6. statisztikus fizika gyakorlat

1. **Ekvipartíció**
   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 és írjuk át ezek segítségével a Hamilton függvényt!

   (b) Most a megfelelő Gauss integrálok segítségével mutassuk meg, hog ekkor a relatív és tömegközépponti koordinátákra teljesül az ekvipartíció tétele.

   (c) Mutassuk meg továbbá, hogy $\langle Xx \rangle = 0$.

   (d) Ezek segítségével fejezzük ki az eredeti koordináták második momentumait és mutassuk meg, hogy rájuk is érvényben marad az ekvipartíció tétele.

   (a) A Lagrange és Hamilton függvény a két részecske koordinátájával:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}Dx_1^2 + \frac{1}{2}Dx_2^2 + D(x_1 - x_2)^2 \\ L &= \frac{\dot{x}_1^2}{2m} + \frac{\dot{x}_2^2}{2m} - \frac{1}{2}Dx_1^2 - \frac{1}{2}Dx_2^2 - D(x_1 - x_2)^2 \end{aligned} \tag{1}$$

   Most bevezetve az $x = x_1 - x_2$ és $X = \frac{x_1+x_2}{2}$ relatív és tömegközépponti korodinátákat a Lagrange függvény (felhasználva, hogy $x_1 = X + x/2$, $x_2 = X - x/2$)

$$L = \frac{\dot{x}^2}{4m} + \frac{\dot{X}^2}{m} - \frac{5}{4}Dx^2 - DX^2\,, \tag{2}$$

   innen a kanonikus impulzusok: $P = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = 2\frac{\dot{X}}{m}$, $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\dot{x}}{2m}$. Innen az új Hamilton függvény:

$$H = \frac{p^2}{4m} + \frac{P^2}{m} + \frac{5}{4}Dx^2 + DX^2\,. \tag{3}$$

   (b) Ebből a kifejezésből könnyedén lehet származtatni a két kérdéses várhatóértéket, $\langle x^2 \rangle$, $\langle X^2 \rangle$. A rend kedvéért ehhez először adjuk meg a partíciós függvényt

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, \mathrm{d}P\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}X\, e^{-\beta(\frac{p^2}{4m} + \frac{P^2}{m} + \frac{5}{4}Dx^2 + DX^2)} = \frac{4m\pi^2}{\sqrt{5}D}(k_B T)^2\,. \tag{4}$$

   Innen könnyen megadható a két várhatóérték, felhasználva, hogy $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2 e^{-x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, \mathrm{d}P\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}X\, x^2 e^{-\beta(\frac{p^2}{4m} + \frac{P^2}{m} + \frac{5}{4}Dx^2 + DX^2)} = \frac{\sqrt{5}}{4m\pi^2 D(k_BT)^2}\frac{1}{2}\frac{4m\pi^2 D}{\sqrt{5}}(k_BT)^2\frac{4}{5}Dk_BT = \frac{2}{5D}k_BT\,, \\ \langle X^2 \rangle &= \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, \mathrm{d}P\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}X\, X^2 e^{-\beta(\frac{p^2}{4m} + \frac{P^2}{m} + \frac{5}{4}Dx^2 + DX^2)} = \frac{\sqrt{5}}{4m\pi^2 D(k_BT)^2}\frac{1}{2}\frac{4m\pi^2 D}{\sqrt{5}}(k_BT)^2 D = \frac{1}{2D}k_BT\,. \end{aligned} \tag{5}$$

   Vagyis valóban $\langle \frac{5}{4}Dx^2 \rangle = \frac{k_BT}{2}$ és $\langle DX^2 \rangle = \frac{k_BT}{2}$.

   (c) Most megmutatjuk, hogy $\langle xX \rangle = 0$, ami egy egyszerű következménye annak, hogy két páratlan függvény integráljának szorzatával egyenlő a fenti várhatóérték:

$$\langle xX \rangle = \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, \mathrm{d}P\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}X\, xX e^{-\beta(\frac{p^2}{4m} + \frac{P^2}{m} + \frac{5}{4}Dx^2 + DX^2)} \sim \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{d}X\, xX e^{-\beta(\frac{5}{4}Dx^2 + DX^2)} = 0\,. \tag{6}$$

(d) Ezek segítségével és kifejezve $x_{1,2}^2$-t x és X-el a következő adódik

$$\frac{1}{2}D\langle x_1^2\rangle = \langle (x/2+X)^2\rangle = \langle x^2/4\rangle + \langle X^2\rangle + \langle xX\rangle = \frac{3}{10}k_BT \tag{7}$$

$$\frac{1}{2}D\langle x_1^2\rangle = \langle (x/2+X)^2\rangle = \langle x^2/4\rangle + \langle X^2\rangle - \langle xX\rangle = \frac{3}{10}k_BT \tag{8}$$

$$D\langle (x_1-x^2)^2\rangle = D\langle x^2\rangle = \frac{2}{5}k_BT \tag{9}$$

Azaz

$$\langle \frac{1}{2}Dx_1^2 + \frac{1}{2}Dx_2^2 + D(x_1-x_2)^2\rangle = k_BT\,. \tag{10}$$

azaz teljesül, hogy a koordináta rész éppen a teljes átlagos energia felét teszi ki.

2. Tekintsünk egy H_2O molekulát és annak rezgési módusait, forgási és transzlációs energiáját.

(a) A vízmolekula 3 rezgési módussal rendelkezik, melyek frekevenciái $\omega_1 \approx 1.078\times10^{14}, \omega_2 \approx 1.109\times10^{14}$, $\omega_3 \approx 4.795\times10^{13}$. Számoljuk ki az ehhez tartozó partíciós függvényt és adjuk meg az egyes módusokhoz tartozó tipikus hőmérsékleteket, melyek a kvantumos és klasszikus tartományokat 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 hőmérsééklet skálát, ahol a forgási rész közelítőleg lerírható klasszikus megközelítéssel.

(d) Határozzuk meg a hőkapacitást az egyes klasszikus és kvantumos határesetekben.

(a) Egy kvantumos oszcillátorhoz ω tartozó állapotösszeg frekvenciájú

$$Z_\omega = \frac{1}{2\sinh(\beta\hbar\omega/2)}\,. \tag{11}$$

Innen a három rezgési módushoz tartozó partíciós függvény

$$Z_{\rm rezg} = Z_1Z_2Z_2 = \frac{1}{8\sinh(\beta\hbar\omega_1/2)\sinh(\beta\hbar\omega_2/2)\sinh(\beta\hbar\omega_3/2)}\,. \tag{12}$$

Míg a magas hőmérsékletű liemszben, $\beta\to0$, avagy az egyes tagokhoz tartozó küszöbértékek felett, $k_BT > \hbar\omega_{1,2,3}$ a partíciós függvény megfelelő tagjai a klasszikus eredményhez konvergálnak, $Z_{1,2,3} \approx \frac{k_BT}{\hbar\omega_{1,2,3}}$, míg az ellenkező határesetben, $k_BT < \hbar\omega_{1,2,3}$ nullába tartanak. A megfelelő hőmérséklet skálák: $T_1 \approx 84\,\mathrm{K}$, $T_2 \approx 909\,\mathrm{K}$, $T_3 \approx 408\,\mathrm{K}$

(b) A tehetetlenség nyomaték ebben az esetben egyszerűen

$$\Theta = 2m_Hr^2 \approx 3.06\times10^{-47}kg\,m^2\,. \tag{13}$$

ahol r az oxigén és hidrogén atomok távolsága a lineáris közelítésben, $r\approx 9.572\times10^{-11}$, illetve $m_H = 1.6735\times10^{-27}kg$.

(c) A forgási tag a korábbi gyakorlaton elhangzottak alapján

$$Z_{\rm rot} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{-\beta\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta}}\,. \tag{14}$$

Ez a $\beta\to\infty$, avagy a többet mondó $\beta > \frac{\hbar^2}{2\Theta}$ limeszben a $Z_{\rm rot}\approx 1+3\,e^{-\beta\frac{\hbar^2}{\Theta}}$, illetve az ellentétes, $\beta\to0$, $\beta<\frac{\hbar^2}{2\Theta}$ limeszben $Z_{\rm rot}\approx\frac{2\Theta}{\hbar^2}k_BT$.

(d) A transzlációs szbadsági fokokból eredő járulék ekkor a “szoksásos” $Z_{\rm transz} = V\lambda_T^{-3}$, $\lambda_T = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\pi mk_BT}}$.

(e) A fentiekből és korábbi eredményeinkből a fajhő járulékokat is meg tudjuk adni könnyedén

$$\begin{aligned} C_V = -\partial_T\partial_\beta\log(Z_{\rm transz}Z_{\rm rot}Z_1Z_2Z_3) = \frac{3}{2}k_B - \partial_T\partial_\beta\log(Z_{\rm rezg}) \\ + \left(\frac{\beta\hbar\omega_1/2}{\sinh(\beta\hbar\omega_1/2)}\right)^2k_B + \left(\frac{\beta\hbar\omega_2/2}{\sinh(\beta\hbar\omega_2/2)}\right)^2k_B + \left(\frac{\beta\hbar\omega_3/2}{\sinh(\beta\hbar\omega_3/2)}\right)^2k_B\,. \end{aligned} \tag{15}$$

Míg a rezgési tag nem fejezhető ki zárt alakban (ahogyan ezt láttuk az 5. Gyakorlat/2-ben), addig a transzlációs tag a kalsszikus ekvipartíciónak megfelelő $\frac{3}{2}k_BT$ járulékot adja, illetve a rezgési tagok a fentebb említett $k_BT > \hbar\omega$ esetekben a klasszikus ekivpartíció-beli k_BT járulékokat adják, míg ennél kisebb hőmérsékleteken a rezgési járulékok nullába konvergálnak. Ezt nevezzük fajhő lépcsőnek. Hasonlóan a rotációs tag k_BT járuléka is elkezd elűnni a $k_BT < \frac{\hbar^2}{\Theta}$ küszöbérték alatt. Vagyis a tipikus hőmérséklet, ahol a fajhőben már csak a transzlációs szabadsági fokok maradnak érvényben tipikusan $k_BT \sim \frac{\hbar^2}{2\Theta} \approx 3.6 \times 10^{-22} J \to T_c \approx 14.06 K$

3. Tekntsünk két elektront, melyek egy a oldalhosszúságú kocka különböző csúcsain helyezkedhetnek el és egymást a szokásos Coulomb törvény szerint taszítják.

   (a) Határozzuk meg a rendszer állapotösszegét!

   (b) Adjuk meg ebből a hely marginális eloszlás függvényét a hőmérséket függvényében (Figyeljünk a normálásra)!

   (c) Határozzuk meg a két elektron közti átlagos távolságot és annak szórását!

   (a) Az állapotösszeghez meg kell adnunk a különböző konfigurációk energiáit és azok degenerációit. Három lehetséges energiaérték lehetséges, amikor a két elektront a testátló, a lapátló vagy egy oldal köti össze. Ezekben az esetekben az energiák, $E_1 = \frac{\alpha}{\sqrt{3}a}$, $E_2 = \frac{\alpha}{\sqrt{2}a}$, $E_3 = \frac{\alpha}{a}$. A degenerációk pedig rendre, $n_1 = 4$, (a testátlók száma), $n_2 = 12$ (a lappok száma $\times 2$ = a lapátlók száma), $n_3 = 12$ (az élek száma). Összesen ez 28 konfigurációt jelent, ami éppen megegyezik az összes megengedettel, ami $7 \times 8/2 = 28$.
   Innen az állapotösszeg

$$Z = 4e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{3}a}} + 12e^{\frac{\beta\alpha}{\sqrt{2}a}} + 12e^{\frac{-\beta\alpha}{a}}. \tag{16}$$

   (b) Ekkor a hely szerinti eloszlás egy egyszerű súlyfüggvény $r = \sqrt{3}a$, $\sqrt{2}a$, a távolságokkal.

$$P(r = \sqrt{3}a) = \frac{4e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{3}a}}}{Z} = \frac{1}{1 + 3e^{-\beta\alpha(\frac{1}{\sqrt{2}a} - \frac{1}{\sqrt{3}a})} + 3e^{-\beta\alpha(\frac{1}{a} - \frac{1}{\sqrt{3}a})}}, \tag{17}$$

$$P(r = \sqrt{2}a) = \frac{12e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{2}a}}}{Z} = \frac{1}{e^{-\beta\alpha(\frac{1}{\sqrt{3}a} - \frac{1}{\sqrt{2}a})}/3 + 1 + e^{-\beta\alpha(\frac{1}{a} - \frac{1}{\sqrt{2}a})}}, \tag{18}$$

$$P(r = a) = \frac{12e^{-\frac{\beta\alpha}{a}}}{Z} = \frac{1}{e^{-\beta\alpha(\frac{1}{\sqrt{3}a} - \frac{1}{a})}/3 + e^{-\beta\alpha(\frac{1}{\sqrt{2}a} - \frac{1}{a})} + 1}. \tag{19}$$

   Innen könnyen megadható a hely várahtó értéke is

$$\langle r\rangle = aP(r = a) + \sqrt{2}aP(r = \sqrt{2}a) + \sqrt{3}aP(r = \sqrt{3}a) = \frac{e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{3}a}} + 3\sqrt{2}e^{\frac{\beta\alpha}{\sqrt{2}a}} + 3\sqrt{3}e^{\frac{-\beta\alpha}{a}}}{e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{3}a}} + 3e^{\frac{\beta\alpha}{\sqrt{2}a}} + 3e^{\frac{-\beta\alpha}{a}}}a. \tag{20}$$

$$\langle r^2\rangle = a^2P(r = a) + 2a^2P(r = \sqrt{2}a) + 3a^2P(r = \sqrt{3}a) = \frac{e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{3}a}} + 6e^{\frac{\beta\alpha}{\sqrt{2}a}} + 9e^{\frac{-\beta\alpha}{a}}}{e^{-\frac{\beta\alpha}{\sqrt{3}a}} + 3e^{\frac{\beta\alpha}{\sqrt{2}a}} + 3e^{\frac{-\beta\alpha}{a}}}a^2 \tag{21}$$

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

$$\mathcal{P}(v) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2k_BT}\right)^{3/2} v^2 e^{-\beta\frac{m}{2}v^2}, \text{ ha } v \geq 0 \text{ és } \mathcal{P}(v) = 0, \text{ ha } v < 0 \tag{22}$$

   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!

   (a) A sebesség várható értéke triviálisan zárus, hiszen egy páratlan fggvényt integrálunk a $[-\infty, \infty]$ intervallumon:

$$\langle v\rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2k_BT}\right)^{3/2}\int_0^\infty \mathrm{d}v\, v^3\, e^{-\beta\frac{m}{2}v^2} = \frac{1}{2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{2k_BT}\right)^{3/2}\left(\frac{2k_BT}{m}\right)^2 = \sqrt{\frac{2k_BT}{m\pi}} \approx 2.14\,\mathrm{m/s}. \tag{23}$$

(b) A tipikus érték, a módusz a eloszlás legvalószínűbb értékével egyezik meg, azaz az eloszlás függvény maximumhelyével:

$$\partial_v (v^2 e^{-\beta \frac{m}{2} v^2}) = v e^{-\beta \frac{m}{2} v^2} (2 - \beta m v^2) = 0 \to v_{\mathrm{tip}} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \approx 3.8\,\mathrm{m/s}\,. \tag{24}$$

(c) Egy hasnonlóan hasznos jellemző mennyiség a szórás, mely a következőképpen számolhat ki:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\, v^4 e^{-\beta \frac{m}{2} v^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{3/2} \left(\frac{m}{2k_B T} \right)^{-5/2} = 3 \frac{k_B T}{m} \approx 4.66\,\mathrm{m/s}\,. \tag{25}$$

Érdekes, hogy a szórás és a tipikus érték meglepően közel annak egymáshoz, $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{3/2} v_{\mathrm{tip}}$.