

6. statisztikus fizika gyakorlat

2023. április 17.

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, illetve a megfelelő kanonikus impulzusokat és írjuk át ezek segítségével a Hamilton függvényt!
 - (b) Most a megfelelő Gauss integrálok segítségével mutassuk meg, hogy 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 a Hamilton függvény helyfüggő részére is érvényben marad az ekvipartíció tétele!
2. Tekintsünk egy H_2O molekulát és annak rezgési módusait, forgási és transzlációs energiáját.
 - (a) A vízmolekula 3 rezgési módussal rendelkezik, melyek frekvenciái $\omega_1 \approx 1.078 \times 10^{14}$ Hz, $\omega_2 \approx 1.109 \times 10^{14}$ Hz, $\omega_3 \approx 4.795 \times 10^{13}$ Hz. Számoljuk ki az ehhez tartozó partíciós függvényt és adjuk meg az egyes módusokhoz tartozó tipikus hőmérsékleteket, melyek a kvantumos és klasszikus tartományokat szeparálják.
 - (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 tipikus hőmérséklet skálát, ahol a forgásis 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 törvény szerint taszítják.
 - (a) Határozzuk meg a rendszer állapotösszegét!
 - (b) Adjuk meg ebből a hely marginális eloszlás függvényét a hőmérséklet függvényében (Figyeljünk 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

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

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?

Segítség: Használjuk ki, hogy $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$, ha $x > 0$, ahol $\Gamma(x) = \int_0^\infty dt t^{x-1} e^{-t}$.

2. Tekintsünk egy O_2 molekulát és annak rezgési módusát, forgási és translációs energiáját.
- (a) Az oxigén molekula egy rezgési módussal rendelkezik $\omega \approx 4.66 \times 10^{13}$ Hz. Számoljuk ki az ehhez tartozó partíciós függvényt és adjuk meg azt a tipikus hőmérsékleteket, melyek a kvantumos és klasszikus tartományokat szeparálják.
 - (b) Becsüljük meg az oxigén molekula tehetetlenségi nyomatékát, ha két oxigén atom kötési távolsága $r \approx 1.2 \times 10^{-10}$ m és a tömege $m = 5.312 \times 10^{-26}$ kg.
 - (c) Ennek segítségével adjuk meg a partíciós függvény forgási és translációs részét és adjuk meg azt a tipikus hőmérséklet skálát, ahol a forgási rész közelítőleg leírható klasszikus megközelítéssel.
 - (d) Határozzuk meg a hőkapacitást az egyes klasszikus és kvantumos határesetekben!
 - (e) **1. Bónusz:** Skicceljük fel a megfelelő fajhőlépcsőt!
 - (f) **2. Bónusz:** Ábrázoljuk numerikusan a gyakorlaton felskiccelt fajhőlépcsőt a megadott értékekkel (A forgási résznél ellenőrizzük, hogy elég tagot vettünk-e figyelembe az állapotösszeg meghatározásánál)!
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 nagyra tekinthetjük.
- (a) Határozzuk meg T hőmérsékleten az egyrészecskés kanonikus állapotösszeget!
 - (b) Határozzuk meg a kanonikus sűrűségből egyetlen gázatom $\rho(\mathbf{r})$ eloszlását! Legyen ennek a normálása $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = 1$.
 - (c) A normális eloszlás szórásából becsljük meg T hőmérsékleten a gázfelhő r_0 sugarát! Hogyan függ ez a hőmérséklettől?