7. statisztikus fizika gyakorlat

2022. április 8.

1. A klasszikus ideális gáz egyrészecskés kanonikus állapotösszege $Z_1 = \frac{V}{\lambda_T^3}$, ahol $\lambda_T \propto \frac{1}{\sqrt{T}}$ a gáz termikus de Broglie-hullámhossza.
   (a) Határozzuk meg a Z_N N-részecskés kanonikus állapotösszeget T hőmérsékleten!
   (b) Határozzuk meg a $\mathcal{Z}$ nagykanonikus állapotösszeget T hőmérsékleten μ kémiai potenciál mellett!
   (c) Határozzuk meg a $\Phi(T, V, \mu)$ nagykanonikus potenciált!
   (d) Határozzuk meg a $\langle N \rangle$ átlagos részecskeszámot és a részecskék számának $\langle \delta N^2 \rangle$ varianciáját!
   (e) Mekkora a részecskeszám $\frac{\sqrt{\langle \delta N^2 \rangle}}{\langle N \rangle}$ relatív szórása?

2. Vizsgáljunk egy óriás abszorbens molekula és egy adott p nyomású és T hőmérsékletű ideális gáz kölcsönhatását. A molekula legfeljebb két atomot tud megkötni a gázmolekulákból. Ha egy atom van megkötve a molekulán akkor a kötési energia $-u$, ha két atom van megkötve a molekulán akkor a kötési energia $-2v$.
   (a) Határozzuk meg a $\mathcal{Z}$ nagykanonikus állapotösszeget!
   (b) Határozzuk meg a Φ nagykanonikus potenciált!
   (c) Határozzuk meg az abszorbeált gázrészecskék átlagos számát a hőmérséklet és a nyomás függvényében, $\langle N_{\text{absz}} \rangle$!
   (d) Vizsgáljuk meg a $p \to 0$ és a $p \to \infty$ határeseteket!

3. Tekintsünk egy valamilyen adszorbens felületre lerakódó szén-monoxid molekulákból álló rendszert! A rácsgáz-modellben N lehetséges pozícióra kötődhetnek CO molekulák, és a molekulák polarizációja két ellentétes irányban állhat. Mindkét állapotban ε energianyereséggel jár egy molekula megkötése. Vizsgáljuk T hőmérsékleten és μ kémiai potenciál mellett a rendszert!
   (a) Mekkora a $\mathcal{Z}$ nagykanonikus állapotösszeg?
   (b) Határozzuk meg a Φ nagykanonikus potenciált!
   (c) Mekkora az $\langle n \rangle$ átlagos részecskeszám? Mekkora kémiai potenciál esetén lesz alapállapotban mind az N rácshely betöltve?
   (d) Határozzuk meg az $\mathcal{S}$ entrópiát!
   (e) Feltéve, hogy alapállapotban $\langle n \rangle = N$, mekkora az entrópia a $T \to 0$ limeszben? Értelmezzük az eredményt!

Példák otthoni gyakorlásra:

1. Tekintsünk egy V térfogatú zárt rendszert és ezen belül egy kisebb v térfogatú részrendszert. Míg a teljes V térfogatú rendszerben mind az energia, mind a részecskeszám fix, addig a kisebb, v térfogatú rendszerre tekinthetünk úgy mint egy nyílt rendszerre, mely számára a maradék $V - v$ térfogatú külső rendszer hő- és részecske forrásként szolgál, vagyis a v térfogatú rendszer tulajdonságait nagykanonikus sokaságban tudjuk vizsgálni.
   (a) Adjunk általános összefüggést a nagykanonikus és a kanonikus állapotösszegek között!
   (b) Ennek segítségével fejezzük ki az átlagos részecskeszámot és a részecskék számának varianciáját!
   (c) Határozzuk meg egy adott n részecskés állapot valószínűségi súlyfüggvényét! Milyen jól ismert valószínűségi eloszlás ez?

2. Egy felületen van N_0 adszorpciós pozíció. Adott T hőmérsékleten a felület $N \leq N_0$ molekulát adszorbeált. Egyetlen molekula adszorpciója ε energianyereséggel jár. Számoljuk ki az adszorbeált gáz kémiai potenciálját N függvényében!

   (a) Mekkora a Z_N N-részecskés állapotösszeg?

   (b) Mekkora a $\mathcal{Z}$ nagykanonikus állapotösszeg μ kémiai potenciál mellett?

   (c) Határozzuk meg a $\Phi(T, V, \mu)$ nagykanonikus potenciált!

   (d) Határozzuk meg az $\langle N \rangle(\mu)$ átlagos adszorbeált molekulaszámot!

   (e) Inverzióval határozzuk meg a $\mu(N)$ függvényt!