotok számával indexeljük, ekkor felhasználva, hogy egy adott konfigurációra $M_{N_+} = (N_+ - N_-)\frac{\mu}{2} = (2N_+ - N)\frac{\mu}{2}$, a következőt írhatjuk:

$$\langle M_N\rangle = \frac{1}{Z_N(\beta)}\sum_{N_+=0}^{N}\binom{N}{N_+}e^{\beta(2N_+-N)\frac{\mu B}{2}}(2N_+ - N)\frac{\mu}{2} = \frac{1}{Z_N(\beta)}\frac{\mu}{2}\frac{\partial}{\partial p}\sum_{N_+=0}^{N}\binom{N}{N_+}e^{(2N_+-N)p}\Bigg|_{p=\beta\mu B/2} = \dots$$
$$\dots = \frac{1}{Z_N(\beta)}\frac{\mu B}{2}\frac{\partial}{\partial p}\left(2\cosh(p)\right)^N\Bigg|_{p=\beta\mu B/2} = \frac{1}{Z_N(\beta)}\frac{\mu}{2}N\left(2\cosh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right)\right)^{N-1}2\sinh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right) = \dots$$
$$\dots = N\frac{\mu}{2}\tanh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right) = N\langle M_1\rangle\,. \tag{14}$$

Most pedig megadjuk az N részecskés szabadenergiából való kiszámítás módját is:

$$\langle M_N\rangle = -\frac{\partial}{\partial B}F(T,N) = \beta\frac{\partial}{\partial B}\ln(Z_N(\beta)) = N\beta\frac{\partial}{\partial B}\ln(Z_1(\beta)) = N\langle M_1\rangle = N\frac{\mu}{2}\tanh\left(\frac{\beta\mu B}{2}\right). \tag{15}$$

Most a mágnesezettség varianciájához kiszámítjuk először ismét az egyrészecske varianciát, amihez definíció szerint szükséges a mágnesezettség második kumulánsa:

$$\langle\delta M_1^2\rangle = \sum_{m=\pm 1/2}\frac{e^{-\beta E_\pm}}{Z_1}M_\pm^2 = \sum_{m=\pm 1/2}\frac{e^{-\beta E_\pm}}{Z_1}\mu^2/4 = \mu^2/4\,. \tag{16}$$

Innen a variancia:

$$\langle\delta M_1^2\rangle = \langle M^2\rangle - \langle M\rangle^2 = \mu^2/4\left(1-\tanh^2(\beta\mu B/2)\right) = \left(\frac{\mu}{2\cosh(\beta B\mu/2)}\right)^2. \tag{17}$$

Ezt követően felhasználva, hogy nem kölcsönható részecskék esetén a variancia additív, a teljes szórásnégyzet egyszerűen

$$\langle\delta M_N^2\rangle = N\langle\delta M_1^2\rangle = N\left(\frac{\mu}{2\cosh(\beta B\mu/2)}\right)^2 \tag{18}$$

(e) Mágnesezettség kis terű limeszben:
Kihasználva, hogy $\tanh(x) = x - \frac{x^3}{3} + \dots$, azt kapjuk, hogy a mágnesezettség átlagos értéke vezető rendben a következőt adja:

$$\lim_{B\to 0}\langle M_N\rangle = N\frac{\beta\mu^2 B}{4} + \mathrm{o}\left(B^3\right). \tag{19}$$

(f) Szuszceptibilitás:
Ismétlés: A szuszceptibilitás adja meg, hogy milyen a lineáris válasza egy adott rendszernek a külső mágneses tér megváltozása esetén, azaz vezető rendben hogyan változik meg a vizsgált rendszer mágnesezettsége egy külső tér bekapcsolása esetén.

$$\chi_M = \frac{\partial}{\partial H}\langle M_N\rangle\Bigg|_{H=0} = N\frac{\beta\mu^2}{4}\mu_0. \tag{20}$$

ahol definíció alapján a mágneses térerősség szerinti deriváltat vizsgáltuk, $\mu_0 H = B$.

(g) Hőkapacitás:
Definció alapján, ahol ismét áttérünk az inverz hőmérséklet szerinti deriválásra, $\frac{\partial}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial}{\partial\beta}$:

$$C_V = \frac{\partial\langle E_N\rangle}{\partial T} = N\frac{\mu B}{2k_B T^2}\frac{\partial\tanh(\beta\mu B/2)}{\partial\beta} = \left(\frac{\beta\mu B/2}{\cosh(\beta\mu B/2)}\right)^2 Nk_B. \tag{21}$$

Vegyük észre, hogy ahogyan $T\to 0$ mind a nevező, mind a számláló végtelenbe tart, de mivel a $\cosh(x)$ függvény exponenciálisan divergál a hőkapacitás eltűnik a nulla hőmérsékleten, ahogyan azt el is várjuk tőle kvantumrendszereke esetén. Rédekesebb eset a $T\to\infty$ eset, amikor is a számláló nullába tart, míg a nevező 1-hez, hiszen $\lim_{x\to 0}\cosh(x) = 1$. Ez a korábban tanult két állapotú rendszerhez hasonlóan az állapotok számának véges számával magyarázható és neve Schottky-anomália.

(h)* Entrópia:
A tanult képlet alapján $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$, ahol a második tagban alkalamzva a $T\frac{\partial}{\partial T} = -\beta\frac{\partial}{\partial \beta}$ azonosságot:

$$\begin{aligned} S(N,\beta) &= k_B N \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln\left[\cosh\left(\beta\mu B/2\right)\right] + k_B N \ln\left[\cosh(\beta\mu B/2)\right] \\ &= N\left(\beta\mu B/2 \tanh\left(\beta\mu B/2\right) + N \ln\left[\cosh\left(\beta\mu B/2\right)\right]\right) k_B \end{aligned} \tag{22}$$

2. **Háromdimenziós kvantumos rotátor**
Egy magas szimmetriájú molekula forgási szabadsági fokait első közelítésben jól leírja a $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta}$ Hamilton-operátor, ahol $\hat{L}^2$ az impulzusmomentum négyzete és Θ a tehetetlenségi nyomaték. Határozzuk meg *magas* T hőmérsékleten

(a) a $Z(T)$ kanonikus állapotösszeget,

(b) ebből az $\langle E\rangle$ átlagenergiát

(c) az energia szórásnégyzetét és a relatív szórást, $\sqrt{\langle \delta E^2\rangle}/\langle E\rangle$

(d) és a C_V hőkapacitást!

Hasonlóképpen diszkutáljuk az alacsony hőmérsékleti határesetet!

Egyrészecske Hamilton-operátor:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta}, \tag{23}$$

$$\hat{L}^2\left|l,m\right\rangle = \hbar^2 l\left(l+1\right)\left|l,m\right\rangle, \tag{24}$$

$$m = -l, -l+1 \ldots l-1, l. \tag{25}$$

Ahol $|l,m\rangle$ az impulzusmomentum operátor, $\hat{L}$, sajátállapota, illetve ahol $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$, összesen $2l+1$ értéket vehet fel (Emlékeztető $|l,m\rangle$ az $\hat{L}_z$ operátor sajátállapota is, $\hbar m$ sajátértékkel, azaz $\hat{L}_z\left|l,m\right\rangle = \hbar m\left|l,m\right\rangle$).

(a) Állapotösszeg:
Általánosan felírva a vizsgált Hamilton-operátor sajátértékeivel, $\hat{\mathcal{H}} \to E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}$, illetve a hozzá tartozó $g\left(E_l\right) \equiv 2l+1$ degenerációs faktorral az állapotösszeg:

$$Z(\beta) = \sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)e^{-\beta\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}}. \tag{26}$$

Ezt a végtelen sort nem tudjuk egzaktul kiszámolni! (Megjegyzés, ha ez egy integrál lenne, akkor könnyedén ki lehetne számolni, hiszen az exponenciális előtt lévő tag arányos az exponens deriváltjával). Ezért először a nagy hőmérsékletű limeszt vizsgáljuk meg, $\beta \to 0, T \to \infty$. Mivel ekkor az exponensben nagyon kis értékek vannak, melyek nagyon sűrűn következnek egymás után, a végtelen sor jól közelíthető egy integrállal:

$$Z(\beta) = -\frac{2\Theta}{\hbar^2}k_B T \sum_{l=0}^{\infty} -\frac{\beta\hbar^2}{2\Theta}\left(2l+1\right)e^{-\beta\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}} \approx -\frac{2\Theta}{\hbar^2}k_B T\int_0^\infty \mathrm{d}x\, -\left(2x+1\right)e^{-x(x+1)} = \frac{2\Theta}{\hbar^2}k_B T. \tag{27}$$

(b) Átlagos energia:
Innen már könnyű dolgunk van, hiszen csak ezt a közelítő kifejezés elemezve kell megadnunk az energiát a jól ismert módon:

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z\left(\beta\to 0\right)) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{1}{\beta}\right) = k_B T. \tag{28}$$

(Megjegyzés: Az ekvipartíció tétele alapján szabadsági fokonként minden a Hamilton-operátorban megjelenő kvadratikus tagból $\frac{1}{2}k_B T$ energia járulék adódik $\to$ a 3 dimenziós rotátor egy gömbfelszínen való mozgásnak felel meg, ami két szabadsági fokot jelent egy részecske számára!)

(c) Hőkapacitás:
Definíció alapján:

$$C_V = \frac{\partial\left\langle E\right\rangle}{\partial T} = k_B. \tag{29}$$

(d) Ellenkező, alacsony hőmérsékletű határeset: $T \to 0$, $\beta \to \infty$.

Ekkor az állapot összegben szereplő exponensek nagyon gyorsan levágnak, $e^{-\beta \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}} \to 0$, ahogyan az l indexet növeljük. Ezért az összegzést csak az első olyan tagig végezzük el, ami tartalmaz hőmérséklet függést, vagyis ebben a határesetben vezetőrendben vizsgáljuk a problémát, ahol a "kicsi" paraméter világos, hogy a gyorsan levágó exponenciális függvény, $e^{-\beta \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}}$.

$$Z(\beta \to \infty) = 1 + 3e^{-\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}} + \mathrm{o}\left(e^{-3\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}}\right). \tag{30}$$

Innen ismét egyszerű a dolgunk, ha ki akarjuk számítani az energia várható értékét. Ehhez először még egy közelítést alkalmazunk, $\ln(1+\varepsilon) \approx \varepsilon + \mathrm{o}\left(\varepsilon^2\right)$, $\varepsilon \ll 1$. Ez alapján az állapotösszeg logaritmusa, illetve az energia várható értéke a következőképpen számolható ki:

$$\ln(Z(\beta \to \infty)) \approx \ln\left(1 + 3e^{-\beta \frac{\hbar^2}{2\Theta}}\right) = 3e^{-\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}} + \mathrm{o}\left(e^{-2\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}}\right), \tag{31}$$

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z(\beta \to \infty)) = \frac{3\hbar^2}{\Theta} e^{-\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}} + \mathrm{o}\left(e^{-2\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}}\right). \tag{32}$$

A hőkapacitást pedig ismét a definíció alapján számoljuk ki, ahol ismét alkalmazzuk a hőmérséklet szerinti deriválásról a β változó szerinti deriválásra való áttérést, $\frac{\partial}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta}$:

$$C_V = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = 3\left(\frac{\hbar^2 \beta}{\Theta}\right)^2 e^{-\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}} k_B + \mathrm{o}\left(e^{-2\beta \frac{\hbar^2}{\Theta}}\right). \tag{33}$$

3. **Csatolt oszcillátorok**

Tekintsünk N db csatolt kantumos harmonikus oszcillátort, ahol a csatolás erőssége megegyezik a két oszcillátor potenciális energájának amplituódjával.

(a) Határozzuk meg a $Z(T,N)$ állapoösszeget!

(b) Határozzuk meg az $F(T,N)$ szabadenergiát!

(c) Ebből adjuk meg az $S(T,N)$ entrópiát!

(d) Majd ebből a hőkapacitást!

(a) A csatolot oszcillátor Hamilton-operátora

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2 + m\omega^2 (x_1 - x_2)^2. \tag{34}$$

Vezessük be a relatív és tömegközépponti koordinátákat: $x = x_2 - x_1$, $X = \frac{x_1+x_2}{2}$. Ahonnan $x_1 = x/2 + X$, $x_2 = X - x/2$, illetve a láncszabaly alapján $p_{1,2} \sim \frac{\partial}{\partial x_{1,2}} = \frac{\partial X}{\partial x_{1,2}} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_{1,2}} \frac{\partial}{\partial x} \sim \frac{1}{2}\mathcal{P} \pm p$. Innen a Hamilton-operátor:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \frac{\mathcal{P}^2}{4m} + \frac{p^2}{m} + \frac{5}{4}m\omega^2 x^2 + m\omega^2 X^2 = \frac{\mathcal{P}^2}{2(2m)} + \frac{p^2}{2(m/2)} + \frac{1}{2}(m/2)(\sqrt{5}\omega)^2 x^2 + \frac{1}{2}(2m)\omega^2 X^2 \\ &\to E_{n,m} = \hbar\omega(\sqrt{5}n + m + \sqrt{5}/2 + 1/2)\end{aligned} \tag{35}$$

A teljes állapotösszeghez először az egyrészecskés:

$$Z_1 = e^{-\beta \frac{\sqrt{5}+1}{2}\hbar\omega} \sum_{n,m=0}^{\infty} e^{-\beta\sqrt{5}n\hbar\omega} e^{-\hbar\omega} = \frac{4}{\sinh(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \tag{36}$$

Majd innen egszerűen $Z(T,N) = Z_1^N$.

(b) A szabadenergia:

$$F(T,N) = -k_B T \ln\left[Z(T,N)\right] = N k_B T \left[\ln(\sinh(\beta\hbar\omega/2) + \ln(\sinh(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)) + \ln 4\right] \tag{37}$$

(c) Innen az entrópia:

$$\begin{aligned} S = -\frac{\partial F}{\partial T} &= \beta^2 k_B \partial_\beta F = \beta\hbar\omega N k_B \left[\frac{1}{2}\coth(\beta\hbar\omega/2) + \frac{\sqrt{5}}{2}\coth(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)\right] \\ &- N k_B \left[\ln(\sinh(\beta\hbar\omega/2) + \ln(\sinh(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)) + \ln 4\right]. \end{aligned} \tag{38}$$

(d) Innen a hőkapacitás:

$$
\begin{aligned}
C_V = T\partial_T S = -\beta\partial_\beta S = &-(\beta\hbar\omega)^2 N k_B \left[\frac{1}{2}\coth(\beta\hbar\omega/2) + \frac{\sqrt{5}}{2}\coth(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)\right] \\
&+ (\beta\hbar\omega)^2 k_B \left[\frac{1}{4\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} + \frac{5}{4\sinh^2(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)}\right] \\
&+ (\beta\hbar\omega)^2 N k_B \left[\frac{1}{2}\coth(\beta\hbar\omega/2) + \frac{\sqrt{5}}{2}\coth(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/2)\right] \\
&= (\beta\hbar\omega)^2 k_B \left[\frac{1}{4\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} + \frac{5}{4\sinh^2(\beta\sqrt{5}\hbar\omega/4)}\right]
\end{aligned}
\tag{39}
$$

Magas T limesz, $T \to \infty$:

$$C_V = 2Nk_B \,, \tag{40}$$

ami jól megfelel az ekvipartíció tételének, illetve a $T \to \infty$ klasszikus limesznek!