

Isz részecskeiből álló rendszerek ($N \sim 10^{23}$)

mikroszkopikus leírás

Kvantummechanika,
Spec. határesetben
Klasszikus mechi.

$$f \sim 10^{23}$$

$$\text{idő} \gg 10^{-6} \text{ s}$$
$$\text{távolság} > 400 \text{ nm}$$

makroszkopikus leírás

Mechanika + elektrodinamika
+ termodinamika,

Kerettörvények, amelyek
anyagot jellemzők (tapasztalat)
termelet feljessé.

A makroszkopikus leírásst lehetővé teszi:
távolság és időskálák skálázása

A makroszkopikus megfigyelés az atomi távolságoknál/
időknél nagyobb távolságokra/időkre átlagol;
a jellemző időket/távolságokat a határfeltételek
határozzák meg; és távolságokra lokális egyensúly
gyorsan kialakul.

Stat. fiz.: a mikroszkopikus és makroszkopikus leírás
közt fennálló kapcsolatot.

A kl./év. mechanikával szemben a stat. leírás csak
részleges információkat tartalmaz.

Okai: — gyáborlat: $N \sim 10^{23}$

— elvi: véges mérési pontosság, állapot preparálása,
határoztatlansági reláció.

A valószínűségi leírás ellenére makroszkopikus rendszerekre
lényegében határozott jellegűvé tud tenni

$$\Delta f^2 = \overline{(f - \bar{f})^2}, \quad \frac{\Delta f}{\bar{f}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad N \sim 10^{23}!$$

Mátréht fábberet nyújt, mint a maárosszépítés leírás
hármastatásá (korreláció, Notár folyamat, minden
jelenség egy nagy szabadsági fokú "szörnyetben" jellemezhető.

Általában: a stat. fiz. rendszer információal leírát
rendszere elmélet.

Kis szabadsági fokú rendszerek — 2.07.

Gyűjtemény: Clausius
Maxwell (1831-1879)
Boltzmann (1844-1906) } Kinetikus gázelmélet,
a mozgás egyenletét
megoldás, a statisztika
csak segítségével a
sok részecske bevezetéséhez
a klasszikus stat. mech. megfogalmazása
önálló fejezetként; sok szabadsági fok, stb.

J. Gibbs (1839-1903) a klasszikus stat. mech. megfogalmazása
önálló fejezetként; sok szabadsági fok, stb.

1920-30-as évek: megfogalmazás a kvantummechanika nyelvére
(Ehrenfest, E. A. Uhlmann, P. H. Fowle,
R. Tolman)

Vázlat: egyensúlyi stat. mech. alapjai
a termodinamika hármastatásá
Kölcsönható rendszerek (kvantumszámítások, a Hágai értekezés
fázisátalaulások)
irreverzibilis (nem egyensúlyi) jelenségek leírása
(Master-egyenlet, Langevin-egyenlet, irrev. termo. hármastatás)

Kapcsolódási pontok: Kísérleti fizika (termodinamika)
mechanika / kvantummechanika.

Irodalom: L. D. Landau, E. M. Lifshic: Elméleti fizika V. Stat. fiz. I
IX. Stat. fiz. II.

R. Kubo: Stat. mech. (példákkal és feladatokkal) (Művelési Központ)

Elméleti fizika példatár 3. kötet

Szépfi István - Tóth Tamás: jegyzet (koulapon)
- Kondor László (1995)

Valószínűségszámítás

(2)

Klasszikus mech. f. szabadsági foka r.

$q = (q_1, \dots, q_f)$ általános koordináták

Konzervatív rendszer: $L(q, \dot{q}) = T - U$

Mozgásegyenlet: $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, i = 1, 2, \dots, f$

alt. impulzus: $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$

Hamilton-féle mozgásegyenletek: $(q, p) = (q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$

$H(q, p) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L = T + U$, (T a \dot{q} homogén másodfokú, pozitív definit függvénye.)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, i = 1, 2, \dots, f$$

Fázis tér (Γ): $2f$ dimenziós tér, egy makroszkopikus állapotot egy pont, az időbeli fejlődést egy trajektória jellemzi

$$(q, p)_t = (q(q_0, p_0, t), p(q_0, p_0, t))$$

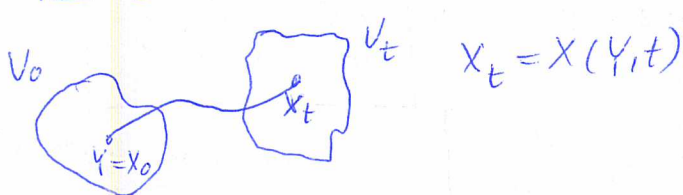
Megmaradó mennyiségek: pl.: energia a mozgás a. $H(p, q) = E$ felületen történik

A fázis tér összehasonlítása: Összenyomhatatlan áramlás

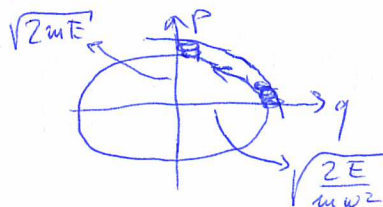
$$\underline{V} = (\dot{q}, \dot{p}) = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_f)$$

$$\text{div } \underline{V} = \sum_i \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \sum_i \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) = 0 \quad \left. \vphantom{\text{div } \underline{V}} \right\} \text{Liouville-tétel}$$

Más megfogalmazás: $X = (q, p), dX = dq dp = \prod_i dq_i dp_i$



(Érfeszíthető X az X segítségével)



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

lin. oszcillátor

$$\int_{V_t} dX = \int_{V_0} F(x, y) dV, \text{ ahol } F(x, y) = \frac{\partial(x_1, \dots, x_{2f})}{\partial(y_1, \dots, y_{2f})}$$

Jacobi-determináns

Erre:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} dX = \int_{V_0} \frac{d}{dt} F(x, y) dV \quad \text{és}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F(x, y) &= \sum_{i=1}^{2f} \frac{\partial(x_1, \dots, x_i, \dots, x_{2f})}{\partial(y_1, \dots, y_{2f})} = \sum_{i=1}^{2f} \frac{\partial(x_1, \dots, x_i, \dots, x_{2f})}{\partial(x_1, \dots, x_i, \dots, x_{2f})} \frac{\partial(x_1, \dots, x_{2f})}{\partial(y_1, \dots, y_{2f})} \\ &= \sum_{i=1}^{2f} \frac{\partial x_i}{\partial x_i} F = \text{div } \underline{V} \cdot F, \quad V = (\dot{q}, \dot{p}) = \dot{X} \end{aligned}$$

Mivel $\text{div } \underline{V} = 0$ (Liouville-tétel) $\Rightarrow \frac{d}{dt} F = 0$

$$\Rightarrow \boxed{V_t = V_0}$$

a fázis térfogat invariáns

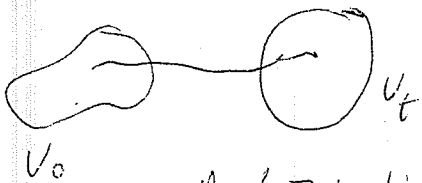
és $t=0$ -ban $F=1$, így minden időben is ez.

Valószínűség eloszlás sűrűség fu-e: $\rho(p, q, t)$

Szabáság: N pont, $N\rho$ sűrűséggel szórva a fázistérben, $W \gg 1$

Normálási feltétel:

$$\int_{\Gamma} \rho(p, q, t) dpdq = 1$$



$$\int_{V_t} \rho(p, q, t) dpdq = \int_{V_0} \rho(p, q, 0) dpdq$$

A fázis térfogat invariáns, így $dV_t = dV_0$ és

$\rho = \text{áll.}$ a trajektória mentén:

$$\rho(p_0, q_0; 0) = \rho(p_t, q_t; t), \text{ azaz}$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{ \rho, H \} = 0 \Rightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \{ H, \rho \}}$$

[Poisson-zárójel: $\{ f, g \} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)]$

Liouville egyenlet

Más képpen a Liouville-egyenlet:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial q_i} (\dot{q}_i \rho) + \frac{\partial}{\partial p_i} (\dot{p}_i \rho) \right] = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \underline{V}) = 0$$

↑ kontinuitási-egyenlet

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \underbrace{V \text{grad} \rho + \rho \text{div} V}_{\text{Liouville-tétel miatt}} = 0$$

{S, H}

$$\Rightarrow \frac{d\rho}{dt} = 0 \rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\dot{q}_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \right) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} - \frac{\partial S}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \right)$$

Átlagolás: $\bar{f} = \overline{f(q,p)} = \int_{\Gamma} f(q,p) \rho(q,p,t) dq dp$

Stacionárius állapot: $\{H, \rho\} = 0$

Erő az a koordináták és impulzusok olyan kombinációját függvény, amelynek megvalósult állapotok (mozgásállapotok); ezek általában a mozgásegyenletek első integráljai: E, p, L, ...

pl.: $\rho(H)$ esetében: $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial H} \{H, H\} = 0$

Megjegyzés: Hamilton-féle mozg. egyenletek levezetése:

$$L(q, \dot{q}) = T(\dot{q}, q) - U(q)$$

$$dL = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} d\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial q} dq = p d\dot{q} + \dot{p} dq$$

def: $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \dot{p}$

Legendre-transzformáció: $-H = L - p\dot{q} \Rightarrow$

$$-dH = -\frac{\partial H}{\partial p} dp - \frac{\partial H}{\partial q} dq = p d\dot{q} + \dot{p} dq - d(p\dot{q}) = p d\dot{q} + \dot{p} dq - \dot{q} dp - p d\dot{q} = \dot{p} dq - \dot{q} dp$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q} \quad \text{és} \quad -\frac{\partial H}{\partial q} = \dot{p}}$$

Kvantummechanikai leírás:

a.) "Tiszta" állapot: állapot kv. $\psi(q_1, q_2, \dots, q_f)$
 időbeli fejlődés: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$
 véges térfogat vagy
 zöftt rendeltet értékek
 diszkrét spektrum,
 energia szintek

formális megoldás:
 $\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi(0)$

\hat{f} fizikai mennyiség a Haza: $\bar{f} = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle$ és $\langle \psi | \psi \rangle = 1$
 Kifejtés: $\{|n\rangle\}_1^\infty$ teljes, ortogonális bázis

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow \langle n | \psi \rangle = c_n$$

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

$$\bar{f} = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \underbrace{\langle \psi | n \rangle}_{c_n^*} \underbrace{\langle n | \hat{f} | m \rangle}_{f_{nm}} \underbrace{\langle m | \psi \rangle}_{c_m} = \sum_{n,m} c_n^* c_m f_{nm}$$

Az n -edik állapot valószínűsége: $P_n = |c_n|^2 = |\langle n | \psi \rangle|^2$

b.) "Ezért állapot": $\{|\psi_\alpha\rangle\}$ az állapotok sokasága
 (súgárak a Hilbert-térben)
 $\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = 1$

Egy $|\psi_\alpha\rangle$ állapot P_α valószínűséggel fordul elő; $\sum_\alpha P_\alpha = 1$

A sokaság éppben $|\psi_\alpha\rangle$ állapot P_α gyakorisággal fordul elő.

$$\hat{f} = \sum_\alpha P_\alpha \langle \psi_\alpha | \hat{f} | \psi_\alpha \rangle = \sum_{n,m} P_\alpha \underbrace{\langle \psi_\alpha | n \rangle}_{c_{n\alpha}^*} \underbrace{\langle n | \hat{f} | m \rangle}_{f_{nm}} \underbrace{\langle m | \psi_\alpha \rangle}_{c_{m\alpha}} = \textcircled{*}$$

$$= \sum_\alpha P_\alpha c_{n\alpha}^* c_{m\alpha} f_{nm}$$

$$\textcircled{*} = \sum_{n,m} \sum_\alpha P_\alpha \langle m | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\alpha | n \rangle f_{nm} = \boxed{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{f})}, \text{ ahol}$$

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha P_\alpha |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| \text{ és } f_{nm} = \langle m | \hat{f} | n \rangle$$

$\hat{\rho}$ tulajdonságai

1) Hermitikus: $S_{mn} = \sum_{\alpha} c_{n\alpha}^* c_{m\alpha} P_{\alpha} = \left(\sum_{\alpha} c_{m\alpha} c_{n\alpha}^* P_{\alpha} \right)^* = S_{nm}^*$

2) $\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_n S_{nn} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \underbrace{\sum_n c_{n\alpha}^* c_{n\alpha}}_{=1} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} = 1$ Normálizált feltétel

3) $S_{nn} \geq 0$, amivel a valószínűsége, hogy a rendszer a ψ_n állapotban található
 $\hookrightarrow S_{nn} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |c_{n\alpha}|^2 \geq 0$

4) $\hat{\rho}$ diagonális rendszerben: $S_{mn} = P_n \delta_{mn}$

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \hat{P}_{\psi_{\alpha}} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}|$$

$$\bar{\rho} = \sum_n P_n f_{nn}, \quad \left(\sum_n P_n = 1 \right)$$

5) $\text{Tr} \rho^2 \leq 1 \iff \sum_n S_{nn}^2 \leq \left(\sum_n S_{nn} \right)^2 = (\text{Tr} \rho)^2 = 1$
 \uparrow a szűrőes matriks pozitív, mivel $S_{nn} \geq 0$

$\text{Tr} \rho^2 = 1$, akkor és csak akkor, ha tiszta állapot vizsgálunk
(diag. bázisban: $\text{Tr} \rho^2 = 1 \rightarrow$ a szűrőes matriks mind zérusok, legfeljebb egy diagonális elem élemből zérusok, $\sum_n S_{nn} = 1$, így ez az elem = 1 \rightarrow tiszta állapot)

Pl.: tiszta állapot $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$; $\rho^2 = \rho$ projektor-op.

A unitary matrix időfejlődése,

(5/a)

A Liouville-Von Neumann-egyenlet

Schrödinger egyenlet: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$

$\Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi| = \langle\psi| \hat{H}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}| = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}| + |\psi_{\alpha}\rangle \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi_{\alpha}| \right) \\ &= \sum_{\alpha} P_{\alpha} \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}| + \frac{1}{-i\hbar} |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}| \hat{H} \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} P_{\alpha} (|\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}| \hat{H} - \hat{H} |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}|) = \end{aligned}$$

$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}]}$

Schrödinger-
Egyenlet

Explicit alak: $|\psi_{\alpha}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_{\alpha}(0)\rangle$
az állapot időfejlődése.

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\psi_{\alpha}(t)\rangle \langle\psi_{\alpha}(t)| = \sum_{\alpha} P_{\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_{\alpha}(0)\rangle \langle\psi_{\alpha}(0)| e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

$\Rightarrow \boxed{\hat{\rho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{\rho}(0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}}$

Megjegyzés: Heisenberg Egyenlet az operator időfejlődése

$\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]$ \ominus előjel a $\hat{\rho}$ -hoz képest!

A Neumann-egyenlet átalakítható dissipatív rendszerre:

Stacionarius sobasagbau:

$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = 0$, arast $[\hat{\rho}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow$ eryttere diagonallizalható

Ma $\hat{\rho}$ a \hat{H} függvénye, arast $\hat{\rho} = g(\hat{H})$, ekkor

$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = 0$, stac. sobasag, ekkor

energia reprezentacioban: $\rho_{nm} = \rho_{nm} P(E_n)$

$(P(E_n) = g(E_n))$

↑
a n-dik energizallapot valoszinusege

Analóg képletel:

fázis ter
 $\rho(p, q)$

$\int \rho(p, q) \rho(p, q) dp dq$

$\int \rho dp dq = 1$

$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}$

Hilbert ter
 $\hat{\rho}$

$Tr(\hat{\rho} \hat{\rho}) = \sum_{nm} \rho_{nm} f_{nm}$

$Tr \hat{\rho} = 1$

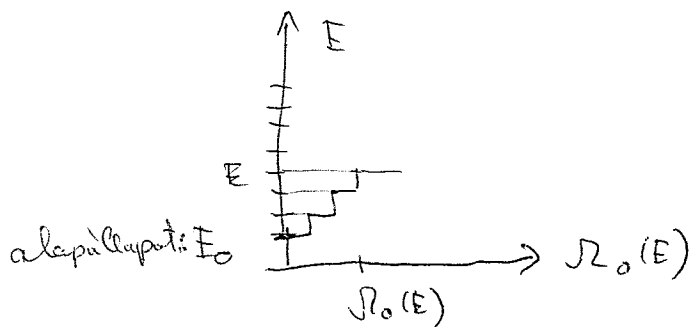
$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, H]$

(vagy $i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$)

Energiaállapotok statisztikája: állapotok száma

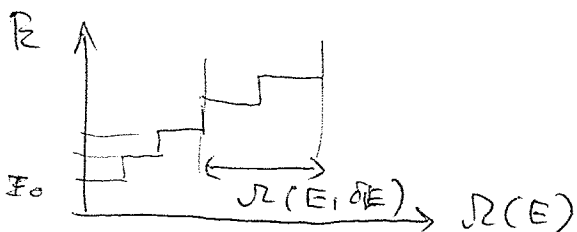
Kitüntetett állapotok juttatva a stat. fiz.-ben.

Kv.: diszkrét spektrum



$$\Omega_0(E) = \sum_{E_n < E} 1$$

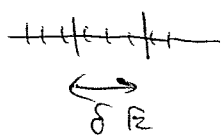
E energiánál kisebb energiájú állapotok száma



$$\Omega(E, \delta E) = \Omega_0(E + \delta E) - \Omega_0(E)$$

Macroscopicus rendszer energiájai gyakran sűrűn helyezkednek el, $\Omega_0(E)$ kvázi folytonos.

Ha δE -n belül még sok állapot van, de δE elég kicsi, akkor

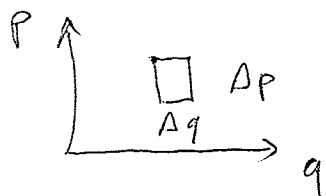


$$\Omega(E, \delta E) = \omega(E) \delta E \quad \xrightarrow{\text{széles } \Omega_0(E+\delta E)} \quad \omega(E) = \frac{d\Omega_0}{dE}$$

\uparrow állapotok sűrűsége

Kl.: A kl. mech a kv. mech határesetek

fázistér egy tartományában $\Omega_0(E) \sim$ fázistérfogattal (hatás) \neq dimenziójú.



1) Korespondencia:

határozatlansági reláció

$\Delta P \Delta q \sim h$ cellát jelentenek 1 állapotot.

$$\Omega_0(E) = \int_{H(p,q) \leq E} \frac{d^f q d^f p}{h^f}$$

Érkeintés
 étvélis;
 illusztráció fogja, hogy
 az a kifejezés
 helyes

f : szabadsági fokok száma
 V q-p párra

2) atomos rétekszel problémája:

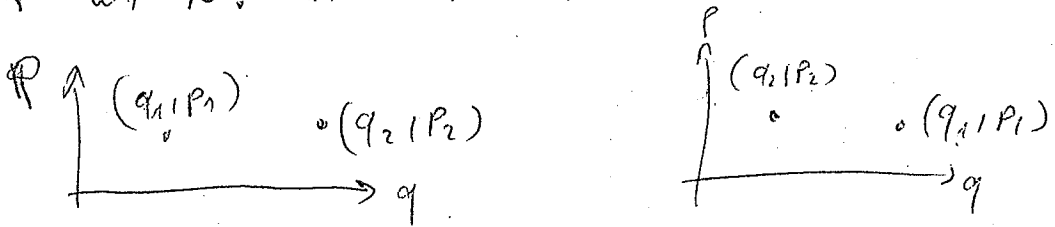
N db atomos rétekszelből álló gáz, megkülönböztethetetlen

f = 3N

$$\Omega_0(E) = \int_{H(p_i, q_i) \leq E} \frac{d^{3N} q d^{3N} p}{h^{3N} \cdot N!}$$

A (p_i, q_i) párok permutálása nem ad új állapotot
 → túlszámolás

A kl. statisztikában a Gibbs-paradoxon utalt
 először az $N!$ szükséges tényezőre (később).



Gibbs-paradoxon: lásd később

Ha az N szabadsági fokú rendszer állapotjelölésére

7/a

Termodinamikai határeset: $f \rightarrow \infty$, $\frac{E}{f} = \text{állandó}$;

az aszimptotikus, végtelen tagokat tartjuk meg.

$A = O(1)$ azt jelenti, hogy a term. határesetben

A véges marad; $B = O(f) \Rightarrow \frac{B}{f} = O(1)$.

Példák:

a) N db lineáris oszcillátor:

kl.:
$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right)$$

$$\Omega_0(E) = \frac{1}{h^N} \int_{H \leq E} d^N q d^N p = ?$$

úgy változik: $Q_i = \sqrt{\frac{m}{2}} \omega q_i$ | $P_i = \frac{p_i}{\sqrt{2m}}$

$H \leq E \Rightarrow \sum_{i=1}^N (P_i^2 + Q_i^2) \leq E$, $2N$ dimenziós, \sqrt{E} sugarú gömb térfogata

$$\Omega_0(E) = \frac{1}{h^N} \cdot \left(\frac{2}{m}\right)^{N/2} \cdot \frac{1}{\omega^N} (2m)^{N/2} \int dQ_i dP_i =$$

Jacobi det.

$$= \frac{1}{h^N} \frac{1}{\omega^N} \cdot \frac{\pi^{2N/2}}{\Gamma(1 + \frac{2N}{2})} \cdot (E)^{2N} = \dots = \left(\frac{E}{h\omega}\right)^N \frac{1}{N!}$$

Megj.: r sugarú, d dimenziós gömb térfogata

$$V_d(r) = \frac{\tilde{v}^{d/2}}{\Gamma(1 + \frac{d}{2})} r^d$$

$\Gamma(n) = (n-1)!$, n egész, $\Gamma(k) = \int_0^\infty e^{-t} t^{k-1} dt$

$$\ln \Omega_0(E) = N \ln \frac{E}{N\epsilon} - \ln N! = N \left(\ln \frac{E}{N\epsilon} + 1 \right) + O(\ln N)$$

Megj: $\ln N! \approx N \ln N - N$, ha $N \gg 1$, $O(\ln N)$ hibival

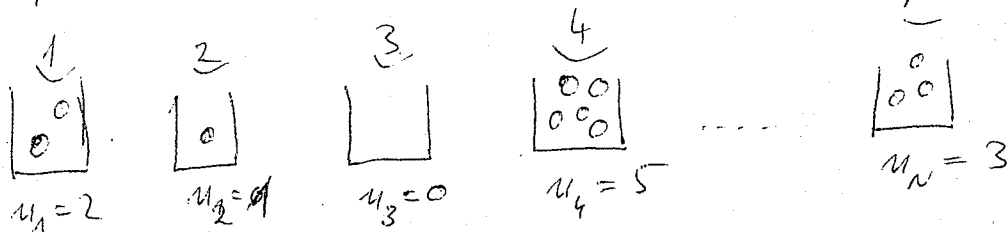
$$\Rightarrow \Omega_0(E) = \dots \approx \left(\frac{eE}{N\epsilon} \right)^N, \quad N \rightarrow \infty, \quad \frac{E}{N} = \text{all.}$$

Ker: $E = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\epsilon}{2} + n_i \cdot \epsilon \right) = \frac{1}{2} N\epsilon + M\epsilon$

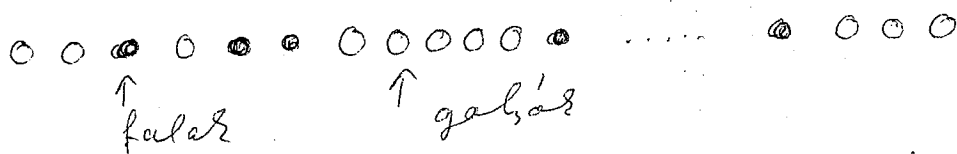
ahol $M = \sum_{i=1}^N n_i = \frac{E}{\epsilon} - \frac{N}{2}$ $E \leftrightarrow M$
kapcsolat

\downarrow
N db nem negatív egész szám

N db dobozban M db golyó



$N+M-1$ elem (fal és golyó)



A falak és golyók megkülönböztethetlenség

$$\Omega_0(E) = \frac{(N+M-1)!}{M! (N-1)!}$$

termidin. határeset: $N \rightarrow \infty$, de $\frac{E}{N}$, azaz $\frac{M}{N} = \text{véges}$

$$\begin{aligned} \ln \Omega(E) &\approx (M+N) \ln(N+M) - M \ln M - N \ln N + N \\ &= (M+N) \ln \frac{M+N}{N} - M \ln \frac{M}{N} = N \left\{ \left(\frac{M}{N} + 1 \right) \ln \left(\frac{M}{N} + 1 \right) - \frac{M}{N} \ln \frac{M}{N} \right\} = \end{aligned}$$

$$\ln \Omega_0(E) = N \cdot \left\{ \left(\frac{E}{N\epsilon\omega} + \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{E}{N\epsilon\omega} + \frac{1}{2} \right) - \left(\frac{E}{N\epsilon\omega} - \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{E}{N\epsilon\omega} - \frac{1}{2} \right) \right\}$$

A hiba: $\mathcal{O}(\ln N)$, $\frac{E}{N} = \text{veges}$

Kor \rightarrow el. hatareret: $\frac{E}{N} \gg \epsilon\omega$

Felhasználjuk az alábbi közelítést:

$$\begin{aligned} x \gg a, \quad (x+a) \ln(x+a) &= (x+a) \left\{ \ln x + \ln \left(1 + \frac{a}{x} \right) \right\} \approx \\ &\approx x \ln x + a \ln x + a + \mathcal{O}\left(\frac{a^2}{x}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Igen: } \ln \Omega_0(E) &= N \left\{ \frac{E}{N\epsilon\omega} \ln \frac{E}{N\epsilon\omega} + \frac{1}{2} \ln \frac{E}{N\epsilon\omega} + \frac{1}{2} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{E}{N\epsilon\omega} \ln \frac{E}{N\epsilon\omega} + \frac{1}{2} \ln \frac{E}{N\epsilon\omega} + \frac{1}{2} \right) \right\} = \\ &= N \left\{ \ln \frac{E}{N\epsilon\omega} + 1 \right\} \end{aligned}$$

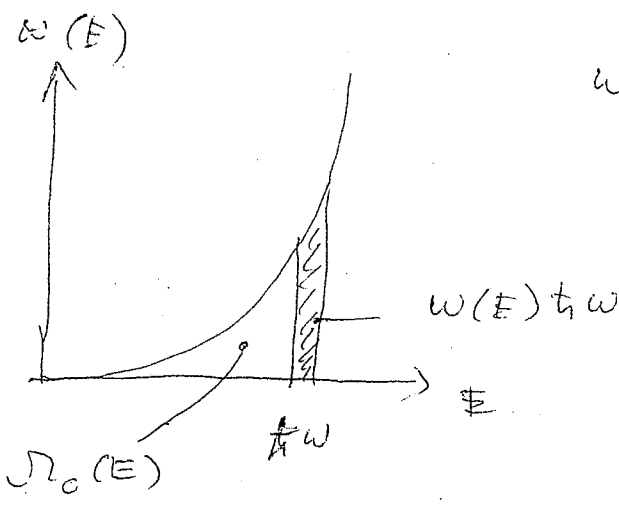
Ezt leaptuk el az előző lépésben is!

$$\Rightarrow \Omega_0(E) = \left(\frac{eE}{N\epsilon\omega} \right)^N$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow W(E) &= \frac{d\Omega_0(E)}{dE} = \frac{d}{dE} \left(\frac{eE}{N\epsilon\omega} \right)^N = N \left(\frac{eE}{N\epsilon\omega} \right)^{N-1} \cdot \frac{e}{N\epsilon\omega} = \\ &= \left(\frac{E}{N\epsilon\omega} \right)^{N-1} \frac{e}{\epsilon\omega} \end{aligned}$$

Ha $\frac{E}{N} = \text{állando}$: $\Omega_0(E, N) \sim e^N$

Ha $N = \text{rögzített}$: $\Omega_0(E, N) \sim E^N$



$$\omega(E) \sim \left(\frac{E}{N\hbar\omega}\right)^N e^{-N}$$

$N-1 \approx N, \hbar\omega$
 $N \gg 1$

$$\omega(E)\hbar\omega \approx \Omega_0(E)$$

(kl.)
 $N \rightarrow \infty$

b.) Idealis gáz, N részecske, U hőfogyatás:

$$U = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{p_{\alpha}^2}{2m}$$

$$\Omega_0(E) = \int_{H \leq E} \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \int_{\sum_{i=1}^{3N} p_i^2 \leq 2mE} d^{3N}p$$

3N dimenziós, $\sqrt{2mE}$ sugarú gömb hőfogyatás

$$= \frac{V^N}{h^{3N} N!} (2mE)^{\frac{3N}{2}} \frac{\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma(1 + \frac{3N}{2})} = \frac{1}{N!} \frac{1}{\Gamma(1 + \frac{3N}{2})} \left(\frac{2\pi m E V^{2/3}}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}}$$

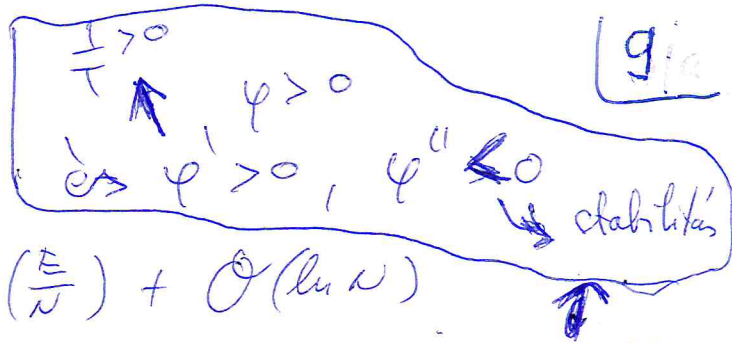
$$\Rightarrow \ln \Omega_0(E) = -N \ln N + N - \frac{3N}{2} \ln \frac{3N}{2} + \frac{3N}{2} + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{2\pi m E V^{2/3}}{h^2}\right)$$

$$= \frac{5N}{2} + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{2\pi m E V^{2/3}}{h^2} \frac{2}{3N} \frac{1}{N^{2/3}}\right) =$$

$$= \frac{5N}{2} + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{4\pi m}{3h^2} \frac{E}{N} \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3}\right)$$

Ha $\frac{E}{N}, \frac{V}{N}$ rögzített: $\Omega_0 \sim e^{\alpha N}$
 Ha N, V rögzített: $\Omega_0 \sim E^{3N/2}$

Tanulmány:



oscill.: $\ln \Omega_0(E, N) = N \varphi\left(\frac{E}{N}\right) + \mathcal{O}(\ln N)$

id.gés: $\ln \Omega_0(E, V, N) = N \varphi\left(\frac{E}{N}, \frac{V}{N}\right) + \mathcal{O}(\ln N)$

er is kell!

At $\mathcal{O}(\ln N)$ tagokat elhanyagoljuk

$\ln \Omega_0(E, V, N)$ at E, V, N homogén elsőfokú fu-e.

Est nevezte normal rendszert

$N \rightarrow \infty$ (nagyhatár), de véges rendszerre

lgazolás: fizika mech. feladat, de általában elvégezhetetlen.

Ha azonban létezik olyan rendszer, ami nem normal, akkor a szöveg véges termodinamikai rendszerrel nagyon elvégezhető (fura) makroszkopikus viselkedést mutatva. Lásd Kubo: Stat. mech példaból és feladatból

51. oldal, 4. példa. N foton részecské, μ részecskének csak egy energiabüntetése van, és értéke vagy $-\epsilon_0$, vagy ϵ_0 .

Bekövetkezik, hogy akkor előfordulhat, hogy $T < 0$.

A rendszer statisztikus mechanikai értelemben nem normal rendszer!

$\ln \Omega_0(E)$ feltehetően, ha van legnagyobb energiájú állapot.

Lásd részöb.

Microkanonikus szabály:

A mech. leírásból legközelebb jön:

Zárt rendszer: H paraméterei rögzítettek (V, N) ;
(Zölcsükhatalás zűlése "elastikus kábel",
és is lehet paraméter).

Az energia: E és $E + \delta E$ között van.

δE nagysága függ a preparálás / mérés
pontosságától

Macrokanonikus
rendszer
energia spektruma

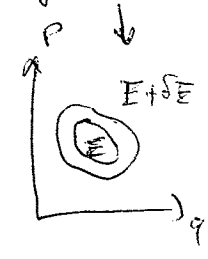
gyakorlati \searrow elvi
 $\Delta E \cdot \Delta t \sim h$
 Δt : megfigyelési idő
 $\frac{h}{\Delta t}$ pontossággal lehet az
energiamegmaradás

áll. sűrű, így
szűkben valószínű
 δE , hogy még sok
energiaállapot legyen
az energia hűvben \rightarrow

Stat. stat. és leírás

Többszörösen zárt rendszer nincs, van maradvék és a
szimmetria, de ezt elhanyagoljuk.

Előfeltétel: Minden energiaállapot az $E, E + \delta E$ hűvben
azonos valószínűségű:



KW.: $P(E_n) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E, \delta E)} & E < E_n < E + \delta E \\ 0 & \text{onébként} \end{cases}$

KB.: $P(P, q) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E, \delta E) h^f} & E < H(P, q) \leq E + \delta E \\ 0 & \text{onébként} \end{cases}$

A szoroság stacionárius, csak H- a kezeltől függ, kanonikus transzformáció invariáns.

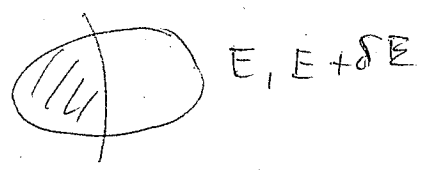
$$\bar{A} = \frac{\sum_{E_n \in [E, E+\delta E]} A_{nn}}{\Omega(E, \delta E)} \rightarrow \langle A \rangle$$

$$\bar{A} = \frac{\int_{E < H < E + \delta E} dp dq A(p, q)}{\int_{E < H < E + \delta E} dp dq} \rightarrow \langle A \rangle \text{ fejtlen } p\text{-fél!}$$

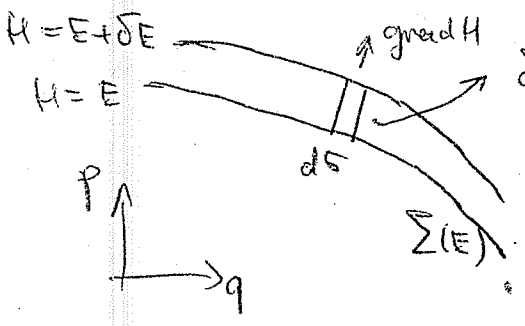
- Indoklás:
- 1) Elégtekercs elől elve (Laplace)
 - 2) Információ elmélet
 - 3) ergód elmélet

Megj: a) Előrlás at X_k változására:

$$P(X_k) = \frac{\Omega(E, \delta E, X_k)}{\Omega(E, \delta E)} = \frac{\text{"szűres"}}{\text{"összes"}}$$



b.) klasszikus esetben elvégezhető a $\delta E \rightarrow 0$ határetmenet $\Omega(E, E + \delta E)$ mántásával:



$$\delta E = \frac{\delta E}{|\text{grad } H|}$$

$$|\text{grad } H| = \sqrt{\sum_i \left[\left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right)^2 \right]}$$

$$\Omega(E, E + \delta E) = \int dS dp = \delta E \int_{\Sigma(E)} \frac{dS}{|\text{grad } H|}$$

Normalvektor: $\frac{dS}{|\text{grad } H|} \rightarrow$ Előrlás $\sim \Sigma(E)$ felület

n_i van mögötte?

11

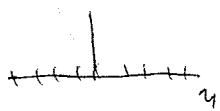
1) Elégtelem száma elve (Laplace)

2) információ elmélet

$$S_{\text{inf}} = - \sum_i p_i \cdot \ln p_i \quad \text{hányféle információval lehet}$$

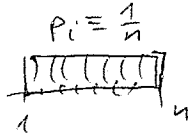
$$0 \leq p_i \leq 1, \quad i=1, 2, \dots, n, \quad \sum_i p_i = 1.$$

$$\left(\lim_{p_i \rightarrow 0} p_i \cdot \ln p_i = 0 \leftarrow \text{ha } p_i = 0 \right)$$



a) $S_{\text{inf}} \geq 0$, $= 0$, ha csak egy $p_i \neq 0$ (éles eloszlás).

b.) $S_{\text{inf}} \leq \ln n$



Ritkos események rendelt entropia 0. (teljes információ)

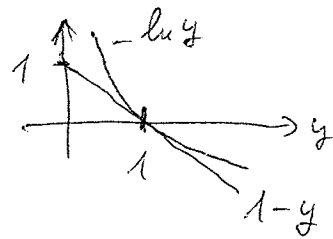
$$S = \max, \text{ ha } p_i \equiv p, \forall i\text{-re}$$

Teljesen az egyenletes eloszlásos (min. információ) maximális entropia tartomány

Ritkosítás: Segédképlet: $\sum_i q_i \ln \left(\frac{q_i}{p_i} \right) \geq 0$

Lettesen $\{p_i\}, \{q_i\}$ eloszlások. Az egyenlőség csak $p_i = q_i$ esetben áll fenn.

Teljesülési u.i.: $-\ln y \geq 1 - y$



Legyen $y = \frac{p_i}{q_i} \Rightarrow -\ln \frac{p_i}{q_i} \geq 1 - \frac{p_i}{q_i} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \ln \frac{q_i}{p_i} \geq 1 - \frac{p_i}{q_i} \Rightarrow q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \geq q_i - p_i \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sum_i q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \geq \sum_i (q_i - p_i) = 0. \quad \text{Ezzel a segédképletet beláttuk.}$$

Teljesülési most az állítást! Legyen $p_i \equiv p, i=1, 2, \dots, n$ és $\{q_i\}$ tetszőleges másféle eloszlás!

Ellor $S_{inf}(\{P\}) \geq S(\{q\})$

ugyanis:

$S_{inf}(\{P\}) = - \sum_i p_i \ln p_i = -n \frac{1}{n} \ln \frac{1}{n} = \ln n$ $\Rightarrow p_i = \frac{1}{n}$

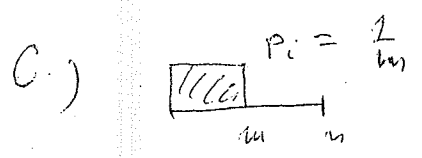
A segéd tétel miatt:

$\sum_i q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \geq 0 \Rightarrow \sum_i q_i \ln q_i + \ln n \sum_i q_i \geq 0$ $p_i = \frac{1}{n}$

$\Rightarrow - \sum_i q_i \ln q_i \leq \ln n = S_{inf}(\{P\})$

$S_{inf}(\{q\}) \Rightarrow S_{inf}(\{q\}) \leq S_{inf}(\{P\})$

Art az clostalt ell valasztani, amire az informacis entropia max. az adott mellez feltetelek mellett. Esetenben az egyenletes clostalt.



$S_{inf}(m) = \ln m$, mon. növ. fu.

Ergod elmélet:

Először Boltzmann verette be (1887).

$A(p_t, q_t) \equiv A_t$

Hamilton dinamika

ideátlog: $\bar{A} = \frac{1}{T} \int_0^T A_t dt$

Ergod tétel:

$\bar{A} \stackrel{ide}{=} \frac{\int \frac{A(p,q) d\sigma}{\text{grad} H}}{\int \frac{d\sigma}{\text{grad} H}} = \bar{A}$ szaraszag

Klasztikus rendszer: A mozgás a $\Sigma(E)$ energiafelületen

förtémités. A dinamikai mennyiség időátlaga:

$$\overline{A}^{(i)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(p(t), q(t)) dt \quad (\text{egy trajektórián})$$

mikroszkopikus sokaságok végtelen átlag:

$$\overline{A}^{(s)} = \frac{\int_{\Sigma(E)} A(p, q) \frac{dS}{|\text{grad} H|}}{\int_{\Sigma(E)} \frac{dS}{|\text{grad} H|}}$$

ergodikus rendszerre:

$$\overline{A}^{(i)} = \overline{A}^{(s)}$$

tipikus pályákra
(nem tipikus pályákra
nem igaz)

A rendszer elegendően hosszú idő alatt elegendő sokszor végtelen sok állapotot.

Mi van mögötte?

→ Egy trajektória a $\Sigma(E)$ minden pontjának tetszőleges kis környezetén átfut.

→ M tartományban $\Delta t(M)$ ideig tartózkodás, akkor annak valószínűsége, hogy a fázisportot a M -ben találjuk:

$$\frac{\Delta t(M)}{T} \sim \int_M dp dq = \int \frac{dS}{|\text{grad} H|}$$

igaz a tipikus trajektóriák

a rendszer ergodikus.

1930-as években: Neumann János, Birkhoff tétel:

→ $\Sigma(E)$ mértékben felbonthatatlan (nem bontható fel, véges mértékű részletek)

→ $f(p)$ négyzetesen integrálható $\Sigma(E)$ -n (analízis a fázistérbeli mozgás során invarianciák)

$\frac{1}{T} \int_0^T f(p(p_0, t)) dt$ konvergál a mikroszkopikus sokaságok majdnem minden p_0 pontján $p(p_0, t)$ a fázistérbeli trajektória pontja, ha p_0 -ból indul.

Linai-billiók N db merev gömb, visznaven feladatok

Entropia: $S = k_B \ln \Omega(E, \delta E)$

Miért k_B ? Egysegválasztás; így maradnak összhangban az abszolút hőmérséklet skálájával, kös. bbs. laj. pl.: ideális gázra.

S meggepezit a k_B egysegiben mit informacis entropiaval:

$$S_{inf} = - \sum_n \frac{1}{\Omega(E, \delta E)} \ln \frac{1}{\Omega(E, \delta E)} = \ln \Omega(E, \delta E)$$

↑
nem függ n -től.

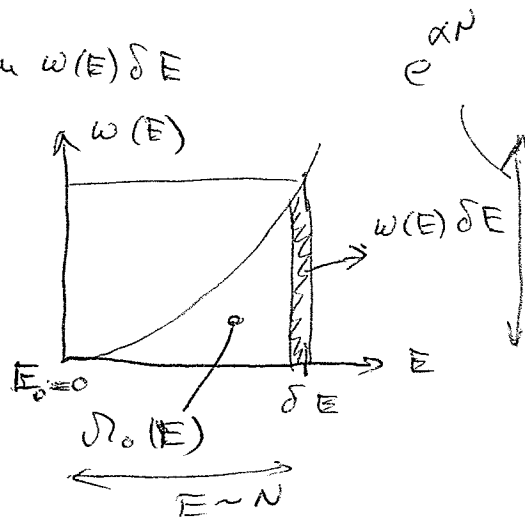
1) Az entropia szikuntasa:

All.: $\ln \Omega(E, \delta E) = \ln \omega(E) \delta E$ (ha δE eleg kicsi)

Bit-: $\ln \omega(E) E \geq \ln \Omega_0(E) > \ln \omega(E) \delta E$

$\sim N$ $\sim N$

(az alappalatra $E_0=0$)



$\Rightarrow \ln \omega(E) E - \ln \omega(E) \delta E = \ln \frac{E}{\delta E}$

$\sim N$ $\sim N$ $\sim \ln N$

δE rögzített, $\ln \frac{E}{\delta E} \sim O(\ln N)$

Így $O(\ln N)$ pontossággal $\ln \Omega_0(E) = \ln \omega(E) \delta E = \ln \omega(E) E$

Legrossabb esetben tegyük fel, hogy $\frac{E}{\delta E} \sim e^{\alpha N}$ (ahol $E \neq N$)

$\Rightarrow \delta E \sim E e^{-\alpha N} \sim \frac{h}{\Delta t} \Rightarrow \Delta t \sim \frac{h}{E} e^{\alpha N} \rightarrow$ megfigyelési idő

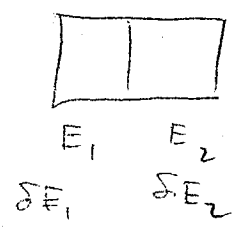
Ha $N = 10^{23}$, akkor $\Delta t \sim e^{10^{23}}$ unillaghat. idő

Termobar: $S = k_B \ln \Omega(E, \delta E) = k_B \ln \omega(E) \delta E = k_B \ln \Omega_0(E)$

Független δE -től!

2) Maxwell köpius réndszere

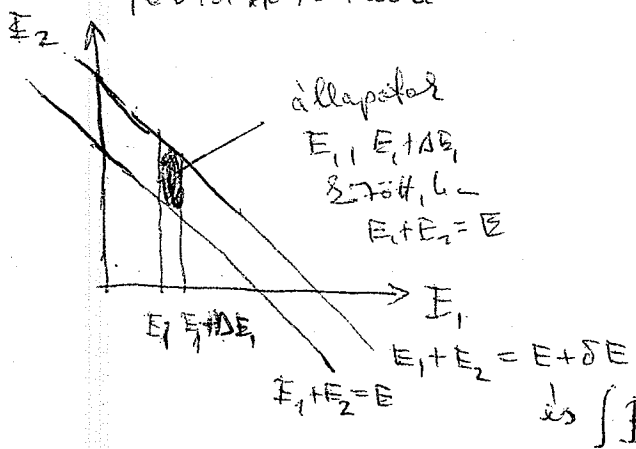
a) izoláltak:



$$\Omega(E_1, \delta E_1, E_2, \delta E_2) = \Omega_1(E_1, \delta E_1) \Omega_2(E_2, \delta E_2)$$

⇒ Az entropia izolált rendszerek esetén additív.

b) Termikus kölcsönhatás két rendszer között E1, E2
 "kötési" függetlenség (Féliglét arányos kölcsönhatás, rövid hatótávú sz.; A Coulomb sz. nem rövid hatótávú, de a semlegesség miatt leírható és így rövid hatótávú sz. lehet, γ sz. sz.)

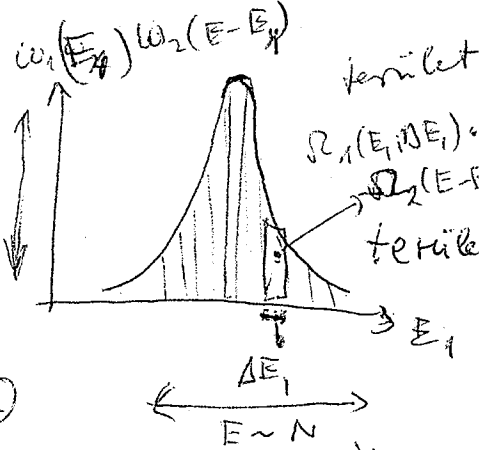
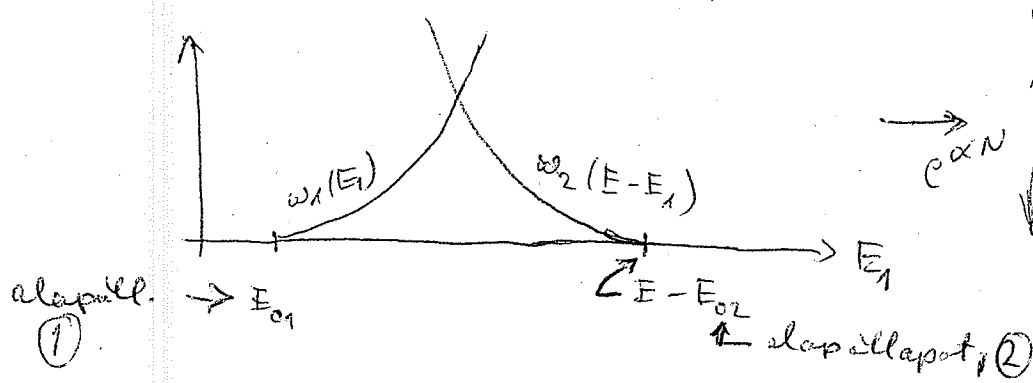


$$P(E_1, E_1 + \Delta E_1) = \frac{\Omega_1(E_1, \Delta E_1) \Omega_2(E_2, \Delta E_2)}{\Omega(E, \delta E)}$$

$$= C \cdot \omega_1(E_1) \omega_2(E - E_1) dE_1$$

$$\Omega(E, \delta E) = \sum_{E_1} \Omega_1(E_1, \delta E_1) \Omega_2(E - E_1, \delta E_2)$$

és $\int P(E_1) dE_1 = 1$



maximum: $\max P(E_1, E_1 + \Delta E_1) \Rightarrow$

$$\ln \Omega_1(E_1, \Delta E_1) + \ln \Omega_2(E - E_1, \delta E) = \max.$$

$$\Rightarrow S_1(E_1) + S_2(E - E_1) = \max.$$

$$\Rightarrow \frac{\partial S_1}{\partial E_1} - \frac{\partial S_2}{\partial E_2} = 0 \Rightarrow \frac{1}{T_1(E_1)} = \frac{1}{T_2(E_2)}, \quad E_1 + E_2 = E$$

∴ stabilitásus hőm. $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$

A maximum: $E_1 = E_1^*$ ($E_2 = E - E_1^* \equiv E_2^*$)

lehet van.

$$\frac{1}{T_1} \Big|_{E_1^*} = \frac{1}{T_2} \Big|_{E_2^* \equiv E - E_1^*}$$

Az elvétel ($P(E_1, E_1 + \Delta E_1)$ fu.) éles, a hirtelétége:

$$P(E_1, E_1 + \Delta E_1), \text{ Gauss-elvétel} \sim C \frac{1}{2k_B} \left(\frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} \Big|_{E_1^*} + \frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} \Big|_{E_2^*} \right) (E_1 - E_1^*)^2 - \frac{1}{\Delta^2}$$

$$-\frac{1}{\Delta^2} = \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} \Big|_{E_1^*} + \frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} \Big|_{E_2^*} \right) < 0, \text{ a maximum éret fejtettük sorba}$$

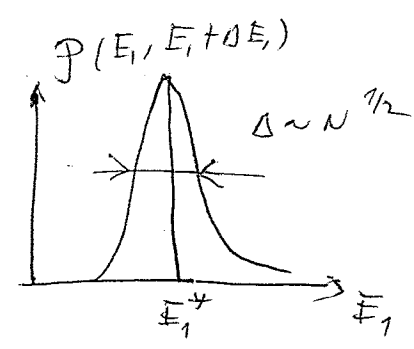
$$\Delta^2 = \overline{(E_1 - E_1^*)^2}$$

Továbbá: $S = k_B \ln \Omega_0 = k_B N \varphi\left(\frac{E}{N}\right)$ normal rendszerek

$$\frac{\partial S}{\partial E} = k_B \varphi'\left(\frac{E}{N}\right) \sim \mathcal{O}(1)$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = k_B \varphi''\left(\frac{E}{N}\right) \frac{1}{N} \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)$$

1/gy $\frac{1}{\Delta^2} = \frac{a}{N_1} + \frac{b}{N_2}$



A rendszer méretarányait rögzítve ($N_1/N_2 = \text{rögzített}$)

$$\frac{1}{\Delta^2} \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_1}\right), \text{ azaz } \Delta \sim \mathcal{O}(N_1^{1/2})$$

$\Rightarrow \frac{\Delta}{E_1^*} \sim \frac{1}{\sqrt{N_1}}$ éles elvétel, majdnem biztos, hogy a mérés E_1^* -ot foglaltatja.

$$E_1^* = \bar{E}_1$$

A maximum feltétele (az egyensúly stabilitása):

14/k

Ha $\left. \frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} \right|_{E_1^*} > 0$ lenne, akkor N_2 -t elegendően nagyra választva

a stabilitás feltétele sérül, ezért

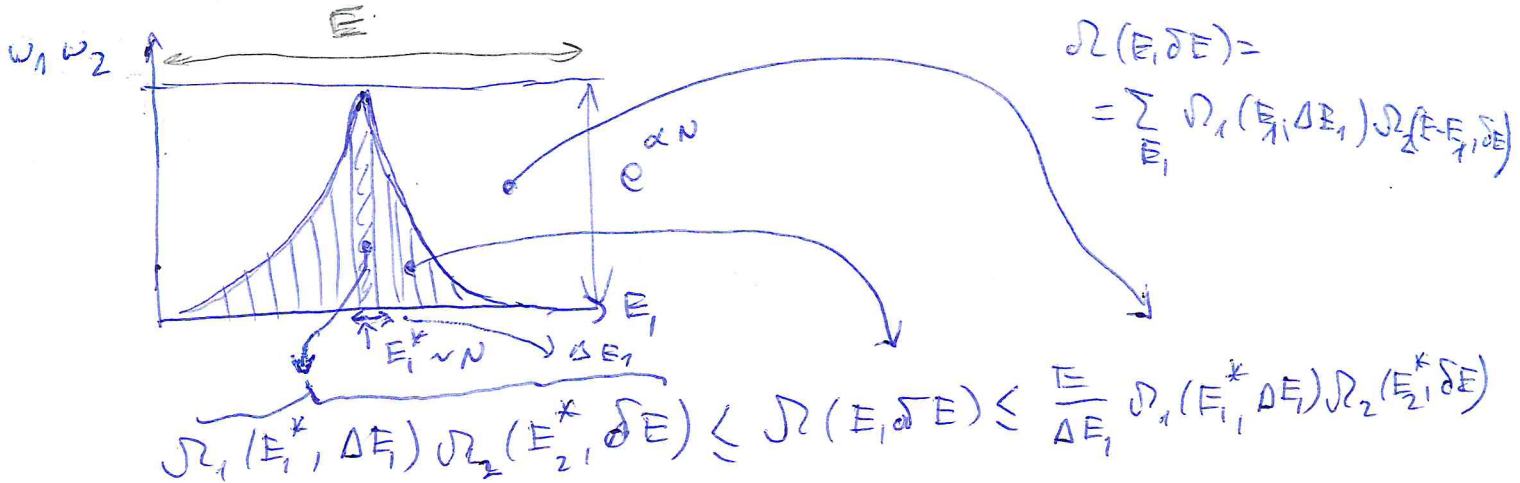
$$\frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} < 0 \text{ kell legyen.} \quad \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial E} < 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial T} > 0$$

Egyensúlyban az entropia additív:

$$S(E) = S_1(E_1^*) + S_2(E_2^*)$$



Σ_B ha ...

$$S_1(E_1^*) + S_2(E_2^*) \leq S(E) \leq S_1(E_1^*) + S_2(E_2^*) + \ln \frac{E}{\Delta E_1} \sim O(\ln N)$$

ln N pontossággal egyenlőség!

S maximumis

Itt láthatjuk, hogy az izolált rendszer energiájának elvéve: $E_1, E_2 \rightarrow E_1^*, E_2^*$

$$S_1(E_1^*) + S_2(E_2^*) \geq S_1(E_1) + S_2(E_2)$$

Ex max. ← egyensúlyi entropia

a rendszer, izolált rendszer entropiaja

Entropia növekedés. Egyenlőség áll fent, ha az izolált rendszer energiájának elvéve az egyensúlyi állapot felé megy.

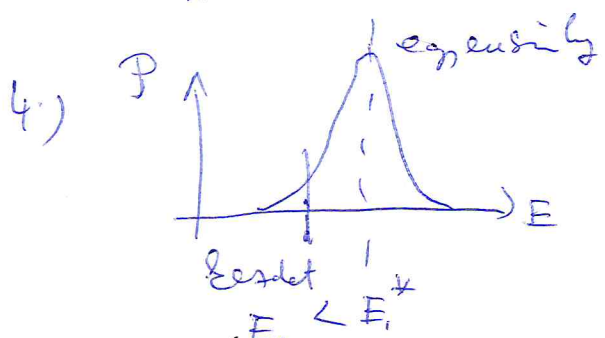
A statisztikus halmazok eset tulajdonságai:

$$S = k_B \ln(\omega(E) \delta E) = k_B \ln \Omega_0(E) = k_B N \varphi\left(\frac{E}{N}\right)$$

1) $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \varphi'\left(\frac{E}{N}\right) = k_B \frac{\omega'(E)}{\omega(E)}$
 ↑ normal rendszerek
 ↘ $T(E, N)$ homogén 0. fokú (intenzív) f_u .
 $\omega(E) > 0$
 $\omega'(E) > 0 \Rightarrow T > 0$

2) Termikus egyensúlyban: majdnem biztosan $T_1 = T_2$

3) $\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} < 0 \rightsquigarrow -\frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial E} < 0 \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial E} > 0$
 ↑ $T(E)$ monoton növekvő E-vel.
 Egyensúly stabilitása



$T_1(E_1) < T_1(E_1^*) = T_2(E_2^*) < T_2(E_2)$
 kiegyenlítődési folyamat
 ① felvesz, ② lead energiát.

$E_1 + E_2 = E$
 $\Rightarrow E_1 = E - E_2 < E_1^* \Rightarrow E_2 > E_2^*$
 $\Rightarrow E_2 > E - E_1 \equiv E_2^*$

5) Spec.: Ha $\Omega_0(E) \sim E^{\alpha N}$
 $S = k_B \alpha N \ln E + \text{all} \Rightarrow \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{N \alpha k_B}{E}$
 $\Rightarrow \boxed{\alpha k_B T = \frac{E}{N}}$

6) Spec.: $\Omega_0(E)$ feltehetően, ha van legnagyobb energiájú állapot, (de a kitárláshoz szükséges rendszerek +E - N db foton részecské, és mindegyiknek csak két lehetséges irány van.
 -E -

Legyen N_+ a $+\epsilon$ miutén lévő részecskék száma
 N_- a $-\epsilon$ - e - - - - -

$N = N_+ + N_-$ és $E = N_+ \epsilon + N_- (-\epsilon) \equiv M \epsilon$
 azaz $M = N_+ - N_-$

$N_+ = \frac{N+M}{2}$
 $N_- = \frac{N-M}{2}$, $M = -N, -N+1, \dots, N-1, N$

Az $E = M \epsilon$ energiájú állapotok száma

$\Omega_0(E = M \epsilon) = \frac{N!}{N_+! N_-!}$

$S = k_B \ln \Omega_0(E) = k_B (\ln N! - \ln N_+! - \ln N_-!)$

Termodin. lim. $N \rightarrow \infty$, $\frac{E}{N} = \frac{M}{N} \epsilon = \text{all.}$ ($\Rightarrow \frac{M}{N} = \text{all.}$)

Stirling:

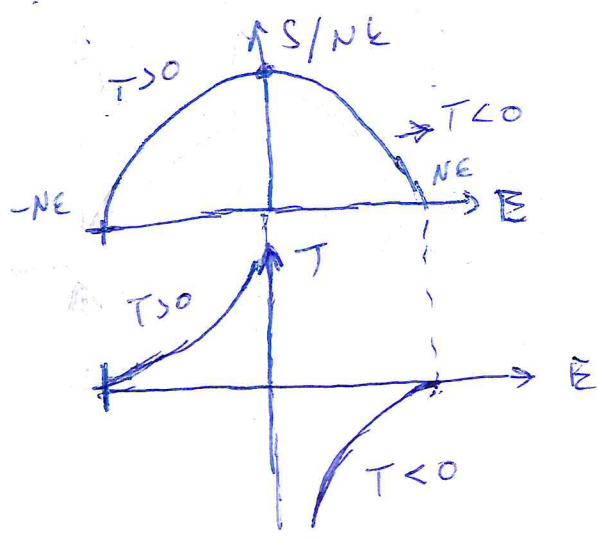
$\frac{S}{k_B} = N \ln N - \frac{N+M}{2} \ln \frac{N+M}{2} - \frac{N-M}{2} \ln \frac{N-M}{2}$
 $\hookrightarrow \frac{N+M}{2} \ln \frac{N+M}{2} + \frac{N-M}{2} \ln N$

$\Rightarrow \frac{S}{k_B} = - \frac{N+M}{2} \ln \frac{N+M}{2N} - \frac{N-M}{2} \ln \frac{N-M}{2N} =$
 $= - \frac{N}{2} (1 + \frac{M}{N}) \ln \frac{1}{2} (1 + \frac{M}{N}) - \frac{N}{2} (1 - \frac{M}{N}) \ln \frac{1}{2} (1 - \frac{M}{N})$

Látatlanban S extrémum megyszeg

De a rendszer nem normal rendszer! Ugyanis:
 $\ln \Omega_0 \sim N \ln \frac{E}{N}$ ide $\psi' > 0$ nem minden E -re igaz!

hővezetéklet: $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial S}{\partial M} = \dots =$
 $= \frac{k_B}{2\epsilon} \ln \frac{1 - \frac{M}{N}}{1 + \frac{M}{N}}$



T monoton nőve $E > 0$ esetben
 $T < 0$, inverz populáció.
 $E > 0$ esetben a rendszer nem normal rendszer.
 a stab. feltétel helyül: $\frac{\partial T}{\partial E} > 0$.

Anyagi kölcsönhatás a rétegszerkezet esetében:

$E_1 + E_2 = E, N_1 + N_2 = N$

E_1, V_1	E_2, V_2
N_1	N_2

$P(E_1, \Delta E_1, N_1) \sim e^{\frac{S_1(E_1, N_1) + S_2(E_2, N_2)}{k_B} - \Delta E_1}$

max.: $\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2}$ és $\frac{\partial S_1}{\partial N_1} \Big|_{E_1} = \frac{\partial S}{\partial N_2} \Big|_{E_2}$

def.: $\frac{\partial S}{\partial N} \Big|_E = -\frac{\mu}{T} \rightarrow \frac{\mu_1}{T_1} = \frac{\mu_2}{T_2}$

μ : kémiai potenciál

Mechanikai kölcsönhatás a rétegszerkezet esetében:

$S_1(E_1, V_1) + S_2(E_2, V_2) = \text{max.}$

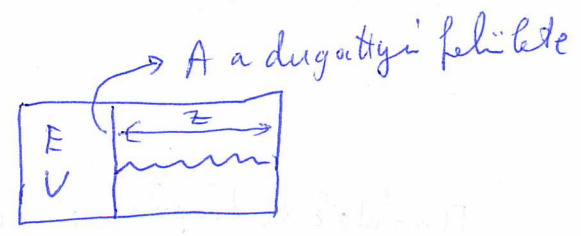
E_1, V_1	E_2, V_2
N_1	N_2

$\Rightarrow \frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2}$ és $\frac{\partial S_1}{\partial V_1} \Big|_{E_1} = \frac{\partial S_2}{\partial V_2} \Big|_{E_2}$

lehet $\frac{\partial S}{\partial V} \Big|_E = \frac{p}{T} \rightarrow \frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2}$ nyomás

p valóban a nyomás.

Gondolat kísérlet:



Teljes energia: $E_0 = E + U(z)$ rugó energiája

$\Rightarrow E = E_0 - U(z)$, térfogat: $V + z \cdot A = \text{állandó}$
 $dV = -A \cdot dz$

A rugó A szabadsági fokú rendszer, nem tárol entropiát

$\frac{dS(E, V)}{dz} = 0$, a legvalószínűbb z ill. E meghatározása.

$\frac{\partial S}{\partial E} \Big|_V \cdot \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{\partial S}{\partial V} \Big|_{E, \mu} \cdot \frac{\partial V}{\partial z} = 0 \Rightarrow \frac{1}{T} \cdot \left(-\frac{\partial U}{\partial z} \right) + \frac{\partial S}{\partial V} \Big|_E \cdot (-A) = 0$
 m: rugó erő

$$\Rightarrow \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_E = \frac{p}{T} \quad \text{hittén} \quad p = - \frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\bar{F}}{A} \quad \left(\frac{16}{6} \right)$$

Fundamentális egyenlet:

$$dS = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{V,N} dE + \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_{E,N} dV + \left. \frac{\partial S}{\partial N} \right|_{E,V} dN =$$

$$\Rightarrow dS = \frac{1}{T} dE + \frac{p}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN$$

normál r.: $S(E, V, N) = N \phi \left(\frac{E}{N}, \frac{V}{N} \right)$

termodinamikai skálázás:

$$\underline{S(\lambda E, \lambda V, \lambda N) = \lambda N \phi \left(\frac{\lambda E}{\lambda N}, \frac{\lambda V}{\lambda N} \right) = \lambda N \phi \left(\frac{E}{N}, \frac{V}{N} \right) = \lambda S(E, V, N)}$$

S az E, V, N homogén elsőfokú függvénye

Vicsekedés E_0 alapállapot zerül, III. főtétel:

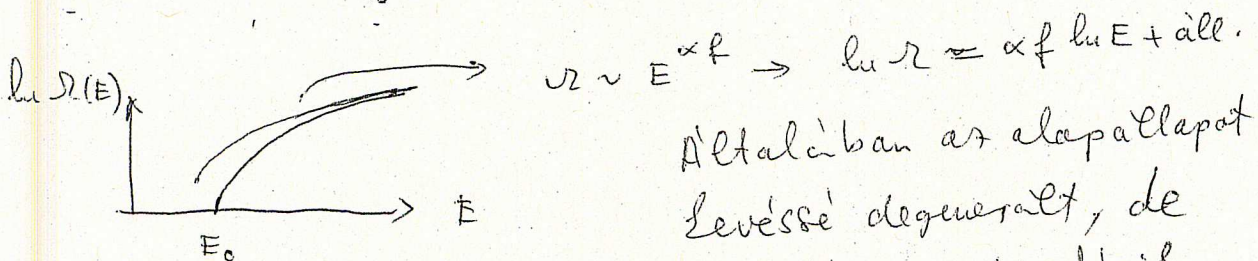
Kü. mech.: E_0 egyértelmű alapállapot, $S = \varepsilon_B$ ln $\Omega(E, \delta E)$

Ha $E \rightarrow E_0 \Rightarrow S \rightarrow 0$, mégis az alapállapot f -szeresen degenerált, $\Omega(E_0) \approx f$

$$S \sim \varepsilon_B \ln f \Rightarrow \frac{S}{N} \sim \varepsilon_B \frac{\ln f}{N} \rightarrow 0$$

Az utóbbi, hogy $E \approx E_0$ esetén, tehát $T \approx 0$ -ra

S szerelhetőleg zerül le.



Altalában az alapállapot zerésesen degenerált, de

amint az S -vel részletesebben tartásom hogyan történt, általában nem tudunk semmit mondani.

Általában az entrópia zérusba tartása nemcsak $T=0$ -nál, de más mérhető tartományban is megmutatható. Nemcsak az alapállapot, de az első energia-szintek is leveles degeneráltak.

És persze nem bizonyítható általában, de konkrét esetben belátható. Éa tulajdonsága annak a következménye, hogy a kvantummechanika lecsökkenti az állapotok számát azáltal, hogy az atomos rétecszél nem megkülönböztethető.

Adott, zéró kelés esetében lehet maradó entrópia.

Éa főként a magspinok miatt lehet.

1k körül a magspinok közelítőleg függetlenek, legyen a magspin $\frac{1}{2}$ (és itt beállítás)! Ekkor N db magspin lehetséges beállításának száma, az állapotok száma:

$$2^N \Rightarrow S_{spin} = N k_B \ln 2 \sim N.$$

Ha $T \rightarrow 0$ (csökkenve) a dipól- kölcsönhatás egyre erősebben jut érvényre, a magspinok rendeződnek.

Megbecsülhető ezt a hőmérsékletet, a dipól- kölcsönhatás összemérhető a termikus energiával.

A μ mágneses momentáku dipól mágneses tere:

$$\mu \approx \frac{\mu}{r^3} \Rightarrow \text{kölcsönhatási energia:}$$

$$\mu H = \frac{\mu^2}{r^3} \approx k_B T.$$

$$\mu = \mu_N = 5 \cdot 10^{-27} \frac{J}{\text{Tesla}}, \quad r = 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow T \approx 10^{-6} \text{ K}$$

↑
magmagnetón.

Elektronspinre is megismételhető a becslés.

$$\mu = \mu_B = \text{Bohr-magnetón}, \quad \frac{\mu_B}{\mu_N} \approx 10^3 \Rightarrow T \sim \text{nehány K}$$

a rendeződési hőmérséklet.

Atomok elektronok esetében nem a dipólárcsúskatás, hanem a szüretelődésk kölcsönhatás a lényeges.

↳ a Pauli-elv követelménye,

Ezzel az energiával hámolva még néhány nagysággal nagyobb értéket kapunk a rendszer désk hőmérsékletre.

Ferromágneseknél ez a Curie-hőmérséklet, néhány esetben k is lehet.

Néhány k alatt már csak a magspinek jöhetnek szerepet.

Azaz ilyen hőmérsékleten az entropia függetlené válik a makroszkópius adatoktól ($p, V, \text{ kristály szerkezet, stb.}$), csak a magspinek nagyságától függ. $\frac{\partial S}{\partial V} \rightarrow 0, \frac{\partial S}{\partial p} \rightarrow 0$ ezen a hőmérsékleten.

A III. főtétele nem lehet bizonyítani, de konkrét rendszere igazolható. A rendszer elacsomú hőmérsékleten független, elemi gerjesztéssel írható le.

Megj.: Klasszikus stat. fiz. esetén az alapállapot 1 pont, 0 mértékű $\Rightarrow S \rightarrow -\infty$, ha $E \rightarrow E_0$

Az alapállapot körül a klasszikus közelítés nem lehet jó!!!

Gibbs-paradoxon: $\Omega_0(E) = \int \frac{d^3p d^3q}{N! h^3}$, ha N atomos részecske van.

$\Rightarrow \frac{S}{k_B} = \frac{\tilde{S}}{k_B} - N \ln N + N$, ahol \tilde{S} az entropia, ha nem definiáljuk az Ω_0 -ba az $\frac{1}{N!}$ tényezőt.

N, V	N, V
E	E

A két rendszerben ugyanolyan típusú részecske van, a két rendszer egymással van.

Kivesszük a falat: $\Delta S = S(2E, 2V, 2N) - 2S(E, V, N) = 0$.

Ezt várjuk, mint egymással van.

$$\begin{aligned} \tilde{S} &= S + k_B(N \ln N - N) \Rightarrow \Delta \tilde{S} = \tilde{S}(2E, 2V, 2N) - 2\tilde{S}(E, V, N) = \\ &= S(2E, 2V, 2N) - 2S(E, V, N) + k_B(2N \ln 2N - 2N) - k_B \cdot 2 \cdot (N \ln N - N) = \\ &= k_B 2N \ln 2 = k_B \ln 2^{2N} \rightarrow \text{keverési entropia!} \end{aligned}$$

$N!$ faktor nélkül a részecskéket megkülönböztethetőkkel tételezzük fel, és az \tilde{S} entropia nem lesz additív!

Példák mikrokanonikus sokaságra:

1) Ideális gáz:

Körülbbrán lütkül (8/b oldal):

$$\ln \Omega_0(E) = \frac{5N}{2} + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{4\pi m}{3h^2} \frac{E}{N} \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \right)$$

$$S = k_B \ln \Omega_0 \Rightarrow \frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{V,N} = k_B \frac{3N}{2} \frac{1}{E} \Rightarrow \boxed{E = \frac{3}{2} N k_B T}$$

$$\frac{p}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_{E,N} = k_B \frac{3N}{2} \frac{2}{3} \frac{1}{V} \Rightarrow \boxed{pV = N k_B T}$$

$$-\frac{\mu}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial N} \right|_{E,V} = \dots = \frac{3}{2} k_B \ln \left(\frac{4\pi m}{3} \frac{m}{h^2} \frac{E}{N} \left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} \right) \Rightarrow$$

↑ $E = \frac{3}{2} N k_B T$

$$\boxed{\mu = -k_B T \ln \left[\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right]^{3/2} \frac{V}{N}}$$

2) Lineáris oszcillátorok:

Körülbbrán lütkül (7/a):

$$\ln \Omega_0(E) = N \left\{ \left(\frac{M}{N} + 1\right) \ln \left(\frac{M}{N} + 1\right) - \frac{M}{N} \ln \frac{M}{N} \right\},$$

ahol $M = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2}$

$$\Rightarrow S = k_B \ln \Omega_0(E)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial M} \cdot \frac{\partial M}{\partial E} = \frac{1}{\hbar \omega} \cdot k_B N \cdot \frac{\partial}{\partial M} \left\{ \left(\frac{M}{N} + 1\right) \ln \left(\frac{M}{N} + 1\right) - \frac{M}{N} \ln \frac{M}{N} \right\} =$$

$$= \frac{k_B N}{\hbar \omega} \left\{ \frac{1}{N} \ln \left(\frac{M}{N} + 1\right) + \frac{1}{N} - \frac{1}{N} \ln \frac{M}{N} - \frac{1}{N} \right\} = \frac{k_B}{\hbar \omega} \ln \frac{M/N + 1}{M/N} \Rightarrow$$

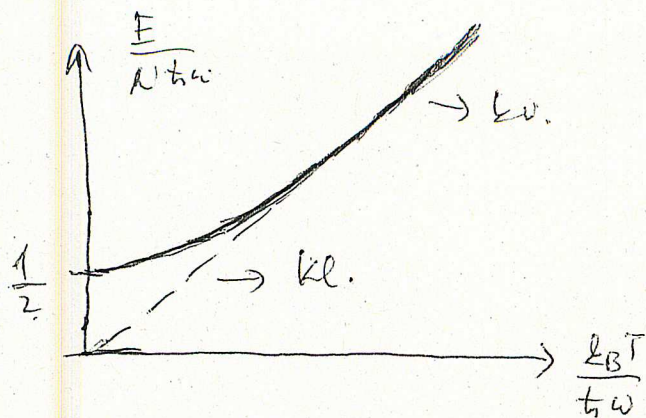
$$\Rightarrow \frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{k_B}{\hbar \omega} \ln \frac{\frac{E}{N} + \frac{\hbar \omega}{2}}{\frac{E}{N} - \frac{\hbar \omega}{2}} \Rightarrow \frac{\frac{E}{N} + \frac{\hbar \omega}{2}}{\frac{E}{N} - \frac{\hbar \omega}{2}} = e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}}$$

innen kifejezhető E :

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar \omega}{2} \frac{e^{\beta \hbar \omega} + 1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} = \frac{\hbar \omega}{2} \frac{e^{-1} + 1}{e^{-1} - 1} = \frac{\hbar \omega}{2} \left(1 + \frac{2}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right) \Rightarrow$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$
jelölés

$$\boxed{E = N \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right)}$$



Klasszikusan eltarul (71b) :

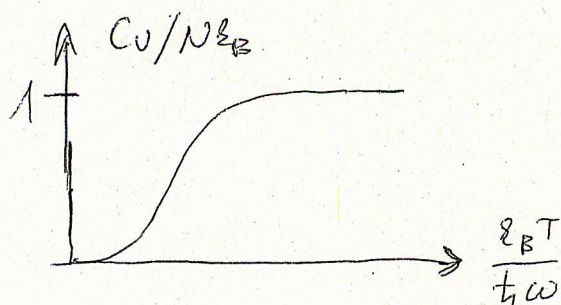
$$k_B r_0(E) = N \left(k_B \frac{E}{N\hbar\omega} + 1 \right)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = k_B N \cdot \frac{1}{E} \Rightarrow \boxed{E = N k_B T}$$

És majd jön az ekvipartíció-tételével is (lásd 66).

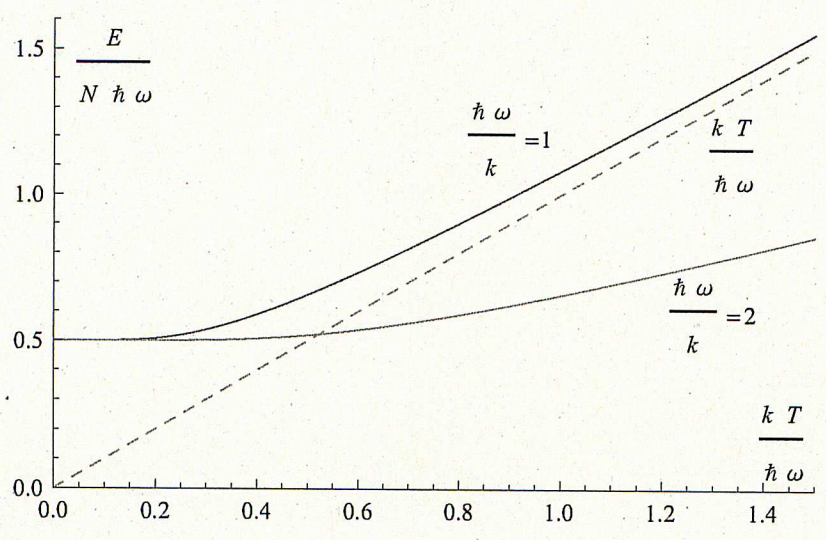
Az kvantum fizikából $\Rightarrow C_V = \frac{\partial E}{\partial T} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0$

összehangban a III. főtéttel.

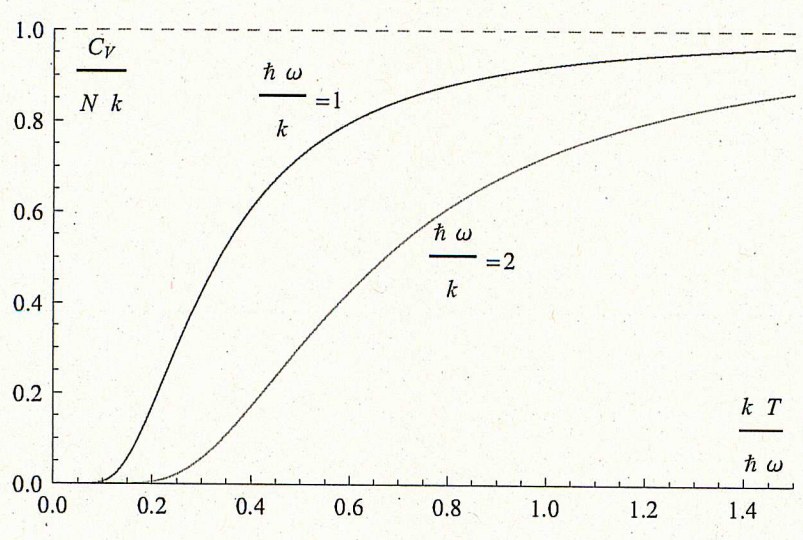


Független N db kvantis oszcillátor

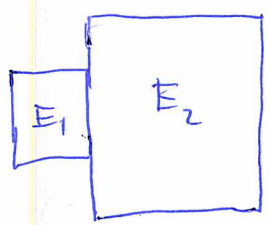
energia



fejho



Kanonikus sokaság:



$E_1 + E_2 = E$ zárt

feltétel: gyenge kölcsönhatás, "kisebítő" függetlenség

Termó limit. $N_2 \rightarrow \infty, E_2 \rightarrow \infty, \frac{E_2}{N_2} = \text{állandó}$

N_1, E_1 véges

Feltesszük most, hogy $N_1 \ll N_2 \sim O(N)$ és $E_1 \ll E_2$

② rendszer makroszkópikus, ① rendszer lehet kicsi is.

$$P(E_1, E_1 + \Delta E_1) = \frac{\Omega_1(E_1, \Delta E_1) \Omega_2(E_2, \Delta E)}{\Omega(E, \Delta E)}$$

$$\Omega_2(E_2, \Delta E) = e^{\frac{1}{k_B} S_2(E - E_1)}$$

Szorzás: $S_2(E - E_1) = S_2(E) - \frac{\partial S_2}{\partial E_2} \Big|_{E_2=E} \cdot E_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} \Big|_{E_2=E} E_1^2 + \dots$

$\underbrace{S_2(E)}_{O(N)} \quad \underbrace{\frac{\partial S_2}{\partial E_2}}_{O(1)} \quad \underbrace{E_1}_{O(N_1)} \quad \underbrace{\frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2}}_{O(1/N)} \quad \underbrace{E_1^2}_{O(N_1^2)} + \dots$
 $N_2 \approx N$

$\frac{\partial S}{\partial E} \Big|_E = \frac{1}{T}$ a hőtartály paramétere. Az első két tagot tartjuk meg:

$$\Rightarrow P(E_1, E_1 + \Delta E_1) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} \Omega_1(E_1, \Delta E_1) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} \omega(E_1) \Delta E_1$$

Boltzmann-tenyésztés → állapotok száma

$\beta = \frac{1}{k_B T}$ jelölés

Egyetlen állapot (E_n energiájú) állapot valószínűsége:

$\frac{1}{Z} \cdot e^{-\beta E_n}$

E T adott, hőmérséklet, hőtartály hőmérséklete

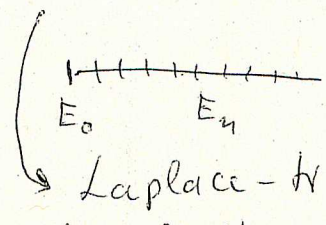
Z normalizációs függvény:

↑
állapotok
(partition function)

$$Z = \sum_E e^{-\beta E} \Omega(E, \Delta E) = \int_{E_0}^{\infty} e^{-\beta E} \omega(E) dE \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{Z = \sum_n e^{-\beta E_n}}$$

a degeneráció is figyelembe kell venni!



$$\omega(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

Laplace-t. integrálható, mert $\omega(E) \sim E^\alpha$ és $\beta > 0$

Operátorokkal:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad \bar{f} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{f}) = \text{Tr} \frac{1}{Z} (e^{-\beta \hat{H}} \hat{f}) = \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} f_{nn}$$

Klasszikus formula:

$$Z = \int \frac{dq^f dp^f}{N! h^f} e^{-\beta H(p, q)}, \quad \text{az integrálás } \int dq, p \text{-re!}$$

$$\rho(p, q) = \frac{h^f}{Z} e^{-\beta H(p, q)} = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{\int dq^f dp^f e^{-\beta H(p, q)}}$$

kiemés a $N!$ és h^f !

$$\bar{f} = \frac{\int dq^f dp^f f(p, q) e^{-\beta H(p, q)}}{\int dq^f dp^f e^{-\beta H(p, q)}}$$

Energia várható értéke:

$$\bar{E} = \frac{\sum_n E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

fontos a receptet?

Energia fluktuációja:

$$\Delta E^2 = \overline{E^2} - \bar{E}^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \dots = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = -\frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} = -\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \beta} = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} k_B T^2$$

$\underbrace{\quad}_{C_V}$ hőkapacitás

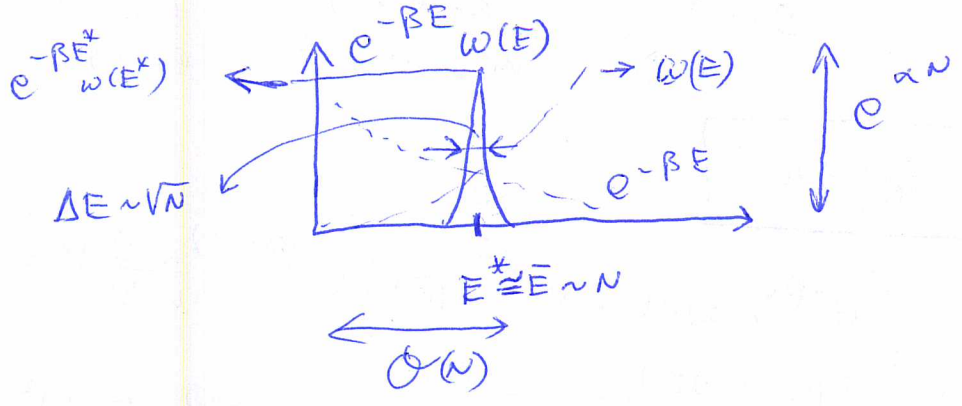
$\Delta E^2 = k_B T^2 \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = k_B T^2 C_V$

 $\sim O(N)$

$$\Rightarrow \frac{\Delta E}{E} \sim O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

Macrofizikus közeledés:

T adott; hőtanál, hőmérséklet.



$$\frac{\Delta E}{E} \sim O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

Eles elszórt,
majdnem biztos, hogy
 $\bar{E} = E^*$!

Legvalószínűbb energia:

$$P(E, \Delta E) \sim e^{-\beta E} \Omega(E, \Delta E) \rightarrow \max.$$

$$\Rightarrow \ln P \sim -\beta E + \ln \Omega(E, \Delta E) = \max$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \ln P}{\partial E} = 0 \Rightarrow -\beta + \frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial E} \Big|_{E=E^*} = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{k_B T} + \frac{1}{k_B T(E^*)} = 0$$

$T(E^*) = T$ legvalószínűbb esetben,

azaz majdnem biztos, hogy $T(E^*) = T(\bar{E}) = T$,

a rendszer hőmérséklete megegyezik a hőforrás hőmérsékletével

Az P előválasztás:

$Z \approx e^{-\beta \bar{E}} \omega(\bar{E}) \Delta E$, pontosabban az előválasztás Gauss-érelteléssel a liba $O(\ln N)$ nagyságú. (lásd lent)

$$\ln Z \approx -\beta \bar{E} + \ln(\omega(\bar{E}) \Delta E) \Rightarrow$$

$$-\frac{1}{\beta} \ln Z = \bar{E} - T k_B \underbrace{\ln(\omega(\bar{E}) \Delta E)}_{S(\bar{E})} = \bar{E} - TS(\bar{E}) \equiv F$$

↑
Gyald-energia

az energia Legendre-tr.

$$\Rightarrow \boxed{F(T, V, N) = -k_B T \ln Z}$$

Pontososság: $Z(\beta) = \int_{E_0}^{\infty} e^{-\beta E} \omega(E) dE = e^{-\beta \bar{E}} \omega(\bar{E}) \int_{E_0}^{\infty} e^{-\beta(E-\bar{E})} \frac{\omega(E)}{\omega(\bar{E})} dE =$

$$= e^{-\beta \bar{E}} \omega(\bar{E}) \int_{E_0}^{\infty} e^{-\beta(E-\bar{E})} e^{\frac{1}{k_B} (S(E) - S(\bar{E}))} dE = \textcircled{*}$$

Gauss-éreltelés: $(-\beta + \frac{1}{k_B T(\bar{E})})(E-\bar{E}) + \frac{1}{2k_B} \frac{\partial^2 S(E)}{\partial E^2} \Big|_{\bar{E}} (E-\bar{E})^2 + \dots$

$$\textcircled{*} \approx e^{-\beta \bar{E}} \omega(\bar{E}) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(E-\bar{E})^2}{2k_B T^2 C_V}} dE = e^{-\beta \bar{E}} \omega(\bar{E}) \sqrt{\pi 2k_B T^2 C_V} \approx \sqrt{N}$$

Fundamentális egyenlet:

21/a

$$F = -k_B T \ln Z = F(T, V, N) = \bar{E} - TS(\bar{E})$$

$$\frac{\partial F}{\partial T} = -k_B \ln Z - k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \cdot \frac{\partial \beta}{\partial T} = -k_B \ln Z - \frac{\bar{E}}{T}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{-S(\bar{E})}$
 Ráírás az előző oldalra

$$\frac{\partial F}{\partial T} = -S(\bar{E})$$

[Más lépés: $F = \bar{E} - TS(\bar{E}) \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} - S(\bar{E}) - T \cdot \frac{\partial S}{\partial \bar{E}} \cdot \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} =$

$$= \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \left(1 - T \cdot \frac{\partial S}{\partial \bar{E}} \right) - S(\bar{E})]$$

$\underbrace{\hspace{5em}}_{=0}$

$$\frac{\partial F}{\partial V} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial V} Z = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z} \sum_n (-\beta) \frac{\partial E_n}{\partial V} e^{-\beta E_n} =$$

$$= \frac{\partial E_n}{\partial V} = -P$$

[Más lépés: $\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial V} (\bar{E} - TS(\bar{E}, V, N)) = \frac{\partial \bar{E}}{\partial V} - T \frac{\partial S(\bar{E}, V, N)}{\partial \bar{E}} \cdot \frac{\partial \bar{E}}{\partial V} - T \cdot \frac{\partial S(\bar{E}, V, N)}{\partial V} = -P$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{\frac{P}{T}}$$

$$\frac{\partial F}{\partial N} = \dots = \left(1 - T \frac{\partial S(\bar{E}, V, N)}{\partial \bar{E}} \right) \frac{\partial \bar{E}}{\partial N} - T \cdot \frac{\partial S}{\partial N} = +\mu$$

$\underbrace{\hspace{5em}}_{=0}$ $\underbrace{\hspace{5em}}_{-\frac{\mu}{T}}$

197:

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN$$

Et a fundamentális egyenlet

Kanónikus és mikrokanónikus sokaságoknál makroszkopikus rendszer leírásához van. OE: a rendszer jó közléssel meghatározott energiájú, ΔE energia bizonytalansággal.

Kis rendszerek esete: az energia-eloslas reles
(Maxwell-eloslasnal sokkal latunk erre példát)

$$S_{inf} = -\frac{\partial F}{\partial T} \text{ továbbra is igaz, de}$$

$$S_{inf} \neq S(\bar{E}) \rightarrow \text{ha ez egyáltalán definialható}$$

Nincs értelme a rendszer hőmérsékletével beszélni, csak a központi hőmérséklete adott.

Mezi: Az információs entropia definíciójából is levezethető a kanonikus eloslas

$$S_{inf} = -k_B \sum_n p_n \ln p_n \text{ maximum}$$

$$a \left. \begin{aligned} \sum_n p_n &= 1 \\ \sum_n p_n E_n &= \bar{E} \end{aligned} \right\} \text{mellő feltételekkel} \rightarrow -k_B \lambda$$

↑
Lagrange-multiplikátor

$$-k_B \sum_n p_n \ln p_n - k_B \lambda \sum_n p_n - k_B \beta \sum_n p_n E_n \text{ max}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial p_n} (\dots) = 0 \Rightarrow -\ln p_n - 1 - \beta E_n - \lambda = 0 \Rightarrow \ln p_n = -\beta E_n - \lambda - 1$$

$$\Rightarrow p_n = e^{-\lambda-1} \cdot e^{-\beta E_n}$$

$$\text{de } \sum_n p_n = 1 \Rightarrow e^{-\lambda-1} \cdot \underbrace{\sum_n e^{-\beta E_n}}_Z = 1 \Rightarrow e^{-\lambda-1} = \frac{1}{Z}$$

így $p_n = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\beta E_n}$ és β a $\sum_n p_n E_n = \bar{E}$ feltételből számolható.

Ez az inf. entropia:

$$S_{inf} = -k_B \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \cdot \ln \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} = \dots = \frac{\bar{E}}{T} + k_B \ln Z = S(\bar{E})$$

A mellő feltételek mellett az S_{inf} maximumát a kanonikus eloslas adja!

↑ stat. entropia
↑ makroszkopikus rendszer esete

Független rendszám állapotösszege:

22/a

$H = H_A + H_B \Rightarrow E_{eik} = E_e^A + E_k^B$

$Z = \sum_{eik} e^{-\beta E_{eik}} = \sum_{eik} e^{-\beta E_e^A} \cdot e^{-\beta E_k^B} = \left(\sum_e e^{-\beta E_e^A} \right) \left(\sum_k e^{-\beta E_k^B} \right) =$

$\Rightarrow \boxed{Z = Z_A Z_B}$

Példák:

1) id. gáz. $Z_1 = \int \frac{d^3q d^3p}{h^3} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{3/2} = V \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$

$\mathcal{E} = - \frac{\partial \ln Z_1}{\partial \beta} = \frac{3}{2} \frac{1}{\beta} = \frac{3}{2} k_B T$

N részecske: $Z = \frac{1}{N!} Z_1^N$, $F = -k_B T \ln Z \Rightarrow$

$F = -k_B T (-N \ln N + N + N \ln Z_1) = -N k_B T - N k_B T \ln \frac{Z_1}{N} =$
 $= -N k_B T - N k_B T \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right]$

$\boxed{E} = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = N \frac{3}{2} \frac{1}{\beta} = \boxed{\frac{3}{2} N k_B T}$

$dF = -SdT - PdV + \mu dN \Rightarrow P = - \frac{\partial F}{\partial V} \Big|_{T,N} = k_B T \frac{\partial}{\partial V} (\ln V + c) = N k_B T \frac{1}{V}$

$\Rightarrow \boxed{PV = N k_B T}$

$\rightarrow \boxed{S} = - \frac{\partial F}{\partial T} \Big|_{V,N} = N k_B + N k_B \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right] + N k_B T \cdot \frac{3}{2} \frac{1}{T} =$
 $= \boxed{N k_B \left\{ \frac{5}{2} + \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right] \right\}}$ (lásd 18/a!)

$\rightarrow \boxed{\mu} = \frac{\partial F}{\partial N} \Big|_{T,V} = -k_B T - k_B T \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right] - N k_B T \cdot \left(-\frac{1}{N} \right) =$
 $= \boxed{-k_B T \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right]}$ (lásd 18/a!)

Minden eredmény megkapott a mikrokanonikus sokasággal számolt eredményekkel (lásd 18/a).

2) Lineáris oszcillátor (egy darab):

a) Klasszikus részecske:

$$Z = \int \frac{dq dp}{h} e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \right)} = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m \omega^2}} = \frac{2\pi}{h \beta \omega} =$$

$$= \frac{1}{\beta \hbar \omega} = \frac{k_B T}{\hbar \omega}$$

$$E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \dots = k_B T$$

$$F = - k_B T \ln Z = - k_B T \ln \frac{k_B T}{\hbar \omega}$$

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T} = k_B \ln \frac{k_B T}{\hbar \omega} + k_B T \cdot \frac{1}{T} = k_B \left(1 + \ln \frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)$$

b) Kvantumos részecske:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n + \frac{1}{2})} = e^{-\beta \hbar \omega / 2} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{1}{e^{\frac{\beta \hbar \omega}{2}} - e^{-\frac{\beta \hbar \omega}{2}}} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}}$$

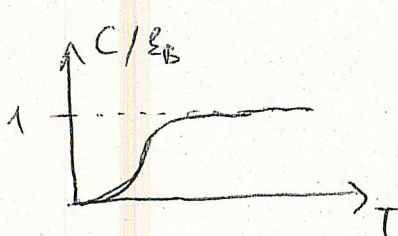
$$Z = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}}$$

$$E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}} \cdot 2 \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2} \cdot \frac{\hbar \omega}{2} = \frac{\hbar \omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\beta \hbar \omega}{2} =$$

$$= \frac{\hbar \omega}{2} \left(1 + \frac{\operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2} - \operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}}{\operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}} \right) = \frac{\hbar \omega}{2} \left(1 + \frac{2e^{-\frac{\beta \hbar \omega}{2}}}{e^{\frac{\beta \hbar \omega}{2}} - e^{-\frac{\beta \hbar \omega}{2}}} \right) =$$

$$= \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (\text{lásd 18/a})$$

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{\hbar \omega}{2} \cdot \frac{-1}{\operatorname{sh}^2 \frac{\beta \hbar \omega}{2}} \cdot \frac{\hbar \omega}{2} \cdot \frac{-1}{k_B T^2} = k_B \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\operatorname{sh}^2 \frac{\beta \hbar \omega}{2}}$$



$\beta \rightarrow 0 (T \rightarrow \infty): Z \approx \frac{1}{\beta \hbar \omega} \Rightarrow E \approx \frac{1}{\beta} = k_B T$

$C \approx k_B$

$\beta \rightarrow \infty (T \rightarrow 0): E \approx \frac{\hbar \omega}{2} + \hbar \omega e^{-\beta \hbar \omega}$

$C \approx k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}}$

$\frac{k_B T}{\hbar \omega}$	0.25	0.5	1	2
C/k_B	0.2	0.72	0.92	0.98

Paramétertől függő Hamilton-operátor

23/a

\hat{H}_λ a λ paramétertől függ.

Állítás: $\left\langle \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda}$

Igazt. el. és sz. esetben is!

Bizt.: a) kl. eset:

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{1}{Z} \int \frac{d^f q d^f p}{h^f} \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} e^{-\beta \hat{H}_\lambda} = \frac{-\frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_\lambda}{\partial \lambda}}{Z} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda}$$

b) kv. eset: Előbb belátjuk a Feynman-Hellman-tételt:

$$\left\langle \psi_i \left| \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right| \psi_i \right\rangle = \frac{\partial E_i}{\partial \lambda}, \text{ ahol } \hat{H}_\lambda |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle \text{ és } \langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$$

Bizt.: Tudjuk, hogy $E_i = \langle \psi_i | \hat{H}_\lambda | \psi_i \rangle$

$$\Rightarrow \frac{\partial E_i}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial \psi_i}{\partial \lambda} \left| \hat{H}_\lambda \right| \psi_i \right\rangle + \underbrace{\langle \psi_i | \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \psi_i \rangle}_{E_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle} + \underbrace{\langle \psi_i | \hat{H}_\lambda | \frac{\partial \psi_i}{\partial \lambda} \rangle}_{E_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle} =$$

$$= E_i \left(\underbrace{\left\langle \frac{\partial \psi_i}{\partial \lambda} \left| \psi_i \right\rangle + \left\langle \psi_i \left| \frac{\partial \psi_i}{\partial \lambda} \right\rangle}_{\frac{\partial \langle \psi_i | \psi_i \rangle}{\partial \lambda} = 0} \right) + \langle \psi_i | \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \psi_i \rangle = \left\langle \psi_i \left| \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right| \psi_i \right\rangle$$

Viszta a fenti állításhoz:

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z_\lambda} \langle \psi_i | \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} | \psi_i \rangle \stackrel{FH}{=} \frac{1}{Z_\lambda} \sum_i e^{-\beta E_i} \frac{\partial E_i}{\partial \lambda} = \frac{1}{Z_\lambda} \left(-\frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_\lambda}{\partial \lambda} \right) = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} \Rightarrow \left\langle \frac{\partial \hat{H}_\lambda}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda}$$

Problème: 1 db. oscillatoire

$$\overline{x^2}, \overline{p^2}, \sqrt{\overline{x^2} \overline{p^2}} \geq \frac{\hbar}{2} \quad ?$$

kl.: $Z = \frac{1}{\beta \hbar \omega}$, $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, $\lambda = \omega^2$

$$\Rightarrow x^2 = \frac{2}{m} \frac{\partial H}{\partial \omega^2} \Rightarrow \overline{x^2} = \frac{2}{m} \frac{\partial H}{\partial \omega^2} = \frac{2}{m} (-k_B T) \frac{\partial}{\partial \omega^2} \ln Z =$$

$$= + \frac{2}{m \beta} \frac{\partial}{\partial \omega^2} \ln(\beta \hbar \omega) = \frac{2}{m \beta} \cdot \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\partial \omega}{\partial \omega^2} = \frac{2}{m \beta \omega} \cdot \frac{1}{2\omega} = \frac{k_B T}{m \omega^2}$$

$\overline{p^2} = ?$

$$\frac{\overline{p^2}}{2m} = \overline{H} - \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{x^2} = k_B T - \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot \frac{k_B T}{m \omega^2} = \frac{1}{2} k_B T$$

|| E

$$\Rightarrow \overline{p^2} = m k_B T$$

$$\sqrt{\overline{x^2} \overline{p^2}} = \sqrt{\frac{k_B T}{m \omega^2} \cdot m k_B T} = \frac{k_B T}{\omega} = \frac{k_B T}{\hbar \omega}$$

kl.: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \Rightarrow \overline{\hat{x}^2} = \frac{2}{m} \frac{\partial H}{\partial \omega^2} =$

$$= \frac{2}{m} (-k_B T) \frac{\partial}{\partial \omega^2} \ln Z = - \frac{2}{m \beta} \frac{\partial}{\partial \omega^2} \ln \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\beta \hbar \omega}{2}} = \dots = \frac{1}{2 m \omega^2} \frac{\hbar \omega \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2}}{2}$$

$$\frac{\overline{\hat{p}^2}}{2m} = \overline{H} - \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{\hat{x}^2} = \frac{\hbar \omega}{2} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2} - \frac{\hbar \omega}{4} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2} = \frac{\hbar \omega}{4} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2}$$

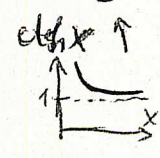
1/gy $\overline{\hat{p}^2} = 2m \cdot \frac{\hbar \omega}{4} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2}$

L'atjua, loogy $\frac{\overline{\hat{p}^2}}{2m} = \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{\hat{x}^2} = \frac{\hbar \omega}{4} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2}$ is $\boxed{\sqrt{\overline{x^2} \overline{p^2}} = \frac{\hbar}{2} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2}}$

kl. hat. ext: $T \rightarrow \infty, \beta \rightarrow 0$, $\operatorname{ch} x \xrightarrow{x} \frac{1}{x}$

1/gy $\overline{x^2} = \frac{1}{2 m \omega^2} \frac{\hbar \omega}{4} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2} \xrightarrow{\beta} \frac{2}{m \omega^2} \frac{\hbar \omega}{4} \cdot \frac{2}{\beta \hbar \omega} = \frac{k_B T}{m \omega^2}$

$\overline{p^2} = 2m \frac{\hbar \omega}{4} \operatorname{ch} \frac{\beta \hbar \omega}{2} \xrightarrow{\beta} m k_B T$



$$A(p_1) = \frac{\int H(p_1) e^{-\beta H(p_1)} \cdot 4\pi p_1^2 dp_1}{\int e^{-\beta H(p_1)} 4\pi p_1^2 dp_1}$$

Maxwell-féle sebességeloszlás: 1 rétegszelet, T homog. hőmérséklet

4-féggés! \rightarrow $P(p, d^3p) = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3p}{\int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3p} = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3p}{(2\pi m k_B T)^{3/2}}$ ← ideális gázban, elasztikus, statikus!

$p = m \underline{v} \Rightarrow d^3p = m^3 d^3v$

$$P(\underline{v}, d^3v) = \frac{e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} d^3v}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} m^3 = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} d^3v$$

Ha a \underline{v} irányára nem számít: $d^3v = 4\pi v^2 dv$

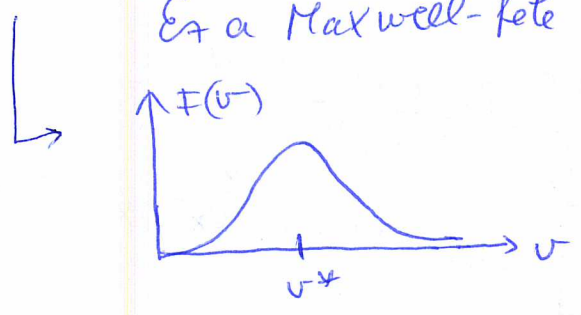
$$P(v, dv) \equiv F(v) \cdot dv = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \cdot 4\pi e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} v^2 dv$$

$F(x) = C \cdot e^{-x^2}$
 $x = v/v^*$

$$F(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \cdot 4\pi e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} v^2$$

$F(v)$ is normalizált:
 $\int_0^\infty F(v) dv = 1$

És a Maxwell-féle sebességeloszlás



A legvalószínűbb: v^*

$$\ln F(v) = \max$$

$$\Rightarrow -\beta \frac{mv^2}{2} + \ln v^2 = \max$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial v} \left[-\beta \frac{mv^2}{2} + \ln v^2 \right] = 0 \Rightarrow v^* = \sqrt{\frac{2 k_B T}{m}}$$

Középmértékű $\overline{v^n}$ átlagadat is.

Ehhez felhasználtjuk az $I_n = \int_0^\infty e^{-ax^2} \cdot x^n dx = \frac{1}{2} a^{-\frac{n+1}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$

integrált. Ennek bizonyítására a következő:

$y = ax^2$ új változóval: $I_n = \dots = \frac{1}{2} a^{-\frac{n+1}{2}} \int_0^\infty e^{-y} y^{\frac{n-1}{2}} dy = \frac{1}{2} a^{-\frac{n+1}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)$

így $\overline{v^n} = \int_0^\infty F(v) v^n dv = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} 4\pi \int_0^\infty e^{-\beta \frac{mv^2}{2}} v^{n+2} dv = \dots = \left(\frac{2 k_B T}{m}\right)^{\frac{n}{2}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{n+3}{2}\right)$

Spec. ext:

24/b

a) $n=2 \Rightarrow \overline{v^2} = \frac{2 \cdot \frac{3}{2} k_B T}{m} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3 k_B T}{m}$

$\Rightarrow \sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3}{2}} v^* \approx 1.22 v^*$

b) $n=1, \overline{v} = \dots = \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} v^* \approx 1.13 v^*$

Így $\sqrt{\overline{v^2}} > \overline{v} > v^*$ Lásd a 24/c oldalon aA ábrán

Megjegyzés: A Maxwell-előállítás feltétele, mint a reflexív előállítás vitesgátján (nem makroszkopikus rendszernek).

Kinémotika a reflexív energiá előállítás is.

$\epsilon = \frac{p^2}{2m}, P(p) d^3p = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3p}{(2\pi m k_B T)^{3/2}}$

$d^3p = 4\pi p^2 dp = 2\pi (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon} d\epsilon$

Így $F(\epsilon) d\epsilon \equiv P(p) d^3p = \frac{e^{-\beta \epsilon} \cdot 2\pi (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon} d\epsilon}{(2\pi m k_B T)^{3/2}}$

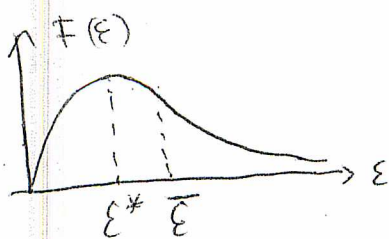
$\Rightarrow \boxed{F(\epsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \beta^{3/2} e^{-\beta \epsilon} \sqrt{\epsilon}} \rightarrow F(x) = C e^{-\frac{x}{\epsilon^*}}, x = \frac{\epsilon}{\epsilon^*}$

Értelmezés a legvalószínűbb energia, ϵ^* :

Ha $F(\epsilon) = \max \Rightarrow -\beta \epsilon + \frac{1}{2} \ln \sqrt{\epsilon} = \max \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \epsilon} (\dots) = 0$

$\Rightarrow \boxed{\epsilon^* = \frac{1}{2} k_B T}$

Hasonlóan $\overline{\epsilon} = \int F(\epsilon) \cdot \epsilon d\epsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \beta^{3/2} \int_0^\infty e^{-\beta \epsilon} \epsilon^{3/2} d\epsilon = \dots = \frac{3}{2} k_B T$

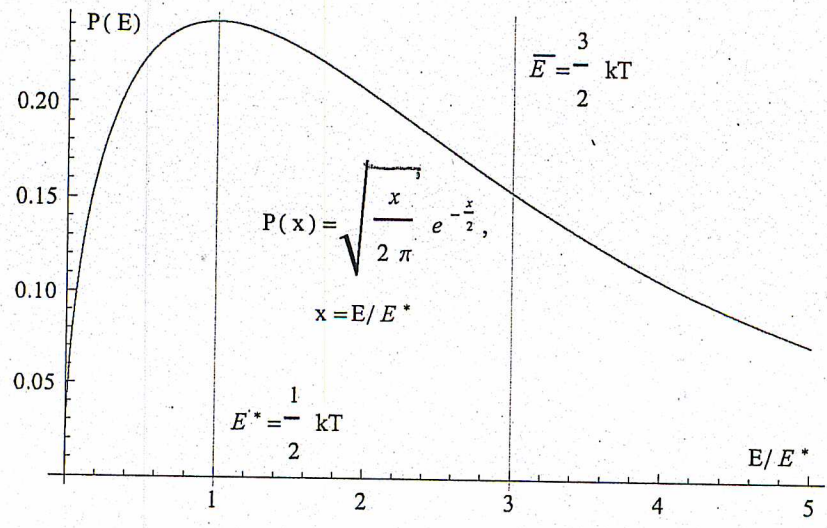
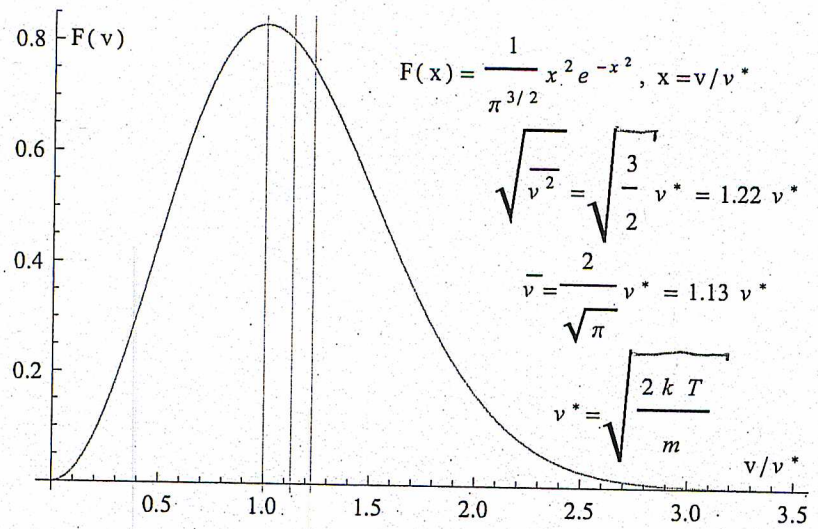


$\frac{1}{2} k_B T = \epsilon^* < \overline{\epsilon} = \frac{3}{2} k_B T$

Lásd a 24/d oldalon aA ábrán!

$F(x) = C e^{-\frac{x}{\epsilon^*}}, x = \frac{\epsilon}{\epsilon^*}$

Maxwell-féle sebességeloszlás ideális gáz
 egy részecskéjére



↑ Energia-eloszlás
 Péter eloszlás!

Barometrius magasság-formula;

Ideális gázban a részecskéek magasság szerinti eloszlása.

N részecske $H(p|q) = \sum_i^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + U(q) \rightarrow U(q) = \sum_{i=1}^N U(r_i)$

$P(q|p, dq, dp) = \frac{e^{-\beta H(p|q)}}{\text{normális}} d^3q d^3p$ $\frac{p^2}{2m} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$

A részecske sűrűség: $n(r) = \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i)$

$\Rightarrow \overline{n(r)} = \frac{\sum_{i=1}^N \int e^{-\beta U(r_i)} \delta(r - r_i) d^3r_i}{\int e^{-\beta U(q)} d^3q} = \frac{N \int e^{-\beta U(r')} \delta(r - r') d^3r'}{\int e^{-\beta U(r)} d^3r} =$

$= C \cdot e^{-\beta U(r)}$; C: normális

Ha $U(r) = -mgz \Rightarrow$ $n(z) = n_0 e^{-\beta mgz}$ $n_0 = n(z=0) =$

Ideális gáz: $pV = N k_B T \Rightarrow p = n k_B T$

T=del \Rightarrow $p(z) = p_0 e^{-\beta mgz}$ $=$ $p_0 e^{-\frac{mgz}{k_B T}}$

Est használhatjuk k_B mértékegység.

Megj: a légkör általában nem izoterm, a fenti formula nem alkalmazható jól.

Erviparticio: klaszikus, kanonikus eloklasselt mikrokoz / 25/6

x_1, \dots, x_{2f} a q és p koordináták jelölése

1) Legyen $H = \lambda_1 x_1^2 + g(x_2, \dots, x_{2f})$

\hookrightarrow tetraéleges, de $e^{-g(x)} \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$ lásd 23/a

Eller $x_1^2 = \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} \Rightarrow \overline{x_1^2} = \frac{\partial H}{\partial \lambda_1} = \frac{\partial F}{\partial \lambda_1}$, ahol

$F = -k_B T \ln Z$ és $Z = \frac{1}{h^{2f}} \int e^{-\beta(\lambda_1 x_1^2 + g(x_2, \dots, x_{2f}))} dx_1 \dots dx_{2f} =$
 $= \sqrt{\frac{h}{\beta \lambda_1}} \cdot C$, C nem függ λ_1 -től!

$\ln Z = -\frac{1}{2} \ln \lambda_1 + \text{const}$ \rightarrow nem függ λ_1 -től

$\Rightarrow \frac{\partial F}{\partial \lambda_1} = k_B T \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\lambda_1} \Rightarrow \boxed{\overline{\lambda_1 x_1^2} = \frac{1}{2} k_B T}$

Egy szab. fókusz $\frac{1}{2} k_B T$ energiát jut.

2.) Általánosított erviparticio:

$x_i, i = 1, 2, \dots, 2f$, a koordináták és impulzusok egymással jelleltek

Áll.: $\boxed{\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = k_B T \cdot \delta_{ij}}$

Bizt.: $\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = \frac{1}{Z} \int x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H} dx$, ahol $Z = \int e^{-\beta H} dx^{2f}$

Parc. int.: $\frac{\partial}{\partial x_j} (x_i e^{-\beta H}) = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} e^{-\beta H} + x_i e^{-\beta H} (-\beta \frac{\partial H}{\partial x_j})$

$\int x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H} dx_j = k_B T \delta_{ij} \int e^{-\beta H} dx_j - k_B T \int [x_i e^{-\beta H}]_{-\infty}^{\infty} = \textcircled{*}$
 $= 0$, mivel $e^{-\beta H} |_{x_j = \pm\infty} = 0$

$\textcircled{*} = k_B T \delta_{ij} \int e^{-\beta H} dx_j$. A többi változó is \int integrálva.

$\overline{x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}} = k_B T \delta_{ij}$ ✓

Következtetések:

26/a

a.) Legyen $H(p, q)$ homogén 2-fokú polinómja p, q -nak:

$$H(\lambda p, \lambda q) = \lambda^2 H(p, q)$$

Ezért az Euler-tétel miatt:

$$H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f \left(p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} + q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad , \quad f = 3N \text{ N db r\u00e9teks\u00e9ve}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \overline{H(p, q)} = \frac{1}{2} \cdot 2f \cdot \epsilon_{BT} = \boxed{f \cdot \epsilon_{BT}}}$$

Megj\u00e9: Euler-t\u00e9tel: $\boxed{\text{Legyen } f(\lambda x, \lambda y) = \lambda^p f(x, y)}$
 $p \geq 1$

Ez\u00e9rt $\boxed{f(x, y) = \frac{1}{p} \left(\frac{\partial f}{\partial x} x + \frac{\partial f}{\partial y} y \right)}$

Biz: $\frac{\partial}{\partial \lambda} f(\lambda x, \lambda y) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \lambda^p f(x, y)$

$$\frac{\partial f(\lambda x, \lambda y)}{\partial(\lambda x)} \frac{\partial(\lambda x)}{\partial \lambda} + \frac{\partial f(\lambda x, \lambda y)}{\partial(\lambda y)} \frac{\partial(\lambda y)}{\partial \lambda} = p \lambda^{p-1} f(x, y)$$

$$x \frac{\partial f(\lambda x, \lambda y)}{\partial(\lambda x)} + y \frac{\partial f(\lambda x, \lambda y)}{\partial(\lambda y)} = p \lambda^{p-1} f(x, y)$$

Legyen $\lambda = 1 \Rightarrow p f(x, y) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} x + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} y$

b.) A rendszer energia a p_i impulzusoknak (m\u00e9g\u00e1z\u00e9s is
ha p_i függ q_i -t\u00f6l is, azaz, amikor a kanonikus impulzus
a q_i koordin\u00e1t\u00f3l is függ) mindig 2-fok\u00fa homog\u00e9n
polin\u00f3mja. Ez\u00e9rt az Euler-t\u00e9tel miatt:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f p_i \frac{\partial K}{\partial p_i} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^f p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \Rightarrow \text{\"atlagolva} \Rightarrow \text{f\u00e9kpartici\u00f3}$$

\uparrow
 $H = K + U$

$$\boxed{\overline{K} = \frac{1}{2} \cdot f \cdot \epsilon_{BT}}$$

f\u00fcggetlen U -t\u00f6l!

A virial-tétel és az ekvipartíció:

a) Mechanika (Landau I. kötet 39. old.)

$$K = \sum_i^f \frac{p_i^2}{2m} \rightarrow p_i \text{ kvadratikus polinomi}$$

Euler-tétel $\Rightarrow 2K = \sum_i^f p_i \frac{\partial K}{\partial p_i} = \sum p_i \frac{p_i}{m} = \sum p_i \dot{q}_i =$

$$= \frac{d}{dt} \left(\sum p_i q_i \right) - \sum_i \dot{p}_i q_i = \frac{d}{dt} \left(\sum_i p_i q_i \right) + \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} q_i = \textcircled{*}$$

Átlagérték az időátlagot: $\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(t) dt$

Ha $f(t) = \frac{dF}{dt}$ alakú és $F(t)$ korlátos $\Rightarrow \bar{f} = \frac{\partial F}{\partial t} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{F(T) - F(0)}{T} = 0$.

Így $\textcircled{*} = \sum_i \overline{q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}} = 2\bar{K}$, $H = K + V$ és V q_i k-fokú polinomi

$\Rightarrow \boxed{2\bar{K} = k\bar{V}}$ Ez a mechanika virial-tétele
Spec. eset: Coulomb t. $k = -1 \Rightarrow \boxed{2\bar{K} = -\bar{V}}$

b.) Virial-tétel stat. fiz. bizonyítás:

$$H = K + \phi(q) + U^{\text{fal}}$$

ϕ a részecskék közt. t. és U^{fal} az edény falának potenciálja. Legyen N részecske az edényben!

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = \frac{\partial \phi}{\partial q_j} - F_j, \text{ ahol } F_j = -\frac{\partial U^{\text{fal}}}{\partial q_j}$$

$$\sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial H}{\partial q_j}} = 3N k_B T = \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial \phi}{\partial q_j}} - \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j F_j} = \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial \phi}{\partial q_j}} - \sum_{i=1}^N \overline{r_i \cdot F_i}$$

$$\begin{aligned} & - \oint p \cdot dA \cdot r_i = \\ & = - \rho \int \text{div} r \, dV \\ & = - 3 \rho V \end{aligned}$$

edény térfogata pálya.

$$\Rightarrow 3N k_B T = \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial \phi}{\partial q_j}} + 3 p \cdot V$$

$$\Rightarrow \boxed{pV = N k_B T - \frac{1}{3} \sum_{j=1}^{3N} \overline{q_j \frac{\partial \phi}{\partial q_j}}}$$

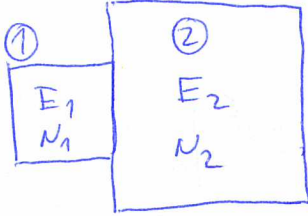
id. q-ért és t. járuléka

Látszik még a t. rendszereket!

Ha ϕ k-fokú polinomi q_i -vel \Rightarrow Euler-t.

$$\boxed{pV = N k_B T - \frac{k}{3} \bar{\phi}}$$

Nagykanonikus sokaság, T-μ sokaság:



gyenge kh., kovalit⁴ függetlenség

$$P(E_1, N_1) \sim \Omega_1(E_1, N_1) \Omega_2(E_2, N_2)$$

$$E_1 + E_2 = E \rightarrow \delta E \text{ kóntatálai sággal}$$

$$N_1 + N_2 = N$$

rétecsze-és energiacsere ① ↔ ② zöföt.

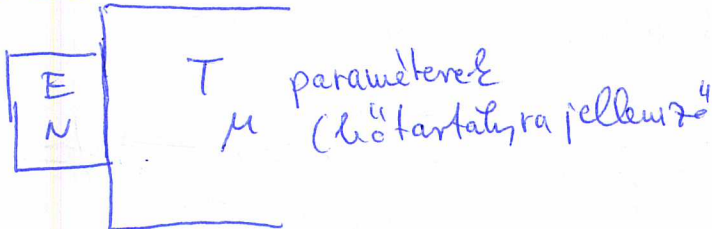
$$\begin{aligned} \text{E}_B \text{ kú } \Omega_2(E_2, N_2) &= S_2(E_2, N_2) = S_2(E, N) + \frac{\partial S_2}{\partial E_2} \Big|_{E, N} (-E_1) + \frac{\partial S_2}{\partial N_2} \Big|_{E, N} (-N_1) + \dots \\ &\quad \begin{matrix} \uparrow \\ E-E_1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ N-N_1 \end{matrix} \quad \sim N \end{aligned}$$

$$= S_2(E, N) - \frac{E_1}{T_2} + \frac{\mu_2}{T_2} N_1$$

$$\Rightarrow P(E_1, N_1) \sim \Omega_1(E_1, N_1) e^{-\frac{E_1}{k_B T_2} + \frac{\mu_2}{k_B T_2} N_1}$$

$$\frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} (E_1)^2 \sim \frac{1}{N} \sim \frac{N_1^2}{N} \ll 1$$

Sokaság:



$$P(E, N) \sim \Omega(E, N) e^{-\beta E - \alpha N}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \text{ és } \alpha = -\frac{\mu}{k_B T}$$

Egy állapotra:

$$P(E_n(N), N) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n(N) - \alpha N}$$

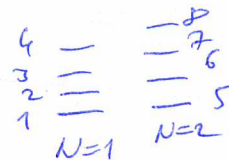
$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \left(\sum_n e^{-\beta E_n(N) - \alpha N} \right) = \sum_N e^{-\alpha N} Z_N$$

↑ Kanonikus állapotokhoz N rétecsze.

Legegyszerűbben az l-díj állapotban az energia E_e és a rétecsze szám N_e .

$$P(E_e, N_e) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_e - \alpha N_e}$$

$$Z = \sum_e e^{-\beta E_e - \alpha N_e}$$



Átlagok és fluktuációk:

27/6

$$\left. \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right|_{\alpha} = -Z \bar{E} \Rightarrow \bar{E} = -\frac{1}{Z} \left. \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right|_{\alpha} = -\left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right|_{\alpha}$$

$$\left. \frac{\partial Z}{\partial \alpha} \right|_{\beta} = -Z \bar{N} \Rightarrow \bar{N} = -\frac{1}{Z} \left. \frac{\partial Z}{\partial \alpha} \right|_{\beta} = -\left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} \right|_{\beta} = k_B T \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \right|_T$$

$$\left. \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right|_{\alpha} = Z \bar{E}^2 \quad \text{és} \quad \left. \frac{\partial^2 Z}{\partial \alpha^2} \right|_{\beta} = Z \bar{N}^2$$

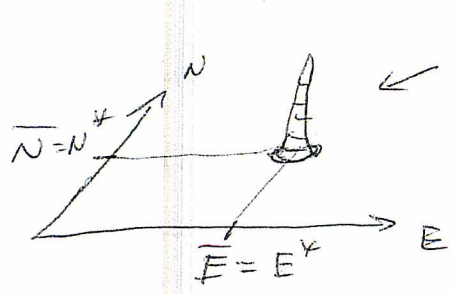
$$\Rightarrow \overline{E^2} - \bar{E}^2 = \frac{1}{Z} \left. \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right|_{\alpha} - \frac{1}{Z^2} \left(\left. \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right|_{\alpha} \right)^2 = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{Z} \left. \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right|_{\alpha} \right) = -\left. \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \right|_{\alpha}$$

$$\Rightarrow \overline{N^2} - \bar{N}^2 = \dots = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{Z} \left. \frac{\partial Z}{\partial \alpha} \right|_{\beta} \right) = -\left. \frac{\partial \bar{N}}{\partial \alpha} \right|_{\beta} = k_B T \cdot \left. \frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu} \right|_T$$

\uparrow
 $\alpha = -\frac{\mu}{k_B T} = -\beta \mu$

Macroscopikus relációk:

$$\left. \begin{aligned} \overline{E^2} - \bar{E}^2 &\sim O(N) \\ \overline{N^2} - \bar{N}^2 &\sim O(N) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\Delta E}{\bar{E}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad \frac{\Delta N}{\bar{N}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$



$$Z = \sum_{E, N} e^{-\beta E - \alpha N} \quad \Omega(E, N, \Delta E, \Delta N) \approx \frac{1}{k_B} S(E, N)$$

$$= e^{-\beta E^* - \alpha N^* + \frac{1}{k_B} S(E^*, N^*)} \Delta E \cdot \Delta N$$

$$\Rightarrow -k_B T \ln Z = E^* - \mu N^* - T S(E^*, N^*) = \bar{E} - \mu \bar{N} - T S(\bar{E}, \bar{N}, V)$$

\uparrow
éles elvágás

$$\Phi(T, \mu, V) = \bar{E} - T S(\bar{E}, \bar{N}) - \mu \bar{N} = -k_B T \ln Z$$

$$\Phi(T, \mu, N) = E - T S - \mu N = -k_B T \ln Z$$

Legendärwettbewerb E, N etc.:

28/a

$$P(E, N) \sim \underbrace{\Omega(E, N)}_{\frac{1}{k_B} S(E, N)} e^{-\beta E - \alpha N}$$

$$\ln P(E, N) = -\beta E - \alpha N + \frac{1}{k_B} S(E, N) + \text{const} = \text{max}$$

$$\frac{\partial}{\partial E} : -\beta + \frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial E} = 0 \Rightarrow T(E) = T(\text{Umgebung})$$

$$\frac{\partial}{\partial N} : -\alpha + \frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial N} = 0 \Rightarrow \frac{\mu(E)}{T(E)} = \frac{\mu}{T} \rightarrow \text{Umgebung}$$

Fundamentales equation (nach Einstein):

$$\phi(T, V, \mu) = \bar{E} - T\bar{S} - \mu\bar{N}, \quad S = S(\bar{E}, \bar{N})$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial T} \right|_{\mu, V} = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} - \bar{S} - T \underbrace{\frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{E}}}_{=1} \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} + \underbrace{(-\mu - T \frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{N}})}_{=0} \frac{\partial \bar{N}}{\partial T} = -\bar{S}(\bar{E}, \bar{V}, \bar{N})$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial V} \right|_{T, \mu} = \underbrace{\left(1 - T \frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{E}}\right)}_{=0} \frac{\partial \bar{E}}{\partial V} + \underbrace{(-\mu - T \frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{N}})}_{=0} \frac{\partial \bar{N}}{\partial V} - T \underbrace{\frac{\partial \bar{S}}{\partial V}}_{=P/T} = -P(\bar{E}, \bar{V}, \bar{N})$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \mu} \right|_{T, V} = -\bar{N} + \underbrace{\left(1 - T \frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{E}}\right)}_{=0} \frac{\partial \bar{E}}{\partial \mu} + \underbrace{(-\mu - T \frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{N}})}_{=0} \frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu} = -\bar{N}$$

$$\hookrightarrow \text{wird gezogen} = -\frac{\partial}{\partial \mu} \left(k_B T \ln Z \right) \Big|_{T, V} = -k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} \Big|_{\beta} \cdot \frac{\partial \alpha}{\partial \mu} \Big|_T = k_B T \bar{N} \left(-\frac{1}{k_B T} \right) = -\bar{N}$$

$$\Rightarrow d\phi = -\bar{S}dT - P dV - \bar{N}d\mu$$

Pelda: Ideális gáz, nagy számú részecske

(28/6)

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \frac{1}{h^3} \int d^3q d^3p e^{-\beta H(p,q;N)} \cdot e^{-\alpha N} \rightarrow e^{-\beta \mu N}$$

Z_N Kanonikus sokaság

Kanonikus 1 részecske

$$z_1 = \int \frac{d^3p d^3q}{h^3} e^{-\beta \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}} = V \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{3/2}$$

$$Z_N = \frac{z_1^N}{N!} \Rightarrow Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z_1^N e^{\beta \mu N}}{N!} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(z_1 e^{\beta \mu})^N}{N!} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow Z = e^{z_1 e^{\beta \mu}}$$

$$\Phi = -k_B T \ln Z = -k_B T z_1 e^{\beta \mu}, \quad d\Phi = -SdT - PdV - Nd\mu$$

$$N = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right|_{T,V} = k_B T z_1 e^{\beta \mu} \beta = \frac{z_1 e^{\beta \mu}}{\beta}$$

$$\text{így } \mu = \frac{1}{\beta} \ln \frac{N}{z_1} = -k_B T \ln \frac{z_1}{N} = -k_B T \ln \left[\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \right]$$

(lásd mikrokanonikus, 18/a oldal)

$$P = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial V} \right|_{T,\mu} = k_B T e^{\beta \mu} \frac{\partial z_1}{\partial V} \Big|_{T,\mu} = k_B T e^{\beta \mu} \cdot \frac{z_1}{V} = \frac{N}{V} k_B T \Rightarrow PV = N k_B T \checkmark$$

Más lépés:

Gibbs-Duhem reláció: $E = TS - PV + \mu N \Rightarrow \Phi = -PV$

Lehet $\Phi = -k_B T z_1 e^{\beta \mu} = -PV \Rightarrow PV = N k_B T \checkmark$

$$S = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial T} \right|_{V,\mu} = \frac{\partial}{\partial T} (k_B T z_1 e^{\beta \mu}) \Big|_{V,\mu} = k_B \frac{\partial (TN)}{\partial T} \Big|_{V,\mu} = k_B N + k_B T \frac{\partial N}{\partial T} \Big|_{V,\mu}$$

Mivel $N = z_1 e^{\beta \mu} \Rightarrow \frac{\partial N}{\partial T} \Big|_{V,\mu} = \frac{\partial}{\partial T} \left[V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{\beta \mu} \right] \Big|_{V,\mu} = \dots = \frac{3}{2} \frac{N}{T} - \frac{N}{T} \frac{\mu}{k_B T}$

így ezt belvna \oplus -ba
 S -re 18/a eredményt építjük

$$E = TS - PV + \mu N = \dots = \frac{3}{2} N k_B T \checkmark$$

G-D \uparrow Φ

Az energia számításához egy másik módja
meggyőzőbb módon:

28/c

$$E = - \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right|_{\alpha, V} \quad | \quad \alpha = -\beta \mu$$

$$\ln Z = z_1 e^{\beta \mu} = z_1 \cdot e^{-\alpha} = V \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{3/2} e^{-\alpha}$$

$$\text{Így } E = - \left. \frac{\partial}{\partial \beta} \left[V \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} e^{-\alpha} \right] \right|_{\alpha, V} = - e^{-\alpha} \cdot V \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{3/2} \left(-\frac{3}{2} \right) \beta^{-5/2}$$

$$= e^{\beta \mu} \cdot V \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{3}{2} \frac{1}{\beta} = \frac{3}{2} k_B T N \quad \checkmark$$

$$z_1 e^{\beta \mu} = N \quad \leftarrow z_1$$

T-p szabáság:



Most az analógiaértéket építjük.

Másodikban lehet levezetni az alapvető formulaikat, mint sorában.

Kanonikus szabáság
Energiaszere

Nagykanonikus szabáság
Energia & részecske

T-p szabáság
energia & térfogat

egy állapot: E_n

egy állapot: E_e, N_e

egy állapot: E_e, V_e

$$P(E_n) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

$$P(E_e, N_e) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_e - \alpha N_e}$$

$$P(E_e, V_e) = \frac{1}{Y} e^{-\beta E_e - \beta P V_e}$$

$$E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$\alpha = -\beta \mu$$

$$\alpha \rightarrow \beta P, N_e \rightarrow V_e$$

$$\overline{\Delta E^2} = - \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

$$E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \Big|_{\alpha, V} \rightarrow \bar{E} = - \frac{\partial \ln Y}{\partial \beta} \Big|_{\beta P, N}$$

$$N = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} \Big|_{\beta, V} \rightarrow \bar{V} = - \frac{\partial \ln Y}{\partial (\beta P)} \Big|_{\beta, N}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$\overline{\Delta E^2} = - \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \Big|_{\alpha, V} \rightarrow \overline{\Delta E^2} = - \frac{\partial^2 \ln Y}{\partial \beta^2} \Big|_{\beta P, N}$$

$$F(T, V, N) = -k_B T \ln Z$$

$$\overline{\Delta N^2} = - \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \alpha^2} \Big|_{\beta, V} \rightarrow \overline{\Delta V^2} = - \frac{\partial^2 \ln Y}{\partial (\beta P)^2} \Big|_{\beta, N}$$

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN$$

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n e^{-\beta(E_n(N) - \mu N)}$$

$$Y = \int dV \sum_n e^{-\beta[E_n(N, V) + PV]}$$

$$F = E - TS$$

$$\phi(T, V, \mu) = -k_B T \ln Z$$

$$G(T, P, N) = -k_B T \ln Y$$

$$d\phi = -SdT - pdV - Nd\mu$$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN$$

$$G = D \rightarrow \phi = -PV$$

$$G(T, P, N) = E - TS + PV$$

$$\phi(T, V, \mu) = E - TS - \mu N$$

$$G = \mu N \leftarrow G = D.$$

$$\sum_n \xrightarrow{\text{klaszikus}} \int \frac{d^3q d^3p}{N! h^3} \rightarrow H(P, Q)$$

Pölda: 1d. gaas, T-p soolastõiglane

29/b

$$Y = \int dV \int \frac{dq^1 dq^2 dq^3}{N! h^{3N}} e^{-\beta[H(p,q;V) + PV]} = \int_0^\infty dV e^{-\beta PV} z(V),$$

$$\text{ehol } z(V) = \int \frac{dq^1 dq^2 dq^3}{N! h^{3N}} e^{-\beta H} = \frac{V^N}{N! h^{3N}} \cdot \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3N}{2}}$$

$$\text{1ga } Y = \int dV \frac{e^{-\beta PV}}{N!} V^N \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} = \int_0^\infty dt e^{-t} \left(\frac{t}{\beta P}\right)^N \cdot \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \quad t = \beta PV \text{ "j'võttes"}$$

$$= \frac{1}{\beta P} \int \frac{dt}{N!} e^{-t} \left(\frac{t}{\beta P}\right)^N \cdot \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} = \frac{1}{(\beta P)^{N+1}} \frac{1}{N!} \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \int_0^\infty dt e^{-t} t^N =$$

$$= \frac{1}{(\beta P)^{N+1}} \frac{1}{N!} \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \cdot \frac{N!}{1} = \left(\frac{2\pi m}{\beta P}\right)^N \left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \quad \Gamma(N+1) = N!$$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN, \quad G = -k_B T \ln Y$$

$$V = \frac{\partial G}{\partial P} \Big|_{T,N} = \frac{\partial}{\partial P} \left[-k_B T N (-\ln Y) \right] = k_B T N \frac{1}{P} \Rightarrow \boxed{PV = N k_B T}$$

$$\mu = \frac{G}{N} = -\frac{k_B T}{N} \ln \left[\left(\frac{k_B T}{P}\right)^N \cdot \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \right] = -k_B T \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T} \Big|_{P,N} = -\frac{\partial(\mu N)}{\partial T} \Big|_{P,N} = -N \frac{\partial \mu}{\partial T} \Big|_{P,N} = \dots$$

$$E = TS - PV + \mu N \text{ alapiin Maxwelli: } E = \frac{3}{2} N k_B T$$

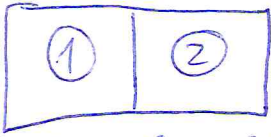
\uparrow G-D.

Stabilitás

30/a

Legvalószínűbb állapot: maximum \rightarrow szükséges feltétel
 \searrow elégséges feltétel

Microkanonikus sokaság:

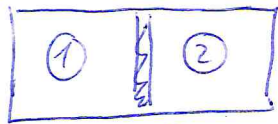
a)  $P(E_1) \sim \Omega_1(E_1) \Omega_2(E_2), E_1 + E_2 = E$
 \Downarrow
 $S_1(E_1) + S_2(E_2) = \max$
termikus rk.
 $\textcircled{1} \leftrightarrow \textcircled{2}$

stabilitási feltétel: $\frac{\partial S_1}{\partial E_1} - \frac{\partial S_2}{\partial E_2} = 0 \Rightarrow \frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_2}$

maximum feltétel: $\frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} + \frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} < 0$

\hookrightarrow egyébként is, mert $\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = \frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial E} = -\frac{1}{T^2 C_V} < 0$

$C_V > 0$

b)  $S_1(E_1, V_1) + S_2(E_2, V_2) = \max$
termikus + mech.

A dugattyú mozghat.

stabilitási feltétel: $T_1 = T_2$ és $P_1 = P_2$ (látuk sorokban!)

maximum feltétel: $\underline{M} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \Big|_V & \frac{\partial^2 S}{\partial E \partial V} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial E} & \frac{\partial^2 S}{\partial V^2} \Big|_E \end{bmatrix}$ matrix negatív definit

$\Rightarrow \det \underline{M} > 0$ és $\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} < 0$ (ett látuk)

$\det \underline{M} = \begin{vmatrix} \frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial E} \Big|_V & \frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial V} \Big|_E \\ \frac{\partial(\frac{P}{T})}{\partial E} \Big|_V & \frac{\partial(\frac{P}{T})}{\partial V} \Big|_E \end{vmatrix} = \frac{\partial(\frac{1}{T}, \frac{P}{T})}{\partial(E, V)} = \frac{\partial(\frac{1}{T}, \frac{P}{T})}{\partial(T, V)} \cdot \frac{\partial(T, V)}{\partial(E, V)} =$

$= \left(\frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial T} \Big|_V \cdot \frac{\partial(\frac{P}{T})}{\partial V} \Big|_T - \frac{\partial(\frac{1}{T})}{\partial V} \Big|_T \cdot \frac{\partial(\frac{P}{T})}{\partial T} \Big|_V \right) \cdot \frac{1}{C_V} = -\frac{1}{T^2} \cdot \frac{1}{T} \cdot \frac{\partial P}{\partial V} \Big|_T \cdot \frac{1}{C_V}$

$= -\frac{1}{T^3} \cdot \frac{\partial P}{\partial V} \Big|_T \cdot \frac{1}{C_V} > 0 \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial V} \Big|_T < 0$

$\Rightarrow \kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T > 0$
 $\Rightarrow C_V > 0$

Egyenlőtlenség

$$\boxed{E_1 | E_2} \Rightarrow \boxed{E_1^* | E_2^*}$$

↑ izolált fal
 ↓ fal
 $S_0 = S_1(E_1) + S_2(E_2)$

↑
 hőmérséklet egyenlősége
 $S = S_1(E_1^*) + S_2(E_2^*) \geq S_1(E_1) + S_2(E_2) = S_0$

↓
 termodinamikai kapcsolat
 $\Rightarrow \boxed{\Delta S \geq 0}$

(=, ha $E_1 = E_1^*, E_2 = E_2^*$)

$$\boxed{E_0} \Rightarrow \boxed{E^*} \quad T$$

↑ izolált fal
 ↓ fal
 $S(E_0)$

$\rightarrow -\beta E + \frac{1}{k_B} S(E) = \max$

$\Rightarrow -\beta E^* + \frac{1}{k_B} S(E^*) \geq -\beta E_0 + \frac{1}{k_B} S(E_0)$

$\Rightarrow E^* - TS(E^*) \leq E_0 - TS(E_0) \Rightarrow \boxed{\Delta F < 0}$

másképp: $\Delta S = S(E^*) - S(E_0) \geq \frac{E^* - E_0}{T} = \frac{Q}{T} \Rightarrow \boxed{\Delta S \geq \frac{Q}{T}}$

$$\boxed{E_0, V_0} \Rightarrow \boxed{E^*, V^*} \quad T, P$$

↑ izolált, rugalmas fal
 ↓
 hőmérséklet és nyomás egyenlősége

$$-\beta E - \beta PV + \frac{1}{k_B} S(E, V) = \max$$

$\Rightarrow -\beta E^* - \beta PV^* + \frac{1}{k_B} S(E^*, V^*) \geq -\beta E_0 - \beta PV_0 + \frac{1}{k_B} S(E_0, V_0)$

$\Rightarrow E^* + PV^* - TS(E^*, V^*) \leq E_0 + PV_0 - TS(E_0, V_0) \Rightarrow \boxed{\Delta G \leq 0}$

másképp: $\Delta S = S(E^*, V^*) - S(E_0, V_0) \geq \frac{E^* - E_0 + P(V^* - V_0)}{T} = \frac{Q}{T}$

$\Rightarrow \boxed{ds \geq \frac{DQ}{T}}$

↑
 zárt rendszer
 kvázistatikus folyamatbeli munkája

Összefoglalás:

0. feltétel: egyensúly tranzitivitásából \Rightarrow
intenzív paraméterek egyenlősége
jellemezi az egyensúlyt.

I. feltétel: energiamegmaradás

II. feltétel: $dS \geq \frac{dQ}{T}$

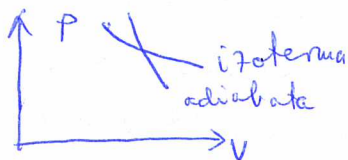
Zárt rendszerben

a) S max egyensúlyban

b) S additív

c) spontán folyamatnál $\Delta S \geq 0$

III. feltétel $S \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0$



$K_{\pi} - K_S \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0$

$T=0$ -nál az adiabata és az izotermia
nem metathetiz egyenest,

Adiabati kúsan nem érheto el a $T=0$ állapot.

Másrúppen: $\frac{\partial P}{\partial T} \Big|_S = - \frac{\frac{\partial S}{\partial T} \Big|_P}{\frac{\partial S}{\partial P} \Big|_T} = \frac{-C_p/T}{-\frac{\partial V}{\partial T} \Big|_P} = \frac{C_p}{TV\alpha} \Rightarrow \Delta P = \frac{C_p}{V\alpha} \cdot \frac{1}{T} \Delta T$
↑
adiabati kúsan

$T=0$ -nál végtelen ΔP lenne,

három szunt a) $S(T \rightarrow 0)$ véges.

$S(T) - S(0) = \int_0^T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_V dT = \int_0^T \underbrace{\frac{C_V(T')}{T'}}_{\text{véges}} dT'$

Csakhúgy lehet véges, ha

$C_V(T) \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0$

b) $S(T \rightarrow 0)$ független a további állapotjelzőktől.

$0 \stackrel{\uparrow}{=} \frac{\partial S}{\partial V} \stackrel{\uparrow}{=} - \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} = \frac{\partial P}{\partial T} \Big|_V \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0 \Rightarrow \frac{\alpha}{K_T} \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0$
↑
Maxwell

vagy $0 \stackrel{\uparrow}{=} \frac{\partial S}{\partial P} \Big|_T = - \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P} = - \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_P \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0 \Rightarrow \alpha = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_P \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0$
↑
 $T=0$

c) $S=0$, ha $T=0 \leftarrow$ stat. fiz. ből, ez a legenyesebb állítás!

Maradék entropia, metastabilitás:

a) Függvény S spin^u rendszer zérus B térben.

2S+1 degeneráció $\Rightarrow Z = (2S+1)^N Z^1$
 $\Rightarrow F = -k_B T \ln Z = -k_B T N \ln(2S+1) + F^1$
 $S(T=0) = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B N \ln(2S+1)$ van maradék entropia

pl.: C₂₀H₄₂ paraffinban a H atom protonjához spinje miatt
 $Z \sim 2^{42N} \rightarrow S = 42 k_B N \ln 2$

b.) (i) metastabil molekula kristályok: rendszer CO rend.

pl.: $\frac{1}{2}$ szénmonoxid, CO. Ha ϵ az az energia, melyet
 a CO-CO átmenet, CO-OC rendbe, akkor hűtve a rendben
 a CO-OC \rightarrow CO-CO. Atomban az átmenet ideje lassú.
 A rendszer metastabil állapotba marad és ez az a maradék
 entropia $S(T=0) = k_B \ln 2^N = N k_B \ln 2$

(ii) CuZn, binary alloy (β -brass) rendszerben állapotok \rightarrow rendszer a hűtés során. Quenched, befagyott a metastabil állapotba.

(iii) Hídok $\frac{1}{2}$, H₂O: kristályos, Wurtzite-berendezet.
 Ob-El. miatt ledeszük a 2 H-át több vagy 2-vel kevesebb
 van az O atom közelében. "Ice rule": protonok úgy helyezkednek
 el, hogy 2 távol, 2 közel van az O atomhoz. Ez alapjain Lieke \otimes
 megmutatta, hogy $S(T=0) = k_B N \ln \left(\frac{4}{3}\right)^{3/2}$, ami jól energia elszellett.

(iv) Dohozva zart elektronokat / kristályban fotonok.
 Ideális kv. gázoknál később látni fogjuk, hogy S az állapotok sűrűsége függ
 Elektronra $f(\epsilon_F) = \text{const} \Rightarrow S \sim T$, míg fotonra: $f(\epsilon) \sim \epsilon^2 \Rightarrow S \sim T^3$.

\otimes E.H. Lieb, PRL 18, 692 (1967); review: E.H. Lieb, F.Y. Wu
 in Domb and Green: Phase Transition and
 Critical Phenomena 1, p 331.

Ideális gázmolekulák fajhője:

32/a

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \hat{h}_i \right)$$

\downarrow transzláció \hookrightarrow

A gázmolekulák \hat{h}_i kölcsönhatást elhanyagoljuk (ideális)

belső szabadságfokok:
 spin (elektron és mag),
 rotáció, vibráció, elektrongerjesztés

\hat{h}_i sajátértékei: ϵ_{ei} , azaz $\hat{h}_i |e_i\rangle = \epsilon_{ei} |e_i\rangle$

Erőss a rendszer állapotiszsége:

$$Z = \int \frac{d^3x d^3p}{N! h^{3N}} \cdot e^{-\beta \hat{H}} = \frac{Z_1^N}{N!}, \text{ ahol}$$

Maxwell-Boltzmann
 statisztika,

és sűrűség, magas hőmérséklet

$$Z_1 = V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \sum_i e^{-\epsilon_{ei}}$$

$Z_{\text{belső}}$

$$F = -k_B T \ln Z = -N k_B T \ln Z_1 + k_B T (N \ln N - N)$$

↓
 nem függ V -tól!

$$P = - \frac{\partial F}{\partial V} \Big|_{N,T} = \frac{N k_B T}{V}$$

azaz az egyatomos gáz
 állapotegyenletével. Nem függ a
 belső szabadságfoktól!!!

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T} \Big|_{V,N} = N k_B \left[\frac{5}{2} + \ln \frac{V/N}{\lambda_T^3} + \ln Z_{\text{belső}} + T \frac{\partial \ln Z_{\text{belső}}}{\partial T} \right], \text{ ahol}$$

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

termikus de Broglie-hullámhossz
 (lásd később!)

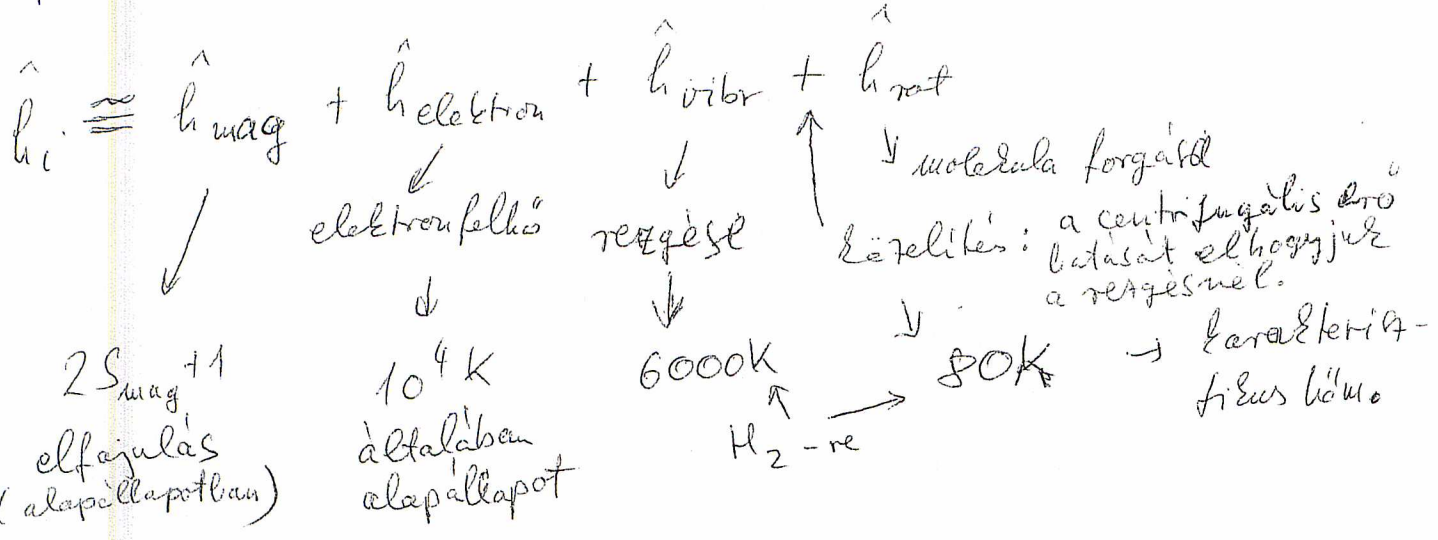
gázorvial: $r_0^3 \equiv \frac{V}{N} \gg \lambda_T^3$, azaz $r_0 \gg \lambda_T$
 és sűrűség, nagy T ↓
 alacsony távolság

$$F = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \dots = N k_B T \left[\frac{3}{2} + T \frac{\partial \ln Z_{\text{belső}}}{\partial T} \right]$$

$$C_V = \frac{\partial F}{\partial T} \Big|_{V,N} = N k_B \left[\frac{3}{2} + \frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial \ln Z_{\text{belső}}}{\partial T} \right) \right]$$

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N} \Big|_{T,V} = -k_B T \ln \left(\frac{V}{N \lambda_T^3} z_{\text{belső}} \right)$$

A fajhő, belsőenergia, entropia és a kémiai potenciál is függ a belső szabadságfokoktól!



$$z_{\text{belső}} = z_{\text{mag}} \cdot z_{\text{elektron}} \cdot z_{\text{vibr}} \cdot z_{\text{rot}}$$

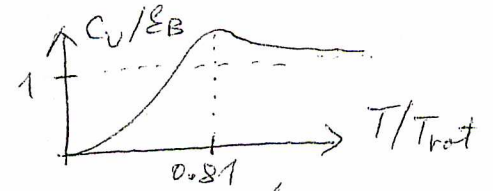
$z_{\text{elektron}} \approx e^{-\beta \epsilon_0} \Rightarrow E = -\frac{\partial \ln z_{\text{el}}}{\partial \beta} = \epsilon_0 \Rightarrow C_{\text{el}} = 0$

fajhőben nem látni!

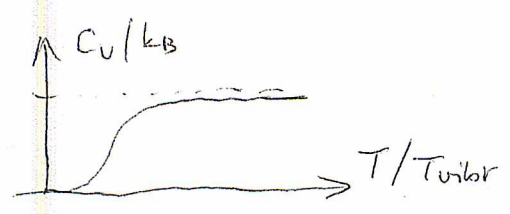
$$z_{\text{rot}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-\beta \frac{\hbar^2 l^2}{2I}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-\frac{T_{\text{rot}}(l+1)}{T}}$$

$T_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2Ik_B} \Rightarrow$ karakterisztikus hőm.

$\hat{h}_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} \rightarrow$ tehetetlenségi nyomaték



$$z_{\text{vibr}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n + \frac{1}{2})} = \dots = \frac{1}{2 \text{sh} \frac{\hbar \beta \omega}{2}} = \frac{1}{2 \text{sh} \frac{T_{\text{vibr}}}{T}}$$



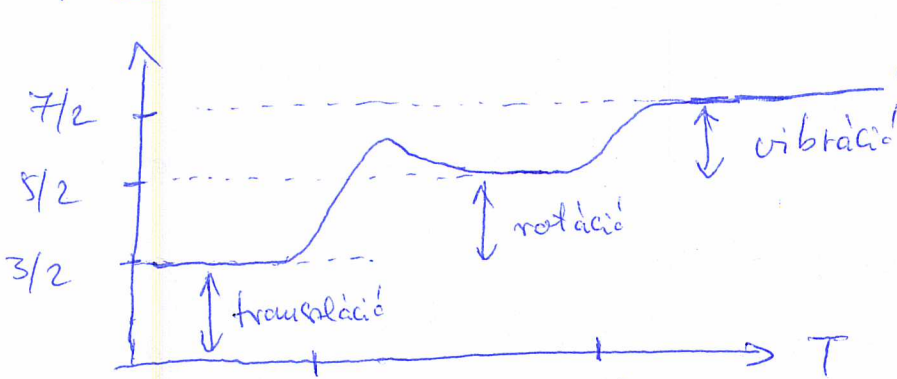
Ha $T \rightarrow \infty : z_{\text{rot}} \approx \frac{2I}{\hbar^2 \beta} = T/T_{\text{rot}}$

$z_{\text{vibr}} \approx \frac{1}{\hbar \omega \beta} = T/T_{\text{vibr}}$

\Rightarrow Ékvipartíció: $C_{\text{rot}} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} N k_B = 2 \cdot \frac{1}{2} k_B N$

$C_{\text{vibr}} = 2 \cdot \frac{1}{2} N k_B$

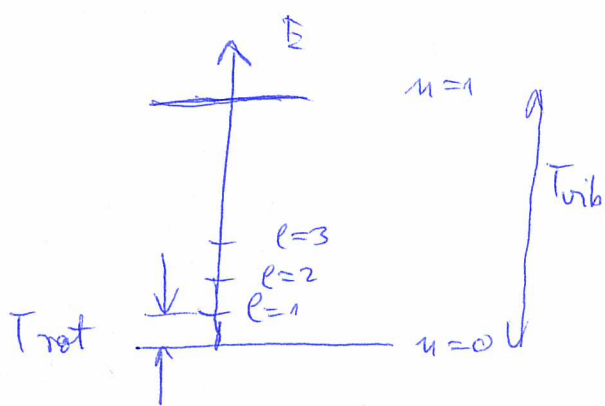
Fajlagos sztatikus molekulák:



	H ₂	HD	D ₂	HCl	O ₂
T _{rot}	80	64	43	15	2
T _{vibr}	6100	5300	4300	4100	2200

$T_{rot} = 0,1 - 1 \text{ cm} = 0,1 - 1 \text{ meV}$
 mikro hullám

$T_{vibr} = 2 - 3 \text{ um} = 40 - 60 \text{ meV}$
 infravörös



Diszociációs energia: H₂ → 52000K; NO → 61000K
 N₂ → 113000K; O₂ → 59000K
 Cl₂ → 29000K; CO → 98000K

Több atomos molekulák:

- $E_{el} \approx E_0$ csak a legalsószámú elektronállapot van betöltve (érvetél O₂ és NO, lásd később).
- A tehetetlenségi nyomaték olyan nagy, hogy a rotációs mozgást klasszikusan kezelhetjük.

$$z_{\text{belső}} \approx g_e \frac{g_{\text{mag}} \cdot z_{\text{rot}}^{\text{klassz}}}{\delta} z_{\text{vibr}} \quad \text{1 ahol}$$

g_e : az alapállapot elektronállapot degenerációja
 g_{mag} : magspin-állapot degenerációja

δ : szimmetriaparaméter = szimmetria miatt megvalósuló ekvivalens konfigurációk száma

(pl.: H₂ → $\delta = 2$
 CH₄ → $\delta = 3 \times 4 = 12$, négy háromfogatú tengely

Pl. H₂-re a klasszikus fizikát felében a két mag csak lehet kereszt.

$$z_{\text{rot}}^{\text{klassz}} = \frac{2\theta}{h^2\beta}$$

Ha a molekulában n atom van, akkor a szabadságfokok száma $3 \cdot n$. Ebből a forgási

szabadságfokok száma = $\begin{cases} 2, & \text{lineáris molekula} \\ 3, & \text{nemlineáris} \end{cases}$

A translációs szab. fokok száma = 3.

Igy a rezgési módusok száma = $\begin{cases} 3n-5, & \text{lineáris mol.} \\ 3n-6, & \text{nemlineáris mol.} \end{cases}$

$Z_{\text{vibr}} = \begin{cases} \prod_{i=1}^{3n-5} \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\hbar \beta \omega_i}{2}}, & \text{lineáris mol.} \\ \prod_{i=1}^{3n-6} \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\hbar \beta \omega_i}{2}}, & \text{nemlineáris mol.} \end{cases}$

Megj.: Ha $\Theta_1 \neq \Theta_2 \neq \Theta_3$ (aszimmetrikus porgettyű)
 $I_{\text{rot}} = \frac{L_x^2}{2\Theta_1} + \frac{L_y^2}{2\Theta_2} + \frac{L_z^2}{2\Theta_3} \rightarrow \Theta_1, \Theta_2, \Theta_3$ a főtengelyekre vonatkozó

$Z_{\text{rot}}^{\text{elast}} = \frac{V_{\text{rot}}}{\sigma} \left(\frac{2}{\hbar^2 \beta} \right)^{3/2} \sqrt{\det \underline{\Theta}}$, $\det \underline{\Theta} = \Theta_1 \Theta_2 \Theta_3$

Levegőtől kezd: Kubo: 212. old (3.14) és 172. old. Landau V. kötet, 172. old.

Kvantumosan csak a gömbi ($\Theta_1 = \Theta_2 = \Theta_3 = \Theta$) és a szimmetrikus ($\Theta_1 = \Theta_2 \neq \Theta_3$) porgettyű számolható analitikusan. Lásd Landau III. kötet 484. old.

Egyen példaként az NH_3 molekula

Példák molekulák fajhőjére klasszikus határesetben:

$n=2$ atomos mol.

$3n-5 = 1$ rezgési módus

transzl.: $3 \cdot \frac{1}{2} k_B T$
 forgás: $2 \cdot \frac{1}{2} k_B T \leftarrow \left(\frac{2}{\rho} + \frac{\rho}{\mu \nu^2} \right) \frac{1}{2\Theta}$
 rezgés: $1 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} k_B T \leftarrow \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$
 $E = \frac{7}{2} k_B T \rightarrow C_V = \frac{7}{2} k_B$

$n=3$ atomos lin. mol.

pl.: CO_2

$3n-5 = 4$ rezgési módus

transzl.: $3 \cdot \frac{1}{2} k_B T$
 forgás: $2 \cdot \frac{1}{2} k_B T$
 rezgés: $4 \times 2 \times \frac{1}{2} k_B T$
 $E = \frac{13}{2} k_B T$
 $C_V = \frac{13}{2} k_B$

$n=3$ atomos, nemlin. mol

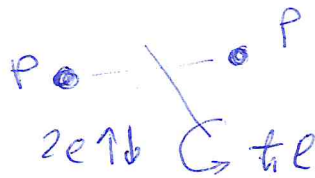
H_2O

$3n-6 = 3$ rezgési

transzl.: $3 \cdot \frac{1}{2} k_B T$
 forgás: $3 \times \frac{1}{2} k_B T$
 rezgés: $3 \times 2 \times \frac{1}{2} k_B T$
 $E = 6 k_B T \rightarrow C_V = 6 k_B$

Orthohidrogén - Parahidrogén : magspin szerepe

H₂ :



H : egy proton + egy el.

H₂ boson, azaz két H atom esetében a hullámfü. nem vált előjelet: $\psi(p_{11}e_1; p_{21}e_2) = -\psi(p_{21}e_1; p_{11}e_2) = \psi(p_{21}e_2; p_{11}e_1)$

$\psi = \underbrace{\phi_{el} \chi_{el}}_{\substack{\text{szimm.} \\ \text{anti szim}}} \underbrace{\beta_{mag} \chi_{mag}}_{\text{anti szimmetrikus}} \rightarrow \text{szimmetrikus}$

alappól.: "két pálya"
 "csatolódik".

	mag	magpálya	
Szinglet : anti szim	$\frac{ \uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ 1x deg.	szimmetrikus l = páros	parahidrogén
Triplet : szimmetrikus	$\frac{ \uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ 3x deg.	anti szimmetrikus l = páratlan	orthohidrogén

Egy állapot valószínűsége : $\frac{1}{Z} e^{-\beta E}$

Mag-szinglet valószínűsége : $P(\text{sing}) = \frac{1}{Z} \sum_{l=0,2,4} (2l+1) e^{-\epsilon(l+1) \frac{T_{rot}}{T}}$

Mag-triplett " " : $P(\text{tripl}) = \frac{1}{Z} \sum_{l=1,3,5} 3(2l+1) e^{-\epsilon(l+1) \frac{T_{rot}}{T}}$

$\Rightarrow P(\text{sing}) = \frac{Z_{\text{sing}}}{Z}$ és $P(\text{tripl}) = \frac{3Z_{\text{tripl}}}{Z}$ és Z_{tripl} triplet degeneráció

$Z = Z_{\text{sing}} + 3Z_{\text{tripl}}$

$T \gg T_{rot}$: $Z_{\text{sing}} \approx Z_{\text{tripl}} \approx \frac{Z_{\text{rot}}}{2} \Rightarrow P(\text{sing}) = \frac{1}{4}$
 $P(\text{tripl}) = \frac{3}{4}$

3:1 arányban van az orthohidrogén : parahidrogén arány.

N darab H₂ molekulából $\frac{3N}{4}$ orthohidrogén, $\frac{N}{4}$ parahidrogén.

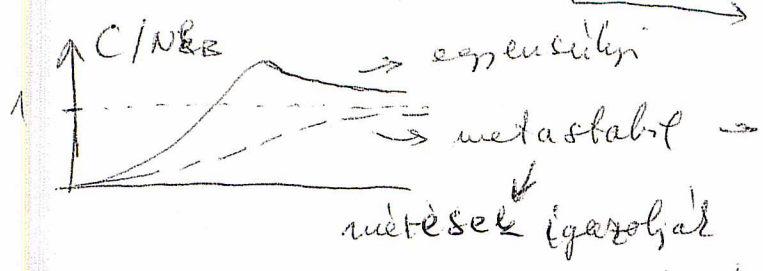
Összevetve a hőmérsékletet az egyensúlyi nem áll be, marad a 3:1 arány, annak ellenére, hogy

$$Z_{singl} \sim 1 \quad (l=0) \quad \text{és} \quad Z_{tripl} \sim 3 e^{-2 \frac{T_{rot}}{T}} \ll 1 \quad (l=1).$$

Ebben a metastabil állapotban (nem egyensúlyi állapot):

$$Z = (Z_{singl})^{1/4} \cdot (Z_{tripl})^{3/4}$$

$$C_{metastabil} = \frac{1}{4} C_{singl} + \frac{3}{4} C_{tripl} \rightarrow \text{otróhidrogén}$$



parahidrogén
A két fajta hidrogénnek nincs ideje egyúttal átalakulni, függetlenül felületükért, mert a molekulák újrateremtése a magsspin változásának vesz. kéri.

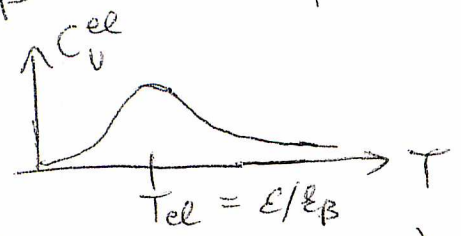
Elektronjártulé a fajhőhöz:

- $\epsilon_0 + \epsilon$, g_1 deg.
- ϵ_0 , g_0 deg.

$$Z_{el} = g_0 e^{-\beta \epsilon_0} + g_1 e^{-\beta (\epsilon_0 + \epsilon)}$$

$$\Rightarrow E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \Rightarrow C_V^{el} = \frac{\partial E}{\partial T} = \dots = N k_B \frac{g_0 g_1 (\beta \epsilon)^2 e^{\beta \epsilon}}{(g_0 + g_1 e^{\beta \epsilon})^2}$$

Tipikusán:



Legtöbbs esetben ϵ elég nagy és $g_0 = 1$.

Kivétel: O_2 és NO

O_2		NO	
ϵ_0	$g_0 = 3$	ϵ_0	$g_0 = 2$
$\epsilon_0 + \epsilon$	$g_1 = 2$	$\epsilon_0 + \epsilon$	$g_1 = 4$
$E = 0,37 \text{ eV} = 11257 \text{ K}$		$E = 15 \text{ ueV} = 174,2 \text{ K}$	

Így O_2 és NO

molekulákra az elektronokból származó fajhőjártulé nem hanyagolható el!

Kvantumstatistika, ideális kvantumgázok

A $\frac{d^3q d^3p}{N! h^3}$ "klasszikus állapotszámlálás" elvű, h^3

ha a fázistérben olyan nagy a sűrűség, hogy egy "fáziscella" több részecské kerülne.

Bosonokra \rightarrow megvárhatunk $\{$ az olyan állapot száma, amelyben
 Fermionokra \rightarrow lecsökken $\}$ több részecské kerül egy cellába.

Mikor nagy a sűrűség a fázistérben?

koordináta:
sűrű anyag

impulzus:
 $p \approx 0$ körül, alacsony hőmérsékleten

- elektronok fémekben
 - neutroncsillag
 - 3He folyadék, ...
 - csopdátott alkáli atomok
 - 4He folyadék
 - excitonok félvezetőben, ...
- } fermionok
- } bosonok

Becsles a fázistér sűrűségére:

koordinátákban elfoglalt terfogat V
 impulzusban $\sim 1 \sim p_T^3$

ahol p_T az elektronparticció átlag

$$\overline{p^2} = \frac{3k_B T}{2}$$

$\overline{p^2} \approx m^2 k_B T$, statisztikus definíció:

$$p_T = \sqrt{2\pi m k_B T}$$

A fázistérbeli cella térfogata: $\frac{V p_T^3}{h^3}$

N részecskével a fázisér-cella átlagos betöltése:

= fázisér-sűrűség:

35/6

$$\rho = \frac{N}{V p_T^3 / h^3} = \frac{h^3}{(2\pi m k_B T)^{3/2}} \cdot \frac{N}{V} \cdot T^{-3/2} \quad (\text{dimenziólan!})$$

$\rho \ll 1$: klasszikus, Maxwell-Boltzmann gáz

$\rho \geq 1$: kvantumgáz, "elfajult gáz"

Terminális de Broglie-hullámhossz:

$$\lambda_T = \frac{h}{p_T} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

$T \uparrow \lambda_T \downarrow$

Ekkor: $\rho = \frac{N}{V} \lambda_T^3 \approx \left(\frac{\lambda_T}{r_0}\right)^3$, ahol $r_0^3 = \frac{V}{N}$, r_0 átlagos részecské távolság

Klasszikus esetben:

$$\lambda_T \ll r_0$$

A részecskesűrűség
éion, a hullámhossz
elég nagy.

Elfajult hőmérséklet, T_c : $\rho \approx 1 \Rightarrow$

$$T_c \sim \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

Működés: A rendszer akkor viselkedik klasszikusan,

ha a Δp és Δr kvantummechanikai bizonytalanságra
fenntartva $\Delta p \ll p_T$ és $\Delta r \ll r_0$, mindezt

$\Delta p \Delta r \sim h$, ezért

$$p_T r_0 \gg h$$

Formálisan: $h \rightarrow 0$ limitben van a klasszikus viselkedés.

Innen $r_0 \gg \frac{h}{p_T} = \lambda_T$

Klasszikus: elég gáz (r_0 nagy) és/vagy magas hőmérséklet.

Hogy kell számolni?

36/a

Ideális kvantumgáz állapota:

egyrészecske-állapotok betöltése

$|i\rangle$ egyrészecske-állapot

ϵ_i egyrészecske-energia

n_i betöltési szám (hány részecske van az $|i\rangle$ állapotban)

Csak kölcsönhatás nélkül, ideális gátra lehet így számolni (erőleg kölcsönhatással Hartree-éköltésben).

Összenergia: $E = \sum_i n_i \epsilon_i$

Összrészecskeszám: $N = \sum_i n_i$

Átlagos betöltés: $\langle n_i \rangle = ?$

Nagykanonikus sorozatban számolás:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta(\sum_i \epsilon_i n_i - \mu \sum_i n_i)} = \sum_{n_1, n_2, \dots}^{\mu_{\max}} \prod_i e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i} =$$

összes n_i -re

összeírás

$$= \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu) n_1} e^{-\beta(\epsilon_2 - \mu) n_2} \dots = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\mu_{\max}} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i}$$

$n_i = 0, 1$, fermion, $\mu_{\max} = 1$, Pauli

$n_i = 0, 1, 2, \dots$, boson, $\mu_{\max} = \infty$ \rightarrow mértani sor

1/gy

Fermion: $\mathcal{Z} = \prod_i (1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$

Boson: $\mathcal{Z} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}}$

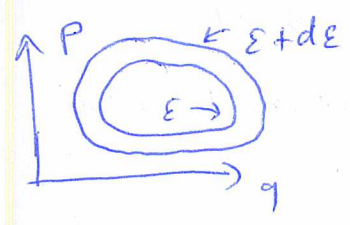
$\Rightarrow \phi = \mp \frac{1}{\beta T} \sum_i \ln(1 \pm e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)})$

Felső előjel: Fermion
Alsó előjel: Boson

Gyakorlat ϵ_i fotoelektrikus spektrum, pl. Nabadelektroon-gáz 36/6

$$\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}, \quad p: \text{a kvantum állapot } \leftarrow |i\rangle$$

Itt az a célunk bizonyítani az egyértelműség-állapotsűrűséget.
Ezt többféle módon lehet elvégezni.



$\epsilon(p) = \epsilon$ és az $\epsilon(p) = \epsilon + d\epsilon$ energia hatáiban lévő állapotok

Itt az $d\Omega_0^{(1)}(\epsilon) = g \frac{d^3 p d^3 q}{h^3}$
 ↪ spin, polarizáció
 $g = 2s + 1$

állapotsűrűség def.:

$$g(\epsilon) d\epsilon = d\Omega_0^{(1)}(\epsilon) = \frac{d^3 q d^3 p}{h^3} \underset{\substack{\text{ha } \epsilon(p) \\ \text{izotrop}}}{=} \frac{V}{h^3} 4\pi p^2 dp$$

vagy: $g(\epsilon) = \frac{d\Omega_0^{(1)}(\epsilon)}{d\epsilon}$

pl. $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$ ($d=3$ dimenzió) $\rightarrow p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = (2m\epsilon)^2$
 $\Omega_0^{(1)}(\epsilon) = g \frac{V}{h^3} \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} (2m\epsilon)^{3/2}$

$R = \sqrt{2m\epsilon}$

$$g(\epsilon) = \frac{d\Omega_0^{(1)}(\epsilon)}{d\epsilon} = A \cdot V \cdot \sqrt{\epsilon}, \quad \text{ahol } A = g \cdot 2\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$$

Másképpen: $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ és periodikus hat. felt.

$\psi(x + N_1 a, y + N_2 a, z + N_3 a) = \psi(x, y, z)$
 $\Rightarrow e^{i k_x N_1 a} = 1, \dots \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{N_1 a} n_x, n_x = 0, 1, 2, \dots, \text{ahol } k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x$

$\sum_{\mathbf{k}} 1 = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \cdot \frac{L_x L_y L_z}{N_1 a} = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \int d^3 k = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k$

$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leftarrow p = \hbar \mathbf{k}$
 $\rightarrow k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\right)^2 \rightarrow \Omega_0^{(1)}(\epsilon) = g \sum_{\mathbf{k}} 1 = g \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon} d^3 k = g \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

$\Rightarrow g(\epsilon) = \frac{d\Omega_0^{(1)}(\epsilon)}{d\epsilon} = A \cdot V \cdot \sqrt{\epsilon}, \quad A = g \cdot 2\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$
 az előzővel azonos eredmény.

legyen $\varepsilon = c|p|$

37/a

$$g(\varepsilon) d\varepsilon = g \cdot \frac{V}{h^3} d^3p = g \frac{V}{h^3} 4\pi p^2 dp = g \cdot \frac{V}{h^3} 4\pi \frac{\varepsilon^2}{c^2} \frac{d\varepsilon}{c} = g V \frac{4\pi}{(hc)^3} \varepsilon^2 d\varepsilon$$

$d\varepsilon = c dp$

$$\Rightarrow \boxed{g(\varepsilon) = A \cdot V \cdot \varepsilon^2, \quad A = g \frac{4\pi}{(hc)^3}}$$

Nehány ismert rendszere:

electron: $g=2$ ($s=\frac{1}{2}$), $g(\varepsilon) = A \cdot V \cdot \sqrt{\varepsilon}$, $A = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$

photon: $g=2$ (polarizáció): $g(\varepsilon) = A \cdot V \cdot \varepsilon^2$, $A = \frac{8\pi}{(hc)^3} = \frac{1}{v^2} \frac{1}{(hc)^3}$
 $\varepsilon = cp$

akustikus foton köbös kristályban: $\omega = c \cdot k$, $g(\varepsilon) = A V \cdot \varepsilon^2$, $A = \frac{1}{2\pi^2 h^3} \left(\frac{2}{c_t^3} + \frac{1}{c_l^3} \right)$

Vistaferme ϕ -hatás $\langle n_i \rangle$ hámitásának:

$$\phi(T, V, \mu) = -pV = \mp k_B T \sum_i \ln(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)})$$

$$\Rightarrow N = -\left. \frac{\partial \phi}{\partial \mu} \right|_{T, V} = \pm k_B T \cdot \sum_i \frac{1}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}} \cdot (\pm 1) e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \cdot \beta = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1}$$

$$N = \sum_i \langle n_i \rangle \Rightarrow \boxed{\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1}}$$

felső: Fermi-Dirac
 alsó: Bose-Einstein

Fermi-Dirac

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$$

Bose-Einstein

$$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1}$$

az ε energiájú egyrészecske-állapot átlagos betöltése.

Folytonos ϵ spektrumra:

346

$$\phi(T, V, \mu) = \mp \frac{1}{\beta T} \int_0^{\infty} g(\epsilon) d\epsilon \ln(1 \pm e^{-\beta(\epsilon - \mu)})$$

$$N = \int_0^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon \quad E = \int_0^{\infty} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon f(\epsilon, \mu, T)$$

↓
Elevél baktatókát
meg $\mu(T, V, N)$

$E(T, V, N)$ ←

Kvantumstatistika klasszikus határesetek:

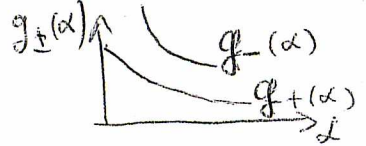
$$f_{FD/BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} \pm 1} \xrightarrow{T \text{ nagy}} ?$$

Teljesítés N szedhető, $\epsilon = p^2/2m$

$$\frac{1}{r_0^3} = \frac{N}{V} = A \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} f(\epsilon) d\epsilon = A \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} \pm 1} = A \left(\frac{1}{\beta T}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^{x - \alpha} \pm 1}$$

$x = \beta\epsilon, \alpha = \beta\mu$

$g_{\pm}(\alpha)$ monoton csökkenő fu. α -ra



$g_{\pm}(\alpha)$

$$\frac{\sqrt{V}}{4} \left(\frac{\lambda_T}{r_0}\right)^3 = g_{\pm}(\alpha), \text{ de klasszikus hat. esetben } \lambda_T \ll r_0$$

$$g_{\pm}(\alpha) \ll 1 \Rightarrow \alpha \gg 1 \Rightarrow \frac{-\mu}{\beta T} \gg 1$$

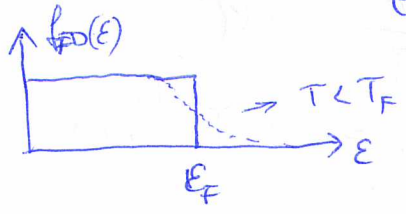
azaz klasszikus hat. esetben mu nagy negatív szám!

$$f_{FD/BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} \pm 1} \approx e^{-\frac{\epsilon - \mu}{\beta T}} = C e^{-\frac{\epsilon}{\beta T}} \ll 1 \text{ Boltzmann-statisztika}$$

Magas hőmérsékletű sűrűség: $f(\epsilon)$ sorfejtése $e^{\beta\mu} \ll 1$ miatt.
Kvantumkorrekció a klasszikus eredményre.
Lásd a gyakorlatot!

Fermion:

$$f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$



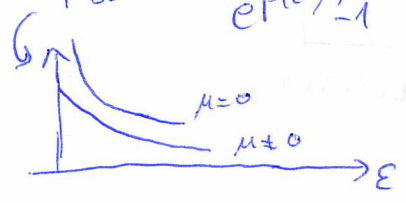
látva fogjuk, hogy
 $T \ll T_F \rightarrow \mu > 0$

$$\epsilon_{BT} = \epsilon_F$$

$T > T_F \rightarrow$ Boltzmann-elvétel

Boson:

$$f_{BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} > 0 \Rightarrow \mu \leq 0 \quad \forall T, n.$$



Altalános összefüggés:

Legeen $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$, $\rho(\epsilon) = AV\sqrt{\epsilon}$

$$A = g \cdot 2\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$\Phi = \mp \epsilon_{BT} AV \int_0^\infty \sqrt{\epsilon} \ln(1 \pm e^{-\beta(\epsilon-\mu)}) d\epsilon$$

$\Rightarrow E = \int \epsilon \rho(\epsilon) f_{\pm}(\epsilon) d\epsilon$, $f_{\pm}(\epsilon) \equiv f_{BE}^{(\pm)}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} \pm 1}$

parc. int.

$$\Phi = \mp \epsilon_{BT} AV \left\{ \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{3/2} \ln(1 \pm e^{-\beta(\epsilon-\mu)}) d\epsilon - \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{3/2} (\mp \beta) \frac{e^{-\beta(\epsilon-\mu)}}{1 \pm e^{-\beta(\epsilon-\mu)}} d\epsilon \right\}$$

$$= -\frac{2}{3} AV \int_0^\infty \epsilon^{3/2} f_{\pm}(\epsilon) d\epsilon = -\frac{2}{3} \int_0^\infty \epsilon \rho(\epsilon) f_{\pm}(\epsilon) d\epsilon = -\frac{2}{3} E$$

$$\Rightarrow \boxed{\Phi = -pV = -\frac{2}{3} E}$$

$$\Rightarrow \boxed{pV = \frac{2}{3} E}$$

(gáz
fermionra/
bosóra)

Adiabata:

$$\Phi = \mp \epsilon_{BT} AV \int_0^\infty \sqrt{\epsilon} \ln(1 \pm e^{-\beta(\epsilon-\mu)}) d\epsilon \quad x = \beta\epsilon$$

$$= \mp AV (\epsilon_{BT})^{5/2} g_{\pm}\left(\frac{\mu}{T}\right), \text{ ahol } g_{\pm}\left(\frac{\mu}{T}\right) = \int_0^\infty \sqrt{x} \ln(1 \pm e^{-x + \beta\mu}) dx$$

$$\Rightarrow S = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} \Big|_{V, \mu} = \pm AV \epsilon_B^2 \left[\frac{5}{2} T^{3/2} g_{\pm}\left(\frac{\mu}{T}\right) + T^{5/2} \cdot g'_{\pm}\left(\frac{\mu}{T}\right) \cdot \frac{-\mu}{T^2} \right] = VT^{3/2} \varphi\left(\frac{\mu}{T}\right)$$

$$\Rightarrow N = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \Big|_{T, V} = \mp AV (\epsilon_{BT})^{5/2} g'_{\pm}\left(\frac{\mu}{T}\right) \cdot \frac{1}{T} = V \cdot T^{3/2} \tilde{\varphi}\left(\frac{\mu}{T}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{S}{N} = \frac{\varphi\left(\frac{\mu}{T}\right)}{\tilde{\varphi}\left(\frac{\mu}{T}\right)}$$

Adiabaticus folyamatra
 $S = \text{állandó}$ és $N = \text{rögzített}$

38/b

$$\Longleftrightarrow \frac{\mu}{T} = \text{állandó}$$

$$\Rightarrow \frac{N}{VT^{3/2}} = \text{állandó} \quad \& \quad \phi = -pV = V \cdot T^{5/2} \cdot \text{állandó} \Rightarrow \frac{p}{T^{5/2}} = \text{állandó}$$

és

$$\boxed{pV^{5/3} = \text{állandó}}$$

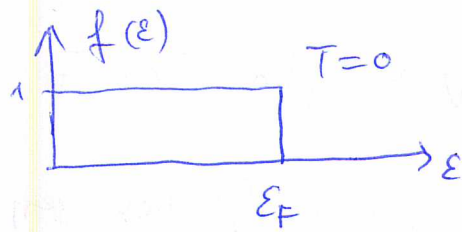
igaz fermionra/boszonra

$$\text{Nem } pV^{c_p/c_v} = \text{állandó!}$$

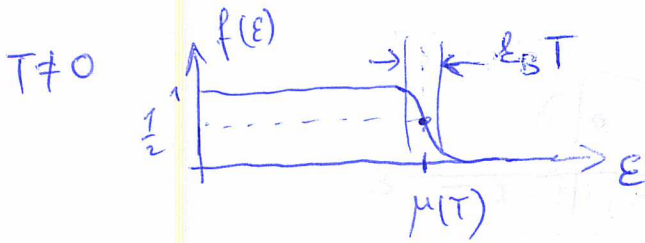
$$c_p/c_v \neq 5/3 !!!$$

Fermion (elektronen):

39/a



$$f(\epsilon) \equiv f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$



$\epsilon = \mu - \tau e$ $f(\epsilon = \mu) = \frac{1}{2}$
 μ hängt T -föhl!

$$N = \int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad \text{röhtiti } \mu\text{-t!}$$

$T=0$ eret:

$$E(F) = \frac{p^2}{2m}, \quad g(\epsilon) = A \cdot V \cdot \sqrt{\epsilon}, \quad A = g \cdot 2\pi \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad g=2$$

$$N = \int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\epsilon_F} A \cdot V \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{2}{3} A \cdot V \epsilon_F^{3/2}$$

$$\Rightarrow \epsilon_F = \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{A} \right)^{2/3} = \left[\frac{3}{2} \frac{N}{V} 2\pi^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} \right]^{2/3}$$

$$\Rightarrow \boxed{\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}}$$

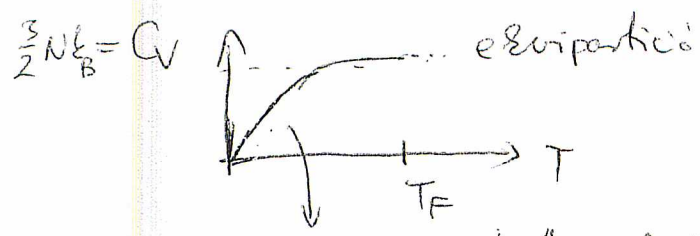
elektronok fozelben: $\frac{N}{V} \sim (0.8-8) \cdot 10^{28} \frac{1}{m^3}$

$$\epsilon_F \sim 5 \cdot 10^{-19} \text{ J} \Rightarrow T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} \sim 30000 \text{ K!}$$

Meqjia 1) $T = T_F$ -re $\frac{N}{V} \lambda_T^3 = 1.5$

$$2) g(\epsilon_F) = A \cdot V \sqrt{\epsilon_F} = A \cdot V \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{A} \right)^{1/3} = \frac{3}{2} N \underbrace{\left(\frac{2}{3} A \frac{V}{N} \right)^{2/3}}_{1/\epsilon_F} = \underline{\underline{\frac{3}{2} N \frac{1}{\epsilon_F}}}$$

Fermigát fajhője, becsle's:

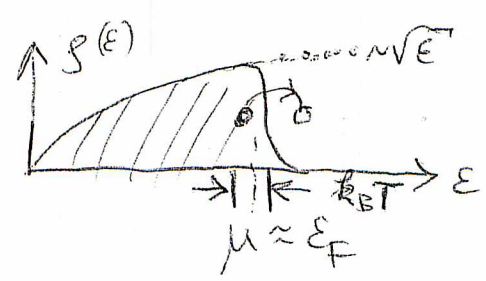


$C_V \sim T$, ha $T \ll T_F$

"Eifagyás": A Fermi-tengers mélye nem gerjedhet!

Elemi levezetés:

Ural betöltöttből
üres egyrétekesde-állapotba
lehet gerjedtemi.



A gerjedhető fermionok számán $g(E_F) \epsilon_B T$

$\Rightarrow E(T) = E_0 + \underbrace{g(E_F) \epsilon_B T}_{\rightarrow 0, \text{ ha } T \rightarrow 0 \text{ Eifagyás}} \cdot \epsilon_B T = E_0 + g(E_F) \epsilon_B^2 T^2$

$C_V(T) = \frac{dE}{dT} \Big|_V = \epsilon_B \cdot \underbrace{2 g(E_F) \epsilon_B T}_{\frac{3}{2} N \frac{1}{\epsilon_F}} = \frac{3}{2} N \epsilon_B \cdot \frac{2 \epsilon_B T}{\epsilon_F}$

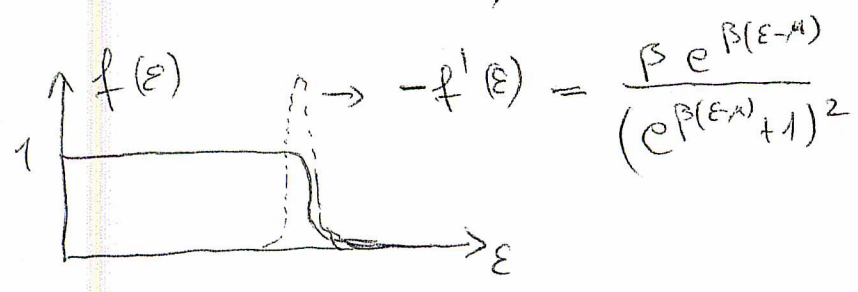
pontos: $\pi^2/3$
lásd részlebb

Ami zavaradt:

$\mu(T)$ hőmérsékétfüggése $\mu(T) < \mu(T=0) = \epsilon_F$ csökken, ha $T \downarrow$

Sommerfeld sorfejtés, pontosabb számolás:

$N = \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE$ és $E = \int \epsilon g(E) d\epsilon f(E)$
 $\hookrightarrow \mu(T)$ \uparrow



Typischerweise $I = \int_0^\infty \varphi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$ als
 unendliche Summe \rightarrow Sinus f.v.
 integriert werden kann.

$$I = \int_0^\infty \varphi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \left[H(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon) \right]_0^\infty - \int_0^\infty H(\varepsilon) \cdot f'(\varepsilon) d\varepsilon$$

part. int.

woher $H(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \varphi(\varepsilon') d\varepsilon'$

$H(\varepsilon=0) = 0$
 $f(\varepsilon \rightarrow \infty) = 0$ } a Riemann-integrierbar sein muss.

$$I = - \int_0^\infty H(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon \approx - \int_{-\infty}^\infty H(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon =$$

bald \rightarrow

$$= \int_{-\infty}^\infty H(\varepsilon) \cdot \frac{\beta e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1)^2} d\varepsilon$$

$H(\varepsilon)$ Sinus f.v. $\therefore H(\varepsilon) \approx H(\mu) + H'(\mu)(\varepsilon-\mu) + \frac{1}{2} H''(\mu)(\varepsilon-\mu)^2 + \dots$

$$\Rightarrow I = \int_{-\infty}^\infty \varphi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = H(\mu) \int_{-\infty}^\infty f'(\varepsilon) d\varepsilon + H'(\mu) \int_{-\infty}^\infty (\varepsilon-\mu) f'(\varepsilon) d\varepsilon +$$

$\underbrace{\int_{-\infty}^\infty f'(\varepsilon) d\varepsilon}_{=1}$ $\underbrace{\int_{-\infty}^\infty (\varepsilon-\mu) f'(\varepsilon) d\varepsilon}_{=0}$

$$+ \frac{1}{2} H''(\mu) \int_{-\infty}^\infty (\varepsilon-\mu)^2 f'(\varepsilon) d\varepsilon =$$

$\underbrace{\int_{-\infty}^\infty (\varepsilon-\mu)^2 f'(\varepsilon) d\varepsilon}_{\text{erst Teil integrieren}}$

$$= \int_0^\mu \varphi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{1}{2} \varphi'(\mu) (k_B T)^2 \int_{-\infty}^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx = \int_0^\mu \varphi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \varphi'(\mu)$$

$\underbrace{\int_{-\infty}^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx}_{\pi^2/3}$

1/44

$$\int_0^\infty \varphi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\mu \varphi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \varphi'(\mu) + \dots$$

Al-Ealmanasor:

$$\varepsilon(E) = \frac{p^2}{2m}, \quad \rho(E) = A \cdot V \cdot \sqrt{E}$$

$$A = g \cdot 2\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2}$$

40/6

$$N = \int_0^\infty \rho(E) f(E) dE = AV \int_0^\infty \sqrt{E} f(E) dE \stackrel{S\text{-form}}{=} AV \left\{ \int_0^\mu \sqrt{E} dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{1}{2\sqrt{\mu}} \right\} =$$

$$= AV \left\{ \int_0^{\varepsilon_F} \sqrt{E} dE + (\mu - \varepsilon_F) \sqrt{\varepsilon_F} + \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_F}} \right\} =$$

\uparrow \uparrow $\downarrow \mu \approx \varepsilon_F$ it
 $= N$ \uparrow Taylor

$$= N + \left\{ (\mu - \varepsilon_F) \sqrt{\varepsilon_F} + \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_F}} \right\} AV \Rightarrow$$

$$0 = (\mu - \varepsilon_F) \sqrt{\varepsilon_F} + \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_F}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 \frac{1}{\varepsilon_F} = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]}$$

$$E = \int_0^\infty \varepsilon \rho(E) f(E) dE = AV \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} f(E) dE \stackrel{S}{=} AV \left\{ \int_0^\mu \varepsilon^{3/2} d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \cdot \frac{3}{2} \sqrt{\mu} \right\}$$

$$= AV \left\{ \frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} (k_B T)^2 \sqrt{\mu} \right\} \approx AV \cdot \frac{2}{5} \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] (*)$$

beirwa $\mu(T)$

$$= AV \cdot \frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] =$$

$$= AV \cdot \frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} \left[1 - \frac{5\pi^2}{24} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] = AV \cdot \frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$$

$$T=0 \quad N = \int_0^{\varepsilon_F} \rho(E) dE = AV \cdot \int_0^{\varepsilon_F} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} AV \varepsilon_F^{3/2} \Rightarrow E = E_0 + \frac{\pi^2}{4} \frac{k_B^2 T^2}{\varepsilon_F}$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{k_B T}{\varepsilon_F} = \frac{\pi^2}{3} k_B \rho(\varepsilon_F) k_B T \sim T!$$

Elektrongáz állapotegyenlete (degenerált eset)

(41/a)

$$pV = \frac{2}{3} E = \frac{2}{5} N E_F \left[1 + \frac{5\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$$

↑
előző oldal alapján

$$\Rightarrow \boxed{pV = \frac{2}{5} N E_F \left[1 + \frac{5\bar{u}^2}{12} \frac{(k_B T)^2}{E_F^2} \right]}$$

ihátol

$E_F = \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{A} \right)^{2/3}$ és $A = g \cdot 2\bar{u} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2}$, $g=2$
 Fontos! függ N, V -től!
 $T=0$ -nál is van nyomás! Csillagor egyensúlyával fontos!

Entropia: $\phi = -pV = -\frac{2}{3} E$, $d\phi = -SdT - pdV - Nd\mu$
 $S = -\frac{\partial \phi}{\partial T} \Big|_{V, \mu} = \frac{2}{3} \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_{V, \mu}$ (**) Most az $E(T, \mu)$ alakot érdemes használni.

Lásd az előző oldalról \otimes egyenletet:
 $E = A \cdot V \cdot \frac{2}{5} \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\bar{u}^2}{8} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$

$$\Rightarrow S = \frac{2}{3} A \cdot V \cdot \frac{2}{5} \underset{\mu \approx E_F}{E_F}^{5/2} \cdot \frac{5\bar{u}^2}{8} \cdot 2 \frac{T}{T_F} = \frac{\bar{u}^2}{3} A \cdot V \cdot E_F^{5/2} \frac{T}{T_F}$$

felhasználva: $E_F = \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{A} \right)^{2/3} \Rightarrow \boxed{S = \frac{\bar{u}^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F}}$ $S \Big|_{T=0} = 0$

Fajhő: $C_V = T \cdot \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{V, N} = \frac{\bar{u}^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F}$

Hőtágulás: $\alpha = \frac{1}{V} \cdot \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_{p, N}$ Az állapotegyenletből számolható! (lásd lent!).

Az állapotegyenlet mindkét oldalát deriváljuk T -szerint, figyelembe véve, hogy E_F is függ V -u kerestül T -től rögzített p, N mellett.

$$\Rightarrow p \cdot \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_{p, N} = \frac{2}{5} N \left[\frac{\partial E_F}{\partial T} \Big|_{p, N} + \frac{5\bar{u}^2}{12} \frac{2 k_B^2 T E_F - (k_B T)^2 \frac{\partial E_F}{\partial T} \Big|_{p, N}}{E_F^2} \right]$$

$$P \cdot \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_{P,N} = \frac{2}{5} N \left[1 - \frac{5\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \frac{\partial \mathcal{E}_F}{\partial T} \Big|_{P,N} + \frac{\bar{u}^2}{3} \frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} N \quad \boxed{41/6}$$

$$\left. \begin{aligned} \text{de } \frac{\partial \mathcal{E}_F}{\partial T} \Big|_{P,N} &= \frac{2}{3} \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{A} \right)^{-1/3} \frac{3}{2} \frac{N}{A} \frac{-1}{V^2} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_{P,N} = \\ &= \mathcal{E}_F^{-1/2} \frac{2}{3} \mathcal{E}_F^{3/2} \frac{-1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_{P,N} = -\frac{2}{3} \mathcal{E}_F \cdot \alpha \end{aligned} \right\}$$

$$\frac{2}{5} N \mathcal{E}_F \left[1 + \frac{5\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \alpha = \frac{2}{5} N \left[1 - \frac{5\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \left(\frac{2}{3} \mathcal{E}_F \alpha \right) + \frac{\bar{u}^2 k_B T}{\mathcal{E}_F} N$$

$$\Rightarrow \frac{2}{5} N \mathcal{E}_F \left[1 + \frac{\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \alpha = \frac{\bar{u}^2}{3} \frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} N$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha = \frac{\bar{u}^2}{2} \frac{T}{T_F^2} \left[1 - \frac{\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]}$$

Cp fajlo: $H = E + pU = \frac{5}{3} E$, $dH = Tds + Vdp + \mu dn$

$$C_p = T \cdot \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{P,N} = \frac{\partial H}{\partial T} \Big|_{P,N} = \frac{5}{3} \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_{P,N} \uparrow \frac{5 \cdot 3}{3 \cdot 2} P \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_{P,N} = \frac{5}{2} P V \cdot \alpha$$

$pU = \frac{2}{3} E$

$$= \frac{5}{2} \frac{2}{5} N \mathcal{E}_F \left[1 + \frac{5\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \cdot \frac{\bar{u}^2}{2} \frac{T}{T_F^2} \left[1 - \frac{\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{C_p = \frac{\bar{u}^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} \left[1 + \frac{\bar{u}^2}{3} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]}$$

$$\Rightarrow \boxed{\gamma = \frac{C_p}{C_v} = 1 + \frac{\bar{u}^2}{3} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2}$$

Kompressibilitás: $\kappa_T = -\frac{1}{V} \cdot \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N}$

Most p -benint kell deriválni az állapotegyenletet és oldani.

$$\Rightarrow V + P \cdot \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N} = \frac{2}{5} N \left[\frac{\partial \mathcal{E}_F}{\partial P} \Big|_{T,N} - \frac{5\bar{u}^2}{12} \frac{(k_B T)^2}{\mathcal{E}_F^2} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}_F}{\partial P} \Big|_{T,N} \right] =$$

$$= \frac{2}{5} N \left[1 - \frac{5\bar{u}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \cdot \frac{\partial \mathcal{E}_F}{\partial P} \Big|_{T,N}$$

$$de \quad \frac{\partial \epsilon_F}{\partial P} \Big|_{T,N} = \frac{2}{3} \left(\frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{A} \right)^{-1/3} \frac{3}{2} \frac{N}{A} \cdot \frac{-1}{V^2} \cdot \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N} =$$

$$= \epsilon_F^{-1/2} \cdot \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2} \cdot \left(-\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N} \right) = \frac{2}{3} \epsilon_F \kappa_T$$

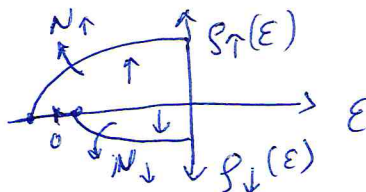
41/c

$$\log y \quad V + \frac{2}{5} N \epsilon_F \left[1 + \frac{5 \bar{v}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \cdot \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N} = \frac{2}{5} N \left[1 - \frac{5 \bar{v}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] \cdot \frac{2}{3} \epsilon_F \kappa_T$$

$$\Rightarrow \boxed{\kappa_T} = \frac{V}{\frac{2}{3} N \epsilon_F + \frac{\bar{v}^2}{18} N \epsilon_F \left(\frac{T}{T_F} \right)^2} = \boxed{\frac{3}{2} \frac{V/N}{\epsilon_F} \left[1 - \frac{\bar{v}^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]}$$

Lásd: Kubo: Stat. Mech.
4. fejelet, 9. feladat, 282. old.
Van egy elvárt a zsinusbe

Pauli spin-suszeptibilitás:



$$\underline{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}, \underline{M} = g_e \mu_B \cdot \frac{\underline{S}}{\hbar}, g_e = -2.0023119$$

$$\underline{S} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}, \hat{H} = \underline{\mu} \underline{B} = g_e \mu_B \frac{\underline{S}}{\hbar} \underline{B} = -\mu_B B \cdot \sigma_z \rightarrow \epsilon(\uparrow, \sigma_z) = \frac{p^2}{2m} - \mu_B B \sigma_z$$

$$T=0: N = A \cdot V \cdot \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2}, \quad \epsilon(\uparrow) = \frac{p^2}{2m} - \mu_B B \quad \text{és} \quad \epsilon(\downarrow) = \frac{p^2}{2m} + \mu_B B$$

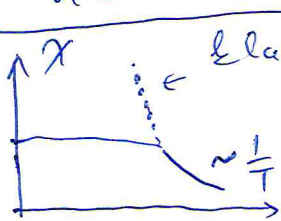
$$\Rightarrow N_{\uparrow} = A V \frac{2}{3} (\mu + \mu_B B)^{3/2} \frac{1}{2} \quad \text{és} \quad N_{\downarrow} = A V \frac{2}{3} (\mu - \mu_B B)^{3/2} \frac{1}{2}$$

Magneseszf sđg: $M = \mu_B (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) = \mu_B \left[\int_0^{\infty} \frac{\epsilon(\epsilon + \mu_B B)}{2} f(\epsilon) d\epsilon - \int_0^{\infty} \frac{\epsilon(\epsilon - \mu_B B)}{2} f(\epsilon) d\epsilon \right]$

linearitáshoz
 $\approx \mu_B^2 B \int_0^{\infty} \epsilon'(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \frac{\mu_B^2 B}{2} A \cdot V \cdot \int_0^{\infty} \epsilon^{-1/2} f(\epsilon) d\epsilon = B \cdot S$

$$= \dots = \frac{\mu_B^2 B \cdot A \cdot V}{2} \left[2 \sqrt{\mu} - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\epsilon_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \sqrt{\epsilon_F} \right] = \dots = \frac{3}{2} \mu_B^2 B \frac{N}{\epsilon_F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]$$

$$\boxed{\chi = \frac{dM}{dB} = \chi_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]}, \text{ ahol } \chi_0 = \frac{3}{2} \mu_B^2 \frac{N}{\epsilon_F}$$



elastikus, T nagy

Magas hőmérséklet:

$$M = \mu_B \int_0^{\infty} \frac{\epsilon(\epsilon)}{2} [f(\epsilon - \mu_B B) - f(\epsilon + \mu_B B)] d\epsilon$$

$$\Rightarrow \chi = \frac{dM}{dB} = -\mu_B^2 \int_0^{\infty} \epsilon(\epsilon) \frac{df}{d\epsilon} d\epsilon, \text{ de } \frac{df}{d\epsilon} \approx -\beta e^{-\beta(\epsilon - \mu)}, \text{ ha } T \gg T_F$$

$$\Rightarrow \chi = N \mu_B^2 \frac{1}{\epsilon_B T} \rightarrow \text{Curie-tör. } e^{\beta \mu} \ll 1$$

$$N \approx \int_0^{\infty} A V \cdot \sqrt{\epsilon} e^{-\beta(\epsilon - \mu)} d\epsilon$$

↑ $f(\epsilon)$ magas hőm. sorfejtése

41/d1

Az ideális Fermi-gáz termodinamikai mennyiségei

Kiegészítés III. éves BsC fizikusok számára

Cserti József
Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2017. március

1. Néhány alapvető formula

1.1. Fermi-Dirac integrál:

$$f_s(z) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1} dx}{\frac{1}{z} e^x + 1}, \quad (1)$$

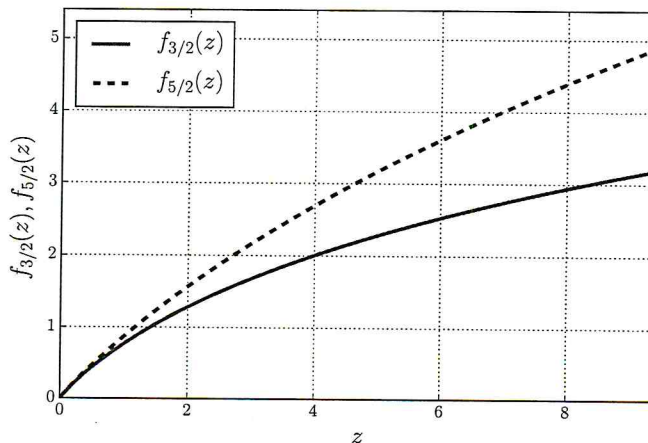
$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s}. \quad (2)$$

A $f_s(z)$ függvényt az irodalomban ismert polylogaritmus függvénnyel kifejezhetjük (Polylogarithm function):

$$f_s(z) = -Li_s(-z), \quad \text{ahol} \quad (3)$$

$$Li_s(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^s} = z + \frac{z^2}{2^s} + \frac{z^3}{3^s} + \dots \quad (4)$$

1.2. A $f_s(z)$ függvény:



1. ábra. A $f_s(z)$ függvények.

41/d2

2. Termodinamikai mennyiségek hőmérsékletfüggése

Az alábbiakban az N részecskeszám rögzített. A számolások részletei hasonlóak, mint amelyeket a Bose-gázra végeztünk az előadás jegyzetben az Appendix A-ban. A továbbiakban szükségünk lesz a hőmérséklet és a kémiai potenciál kapcsolatára:

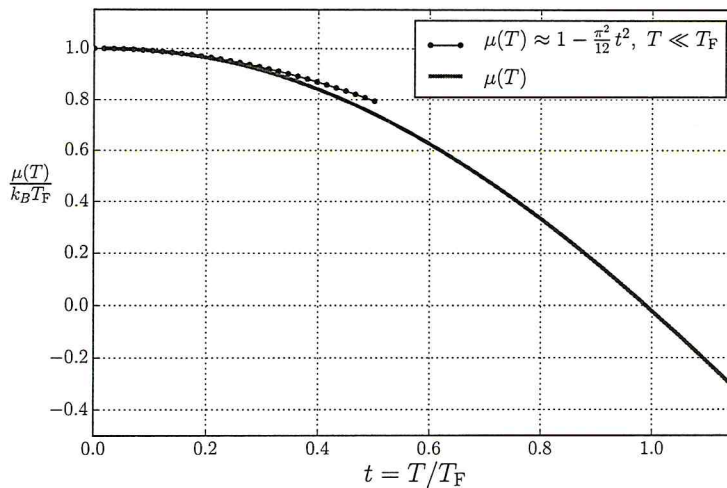
$$\frac{T}{T_F} = \left(\frac{2/3}{\Gamma(3/2)f_{3/2}(z)} \right)^{2/3}, \text{ ahol } z = e^{\beta\mu} \text{ és } 0 \leq z \leq \infty. \quad (5)$$

2.1. A kémiai potenciál hőmérsékletfüggése:

$$\frac{\mu}{k_B T_F} = \frac{T}{T_F} \ln(z), \quad (6)$$

$$\mu_{\text{köz}} \approx E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \text{ ha } T \ll T_F, \quad (7)$$

ahol $E_F = k_B T_F$ a Fermi-energia.

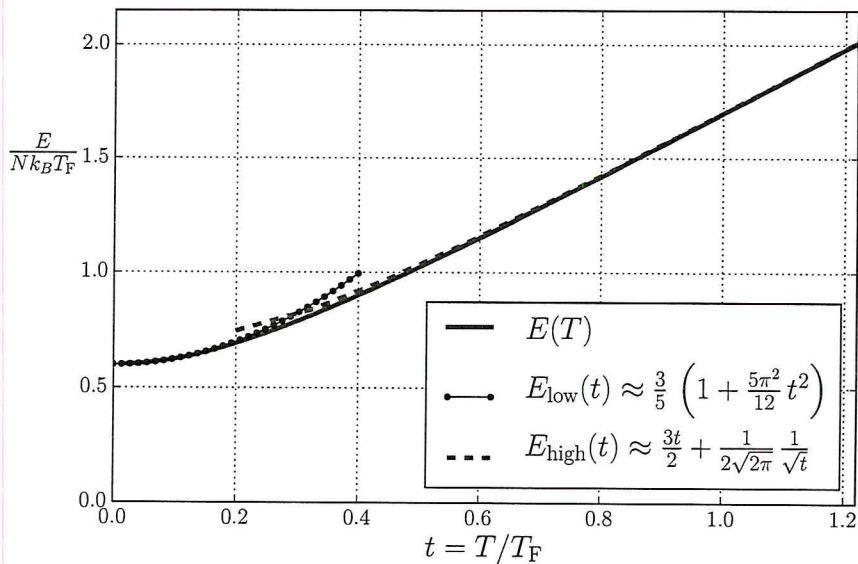


2. ábra. A kémiai potenciál hőmérsékletfüggése.

2.2. Az energia hőmérsékletfüggése:

$$E(T) = \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} = \frac{3}{2} N k_B T_F \frac{T}{T_F} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}, \quad (8)$$

$$E_{\text{köz}} \approx \frac{3}{5} E_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \text{ ha } T \ll T_F. \quad (9)$$



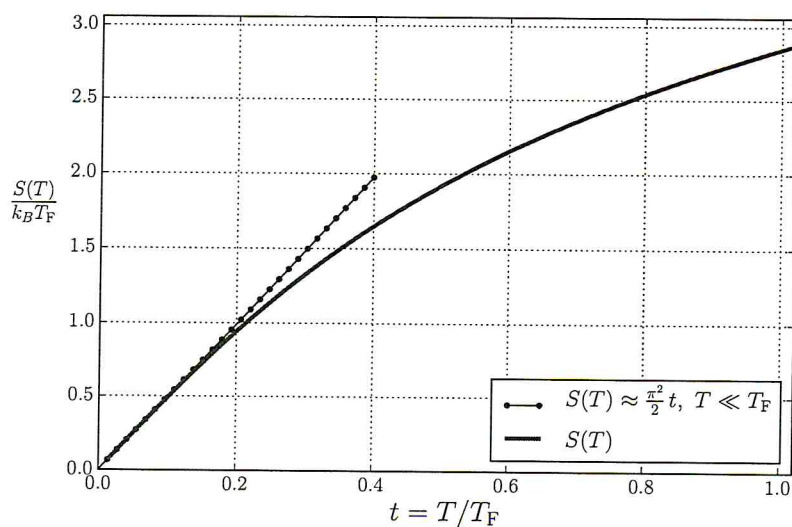
3. ábra. Az energia hőmérsékletfüggése.

2.3. Az entrópia hőmérsékletfüggése:

$$S = \frac{E+pV-\mu N}{T} = \frac{5}{3} \frac{E}{T} - Nk_B \ln z, \text{ innen kapjuk}$$

$$\frac{S(T)}{Nk_B} = \frac{5}{2} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \ln(z), \tag{10}$$

$$\frac{S_{\text{köz}}}{Nk_B} \approx \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F}, \text{ ha } T \ll T_F. \tag{11}$$

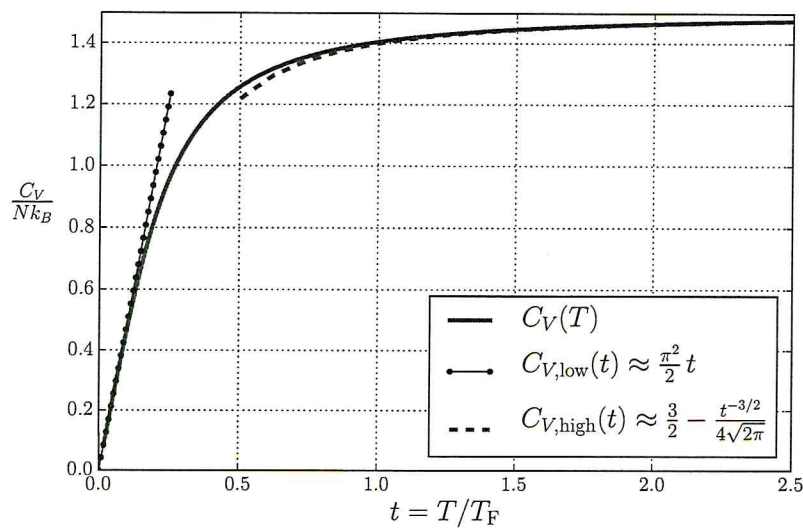


4. ábra. Az entrópia hőmérsékletfüggése.

2.4. Állandó térfogaton vett fajhő hőmérsékletfüggése:

$$\frac{C_V(T)}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)}, \quad (12)$$

$$C_V(T) \approx \frac{\pi^2}{2} Nk_B \frac{T}{T_F}, \quad \text{ha } T \ll T_F. \quad (13)$$



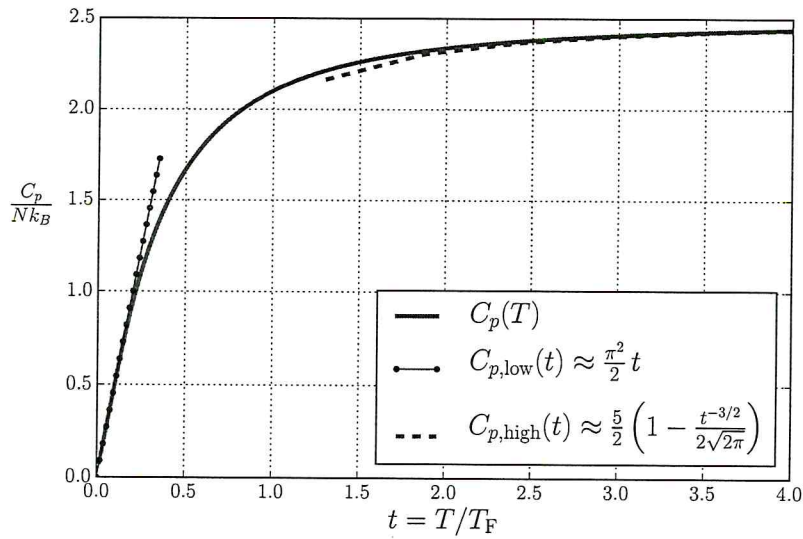
5. ábra. Állandó térfogaton vett fajhő hőmérsékletfüggése.

2.5. Az állandó nyomáson vett fajhő hőmérsékletfüggése:

$$\frac{C_p(T)}{Nk_B} = \frac{25}{4} \frac{[f_{5/2}(z)]^2 f_{1/2}(z)}{[f_{3/2}(z)]^3} - \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}, \quad (14)$$

$$C_p(T) \approx \frac{\pi^2}{2} Nk_B \frac{T}{T_F} \left[1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \quad \text{ha } T \ll T_F. \quad (15)$$

[41/d5]

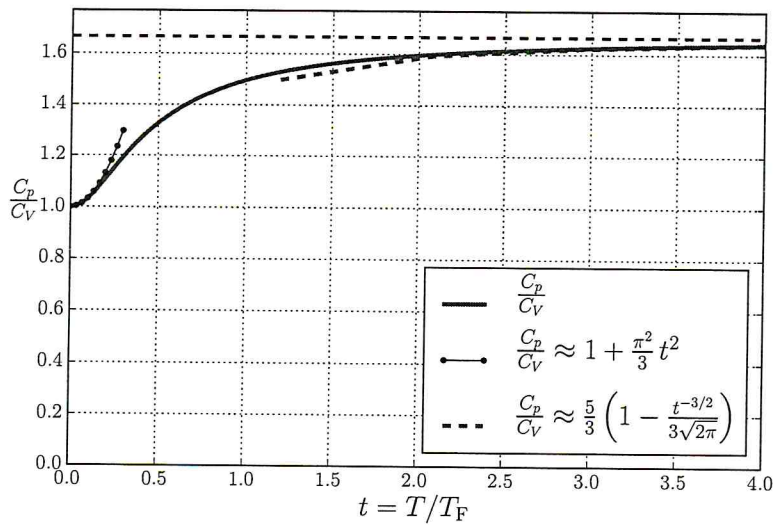


6. ábra. Állandó nyomáson vett fajhő hőmérsékletfüggése.

2.6. $\frac{C_p}{C_V}$ hőmérsékletfüggése:

$$\frac{C_p}{C_V} = \frac{5}{3} \frac{f_{5/2}(z)f_{1/2}(z)}{[f_{3/2}(z)]^2}, \quad (16)$$

$$\frac{C_p}{C_V} \approx 1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{T}{T_F}\right)^2, \text{ ha } T \ll T_F. \quad (17)$$



7. ábra. $\frac{C_p}{C_V}$ hőmérsékletfüggése.

41/d6

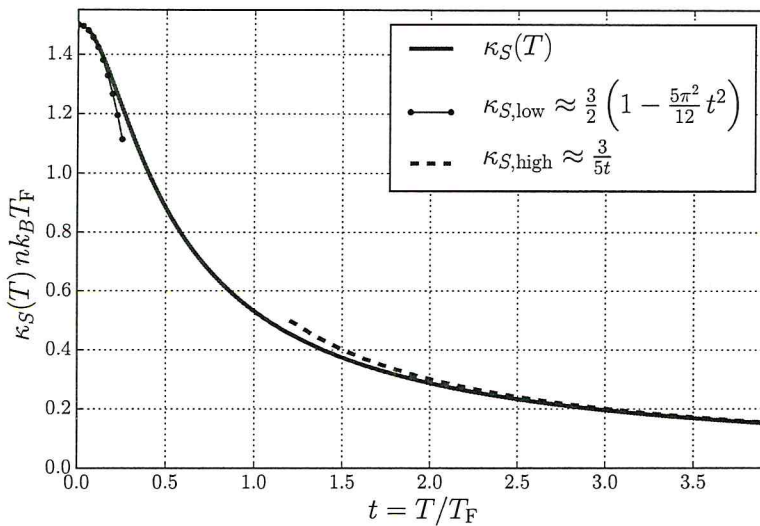
2.7. Adiabatikus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése:

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{S,N},$$

$$\kappa_S(T) = \frac{1}{nk_B T_F} \frac{3f_{3/2}(z)}{5f_{5/2}(z)} \left(\frac{T}{T_F} \right)^{-1} \quad (18)$$

$$\kappa_S(T) \approx \frac{3}{2nk_B T_F} \left[1 - \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \text{ ha } T \ll T_F. \quad (19)$$

ahol $n = N/V$.



8. ábra. Adiabatikus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése.

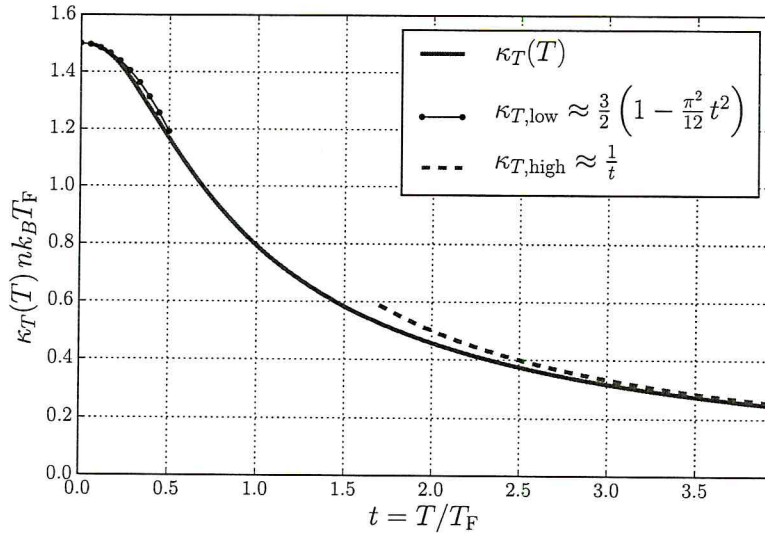
2.8. Izotermikus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése:

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{T,N},$$

$$\kappa_T(T) = \frac{1}{nk_B T_F} \frac{f_{1/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \left(\frac{T}{T_F} \right)^{-1} \quad (20)$$

$$\kappa_T(T) \approx \frac{3}{2nk_B T_F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \text{ ha } T \ll T_F. \quad (21)$$

ahol $n = N/V$.



9. ábra. Izotermikus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése.

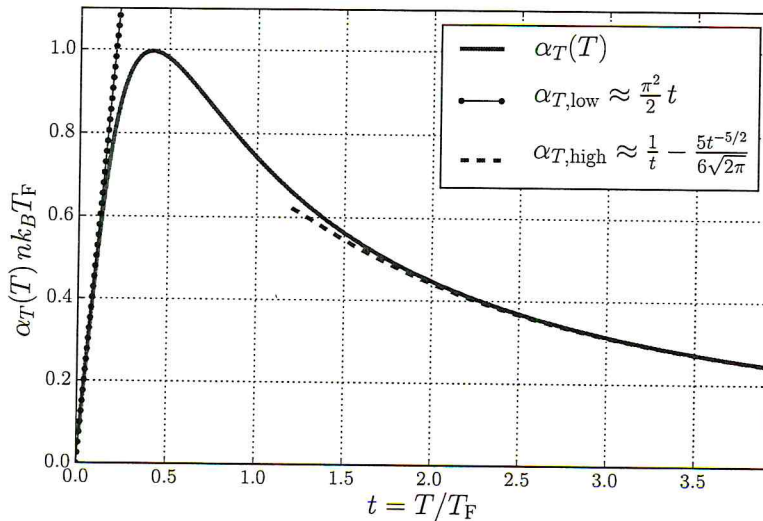
2.9. Hőtágulási együttható hőmérsékletfüggése:

$$\alpha_T = \frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial T} \right|_{p,N}$$

$$\alpha_T(T) = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{2} \frac{f_{5/2}(z) f_{1/2}(z)}{[f_{3/2}(z)]^2} - \frac{3}{2} \right), \tag{22}$$

$$\alpha_T(T) T_F \approx \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \text{ ha } T \ll T_F. \tag{23}$$

Magashőmérsékleti közelítésben $\alpha_T^{\text{klassz}}(T) = 1/T$.



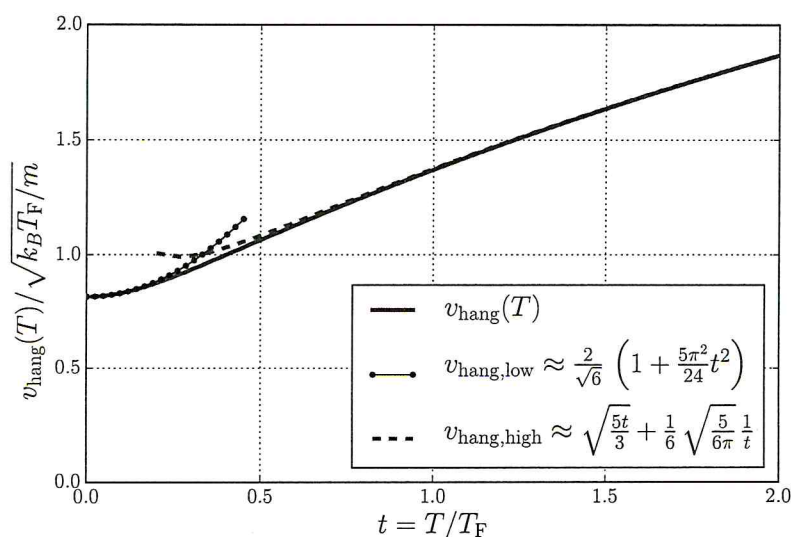
10. ábra. Hőtágulási együttható hőmérsékletfüggése.

2.10. Hangsebesség hőmérsékletfüggése:

$$v_{\text{hang}}(T) = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \varrho} \right|_{S,N}} = \sqrt{\frac{V}{mN} \frac{1}{\kappa_S}}, \text{ ahol } \varrho = mN/V \text{ a tömegsűrűség.}$$

$$\frac{v_{\text{hang}}(T)}{\sqrt{\frac{k_B T_F}{m}}} = \sqrt{\frac{5f_{5/2}(z) T}{3f_{3/2}(z) T_F}}, \quad (24)$$

$$\frac{v_{\text{hang}}(T)}{\sqrt{\frac{k_B T_F}{m}}} \approx \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \text{ ha } T \ll T_F. \quad (25)$$



11. ábra. Hangsebesség hőmérsékletfüggése.

3. Irodalom:

1. R. K. Pathria: Statistical Mechanics, 2nd Edition, 1996, Bunerworth-Heinemann Linacre House
2. Linda E. Reichl: A Modern Course in Statistical Physics 2nd Edition, 1998, Wiley-VCH
3. Franz Schwabl: Statistical Mechanics, 2000, Springer-Verlag, Berlin
4. K. Huang: Statistical Mechanics, 2nd Edition, 1987, John Wiley & Sons

Ideális Bose-gáz:

42/a

pl.: ${}^4\text{He}$ ($s=0$); $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$

$T=0$ hőmérsékleten minden részecské alapállapotban van (ϵ_0).
Egyetlen kvantumállapot betölthetősége makroszkópius méretű.

$f_{\pm}(\epsilon) \equiv f_{BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$; Bose-Einstein statisztika

$T=0$ -n a Bose-rendszert csak olyan hőállapotok lehet
leírni, amelyek energiájuk $\mu = \epsilon_0$

$f_{\pm}(\epsilon_0) \geq 0 \Rightarrow \mu \leq \epsilon_0$, ${}^4\text{He}$ -re $\epsilon_0 = 0$ így $\mu \leq 0$.
(Egyszerűsített alábbi atomokra $\epsilon_0 = \frac{3}{2}k_B T$, isotróp csapdapotencial.)

$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0-\mu)} - 1} \Rightarrow e^{\beta(\epsilon_0-\mu)} = 1 + \frac{1}{N_0} \Rightarrow \frac{\epsilon_0-\mu}{k_B T} = \ln\left(1 + \frac{1}{N_0}\right) \xrightarrow[N_0 \rightarrow N]{T \rightarrow 0} \ln\left(1 + \frac{1}{N}\right)$

$\epsilon_0 - \mu = k_B T \frac{1}{N} + k_B T O\left(\frac{1}{N^2}\right)$, ha $T \rightarrow 0$.

A gerjesztett részecskék betölthetősége nem lesz makroszkópius $T \rightarrow 0$ -n.

$N_1 \sim \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0 + \epsilon_1 - \mu)} - 1} \xrightarrow[\text{és } T \rightarrow 0]{\text{ha } \mu = \epsilon_0} \approx e^{-\beta \epsilon_1} \xrightarrow[T \rightarrow 0]{} 0$

A $p=0$ állapotot tehát óvatosan kell kezelni!!

Ha $\mu \rightarrow \epsilon_0$, \sum integrállal alakításával a $p=0$
állapot járuléka összehasonlítható a $p=0$ állapot integrállal,
tehát ezt le kell választani.

Fermionra nincs gond a $p=0$ állapottal, mert itt
az állagos betölthetőség maximum 1 lehet.

Indefiníció: a magashőmérséklet oldala:

$$N = \int_0^{\infty} g(\epsilon) \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} = A \cdot V \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$

ahol $A = g_s 2\bar{v} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$ és $g_s = 2s+1 = 1$, ha $s=0$.

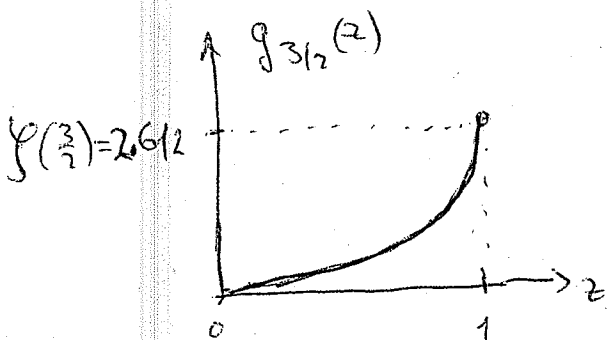
így $N = 2\bar{v} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} V \left(\frac{2}{\beta T}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{\frac{1}{z} e^x - 1}$, ahol $z = e^{\beta\mu}$ fugacitás

Def.: $g_s(z) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1} dx}{\frac{1}{z} e^x - 1}$

$$N = 2\bar{v} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} V \left(\frac{2}{\beta T}\right)^{3/2} \cdot \underbrace{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}_{\sqrt{\pi}/2} \cdot g_{3/2}(z) \Rightarrow \boxed{N = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z)}$$

$$\Rightarrow (1) \boxed{\frac{N}{V} \lambda_T^3 = g_{3/2}(z)}, \quad \lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2m k_B T}}, \quad z = e^{\beta\mu}$$

Mivel: $\mu \leq 0 \Rightarrow 0 \leq z \leq 1$.



$g_{3/2}(z)$ maximuma $z=1$, azaz

$$\frac{\mu}{k_B T} = 0 \text{ - ban van.}$$

(1) miatt, ha $\frac{N}{V} = \text{all.}$,

akkor T csökkenésével

$z \rightarrow 1$, azaz $\frac{\mu}{k_B T}$ csökken.

Ha T tovább csökken, a $g_{3/2}(z)$ tovább már nem nőhet - mintha elvenne a rétegszám.

Ezt a paradoxont oldja fel N_0 kvázienergia (Einstein).

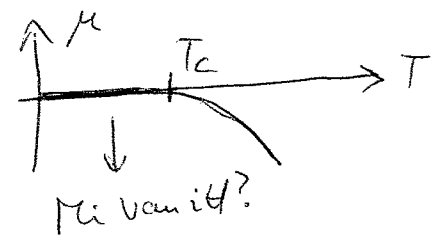
Adott N, V mellett van egy kritikus hőmérséklet, T_c , amikor $\mu = 0$, azaz $z = 1$.

Ezért $\frac{N}{V} \lambda_{T_c}^3 = g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) = 2.612$

Innen: $\boxed{\epsilon_B T_c} = \left[\frac{(2\bar{u})^2}{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} = \boxed{6.62 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}}$

Megny: $\frac{N}{V \rho_T^3 / h^3} = \frac{N}{V} \lambda_T^3 = 2.612 \leftarrow$ fizikárbeli értéseg.

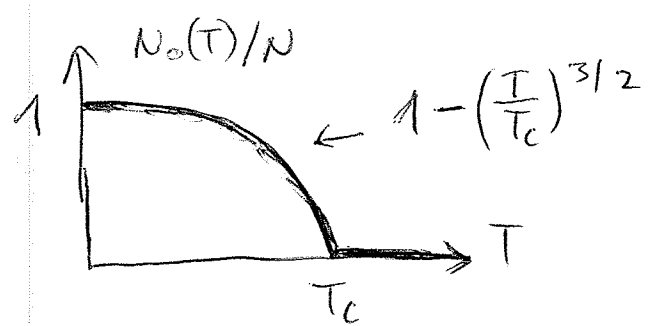
Ha $T \rightarrow T_c \Rightarrow \mu \rightarrow 0$



$N_0 = O(N)$, ha $T < T_c$

$$N = N_0(T) + \int_0^\infty \rho(\epsilon) f_{BE}(\epsilon) d\epsilon = N_0(T) + \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(1) = N_0(T) + N \frac{1}{\lambda_T^3} \cdot \underbrace{\frac{V}{N} g_{3/2}(1)}_{\lambda_{T_c}^3} = N_0(T) + N \frac{\lambda_{T_c}^3}{\lambda_T^3}$$

$$\Rightarrow N_0(T) = N \left[1 - \left(\frac{\lambda_{T_c}}{\lambda_T} \right)^3 \right] = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]$$



Ha $T > T_c \Rightarrow N_0(T) = 0$

Nincs makroszkopikus betöltés az $p=0$ állapotban.

A hullámfü. szabad cinnéveszköz és a hullám

$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} \Rightarrow$ a hőmérséklet névszékére $\psi_{\underline{k}=0}(\underline{r}) = \text{const.}$

Termodinamian energi keselamatan (ε₀ = 0 eset):

$$\begin{aligned}\Phi(T, V, \mu) &= -pV = +k_B T \sum_{i=0}^{\infty} \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}) \\ &= k_B T \ln(1 - z) + k_B T \int_0^{\infty} g(\epsilon) d\epsilon \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon - \mu)}) \\ &\quad \epsilon_i = 0 \text{ tag leválasztása, } z = e^{\beta\mu}\end{aligned}$$

Műen: $N = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right|_{T, V} = \frac{z}{1 - z} + \int_0^{\infty} g(\epsilon) \frac{d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}$

N_0

$$N_0 = \frac{z}{1 - z} \Rightarrow z = \frac{N_0}{N_0 + 1} \Rightarrow \text{így } \Phi(T, V, \mu) \text{ -ben}$$

az $\epsilon_0 = 0$ -hoz tartozó juttatás $k_B T \ln(1 - z) = k_B T \ln \frac{1}{N_0 + 1} =$

$$= -k_B T \ln(N_0 + 1) \approx -k_B T \ln N, \text{ azaz ez a tag}$$

Φ -ben $\ln N$ -es szerencsét jelent, ezt termodinamian energi hirtelen ($V \rightarrow \infty$) elhanyagolhatjuk.

$$\Phi(T, V, \mu) = -pV = k_B T \int_0^{\infty} g(\epsilon) d\epsilon (1 - e^{-\beta(\epsilon - \mu)})$$

Itt nem kell az ϵ_0 -s tagot leválasztani!

$$g(\epsilon) = \frac{p^2}{2m} \text{ esetén:}$$

$$\begin{aligned}\Phi(T, V, \mu) &= k_B T \cdot A V \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} \ln(1 - z e^{-\beta\epsilon}) d\epsilon = \\ &= 2\sqrt{\pi} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} V \cdot (k_B T)^{5/2} \int_0^{\infty} dx x^{1/2} \ln(1 - z e^{-x}) \stackrel{\text{parc. int.}}{=} \\ &= \dots = \frac{V}{\lambda_T^3} k_B T g_{5/2}(z)\end{aligned}$$

a) $T < T_c, \mu = 0, N_0 \neq 0$

44/a

$$E = \int_0^\infty \epsilon f(\epsilon) f_-(\epsilon) d\epsilon = A \cdot V \cdot \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} = A \cdot V \cdot (\epsilon_B T)^{5/2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} =$$

$$= A \cdot V \cdot (\epsilon_B T)^{5/2} \Gamma(\frac{5}{2}) g_{5/2}(1) \leftarrow E = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Phi |_{\mu, V} \text{ in is. sz.}$$

Másként $T = T_c$ -nél: $N_0 = 0, \mu = 0$

$$N = \int_0^\infty f(\epsilon) f_-(\epsilon) d\epsilon = A \cdot V \cdot \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} = A \cdot V \cdot (\epsilon_B T)^{3/2} \Gamma(\frac{3}{2}) g_{3/2}(1)$$

így $\frac{E}{N} = \frac{(\epsilon_B T)^{5/2} \Gamma(\frac{5}{2}) g_{5/2}(1)}{(\epsilon_B T)^{3/2} \Gamma(\frac{3}{2}) g_{3/2}(1)} = \frac{3}{2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} \epsilon_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2}$

$$\Rightarrow E = \frac{3}{2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} N \epsilon_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2} = 0.77 N \epsilon_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2}$$

így:

$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} |_{V, N}$, de $E = a \cdot T^{5/2}$, ahol $a = \text{const.}$

így $C_V = \frac{\partial a T^{5/2}}{\partial T} = a \frac{5}{2} T^{3/2} = \frac{5}{2} \frac{a T^{5/2}}{T} = \frac{5}{2} \cdot \frac{E}{T}$

$$\Rightarrow C_V(T) = \frac{15}{4} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} N \epsilon_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

$T = T_c$ -nél: $C_V(T = T_c) = \frac{5}{2} \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} N \epsilon_B = 1.927 N \epsilon_B > \frac{3}{2} N \epsilon_B$

Entropia: $G = 0 \Rightarrow S = \frac{E + PV - \mu N}{T}$, de $\mu = 0$, így

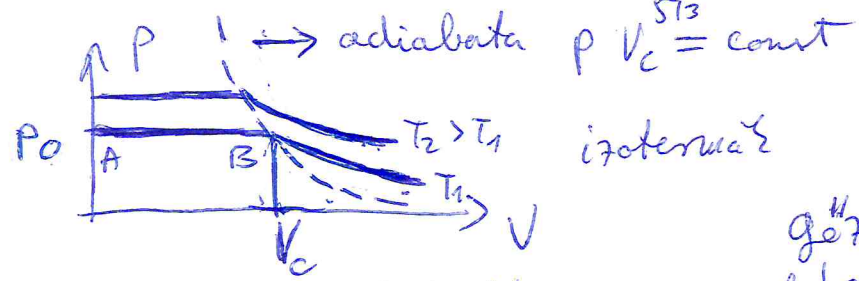
$$S = \frac{E + PV}{T} = \frac{E + \frac{2}{3}E}{T} = \frac{5}{3} \frac{E}{T} \sim T^{3/2} \downarrow 0$$

állapotegyenlet: $PV = \frac{2}{3} E \Rightarrow$

$$P = \frac{2}{3} \frac{E}{V} = \frac{2}{3} A (\epsilon_B T)^{5/2} \Gamma(\frac{5}{2}) \zeta(\frac{5}{2}) = \text{const.} \cdot T^{5/2}$$

↳ független V-től!

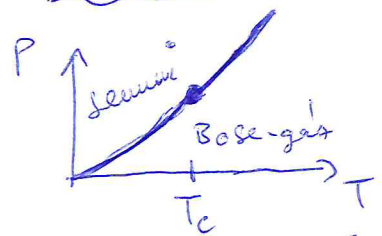
így $P = \frac{\epsilon_B T}{\lambda_T^3} \zeta(\frac{5}{2})$, $P(T = T_c) = \frac{2}{3} \frac{E}{V} = \frac{\zeta(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})} \frac{N \epsilon_B T_c}{V} = 0.5734 \frac{N \epsilon_B T_c}{V}$
n Boltzmann-gáz sz. fele!



Masonló a gőz - folyadék fázisátalakulásához; zöndezési át A-B maratlon.

1 trendű fázisátalakulás.

L latent hő: Clausius-Clapeyron-egyenlet



$$\frac{dp_c}{dT} = \frac{5}{2} \frac{p_c}{T} = \frac{5}{2} \frac{\epsilon_B}{\lambda_T^3} \psi\left(\frac{5}{2}\right)$$

$$\frac{dp_c}{dT} = \frac{L}{T \cdot \Delta V}$$

$$p_c(T) = \frac{\epsilon_B T}{\lambda_T^3} \psi\left(\frac{5}{2}\right) = a T^{5/2}$$

$$\Delta V = V_B - V_A = V_c, T < T_c$$

$$N = \frac{V_c}{\lambda_T^3} \psi\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$\frac{L}{N} = \frac{5}{2} \frac{\psi\left(\frac{5}{2}\right)}{\psi\left(\frac{3}{2}\right)} \epsilon_B T \approx 1.284 k_B T, T < T_c$$

Adiabatikus kompresszibilitás $\kappa_S = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{S, N}$

Adiabatokra $pV^{5/3} = \text{const.}$

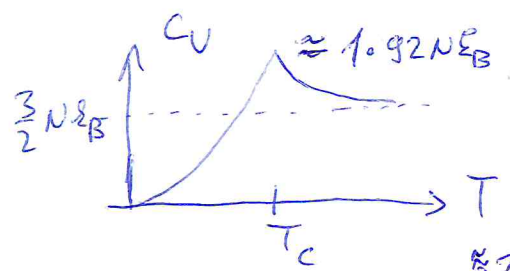
$$\Rightarrow V^{5/3} + p \frac{5}{3} V^{2/3} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{S, N} = 0 \Rightarrow \kappa_S = \frac{3}{5} \frac{1}{p} \approx T^{-5/2}, T < T_c$$

b.) $T > T_c, \mu \neq 0, N_c = 0$

A zérus pot. meghatározó egyenlet: $N = \int_0^\infty \frac{\rho(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$.
 Ezt kell megoldani μ -re adott N, V, T mellett.

cs. belső energiába: $E = \int_0^\infty \frac{\epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$

Csak numerikus lehet megoldni. Lásd Appendix A!



Folyékony ⁴He adataival $(m, \frac{N}{V})$

$$T_c \approx 3.1 K, T_c \sim \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

Gondoljott alkáli atomokkal: $T_c \sim 10^{-7} K$ is lehet. (Rb, Cs... atomok)

Két komponens-elmelet a superfolyékonyságra Tisza (1938).

Az ideális Bose-gáz termodinamikai mennyiségei

Kiegészítés III. éves BsC fizikusok számára

Cserti József
Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2016. február

1. Néhány alapvető formula

1.1. Bose-Einstein integrál:

$$g_s(z) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1} dx}{\frac{1}{z} e^x - 1}, \quad (1)$$

$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1} dx}{e^x - 1} = g_s(1). \quad (2)$$

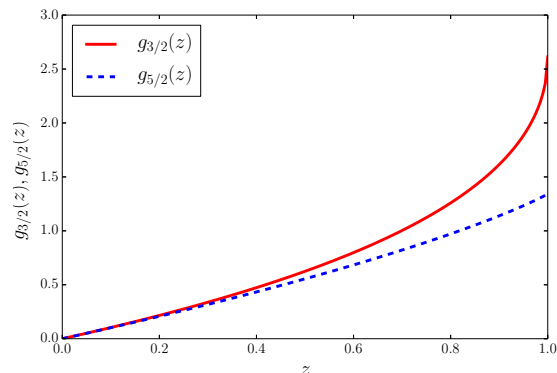
A $g_s(z)$ függvényt az irodalomban polylogaritmus függvénynek (Polylogarithm function) is nevezik, és a jelölése: $Li_s(z)$:

$$g_s(z) \equiv Li_s(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^s} = z + \frac{z^2}{2^s} + \frac{z^3}{3^s} + \dots \quad (3)$$

$$g_{3/2}(1) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \quad g_{5/2}(1) = \zeta\left(\frac{5}{2}\right), \quad (4)$$

$$\frac{T}{T_c} = \left(\frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(z)}\right)^{2/3}, \quad \text{ahol } z = e^{\beta\mu} \text{ és } 0 \leq z \leq 1. \quad (5)$$

1.2. A $g_s(z)$ függvény:



1. ábra. A $g_s(z)$ függvények.

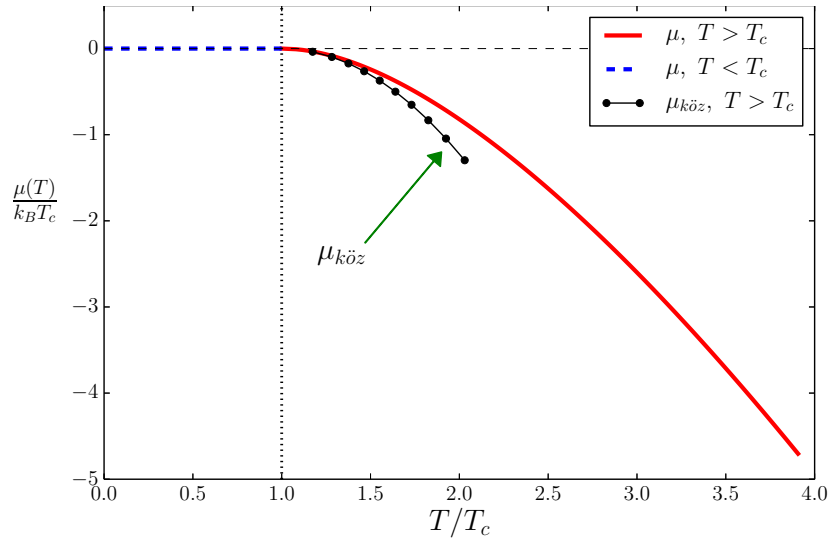
2. Termodinamikai mennyiségek hőmérsékletfüggése

Az alábbiakban az N részecskeszám rögzített. A számolások részletei az Appendix A-ban található.

2.1. A kémiai potenciál hőmérsékletfüggése:

$$\frac{\mu}{k_B T_c} = \frac{T}{T_c} \ln(z), \quad (6)$$

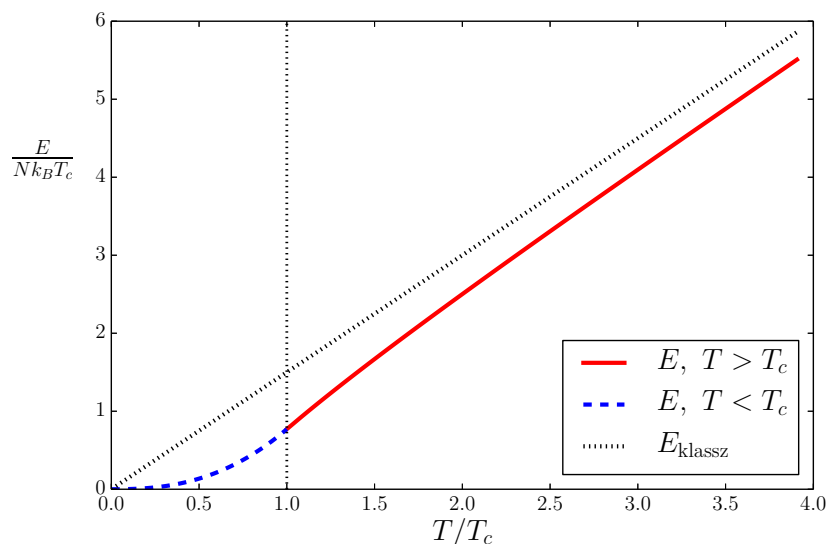
$$\mu_{\text{köz}} \approx - \left(\frac{3 \zeta(\frac{3}{2})}{4 \sqrt{\pi}} \right)^2 \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^2, \text{ ha } T > T_c. \quad (7)$$



2. ábra. A kémiai potenciál hőmérsékletfüggése.

2.2. Az energia hőmérsékletfüggése:

$$E(T) = \begin{cases} \frac{3}{2} N k_B T_c \left(\frac{T}{T_c} \right) \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, & T > T_c, \\ \frac{3}{2} N k_B T_c \left(\frac{T}{T_c} \right)^{5/2} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}, & T < T_c. \end{cases} \quad (8)$$



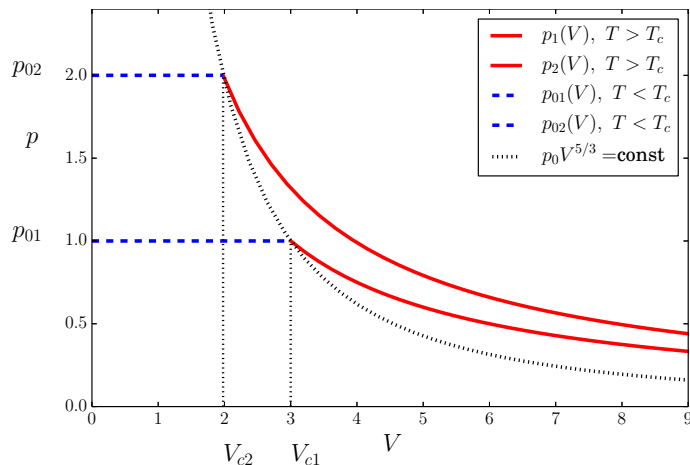
3. ábra. Az energia hőmérsékletfüggése.

2.3. Izotermák:

$$p(V) = \begin{cases} \frac{Nk_B T}{V} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, & V > V_c, \\ p_0 = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} \zeta(5/2), & V < V_c, \end{cases}, \text{ ahol} \quad (9)$$

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \quad \text{és} \quad \frac{V_c}{N} = \frac{\lambda_T^3}{\zeta(5/2)} \quad (10)$$

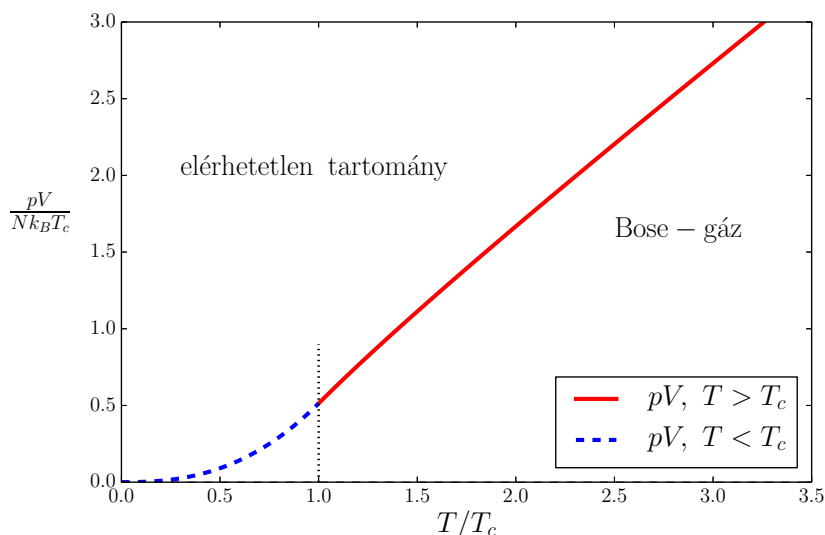
a termikus de Broigle-hullámhossz és a kritikus térfogat. Ha $V < V_c$, akkor p nem függ V -től, ekkor $p_0 \sim T^{5/2}$. **Adiabata egyenlete:** $p_0 V_c^{5/3} = \text{állandó}$.



4. ábra. Izotermák.

2.4. $p - T$ diagram:

$$pV = \frac{2}{3} E = \begin{cases} Nk_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right) \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, & T > T_c, \\ Nk_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)}, & T < T_c. \end{cases} \quad (11)$$

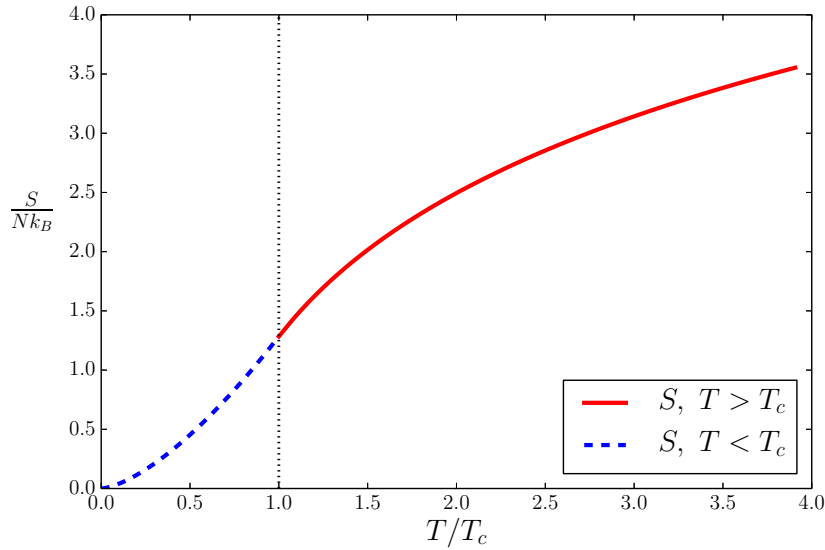


5. ábra. $p - T$ diagram.

2.5. Az entrópia hőmérsékletfüggése:

$$S = \frac{E+pV-\mu N}{T} = \frac{5}{3} \frac{E}{T} - Nk_B \ln z,$$

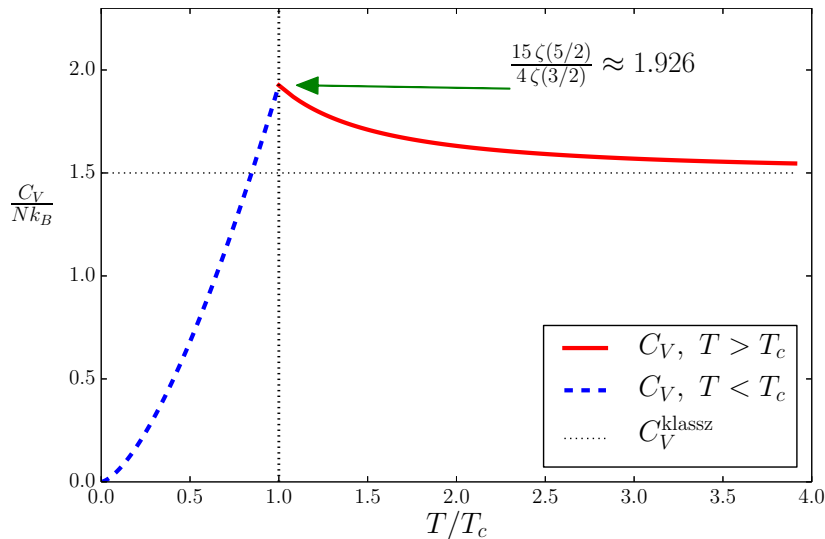
$$\frac{S(T)}{Nk_B} = \begin{cases} \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \ln(z), & T > T_c, \\ \frac{5}{2} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, & T < T_c. \end{cases} \quad (12)$$



6. ábra. Az entrópia hőmérsékletfüggése.

2.6. Állandó térfogaton vett fajhő hőmérsékletfüggése:

$$\frac{C_V(T)}{Nk_B} = \begin{cases} \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}, & T > T_c, \\ \frac{15}{4} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, & T < T_c. \end{cases} \quad (13)$$

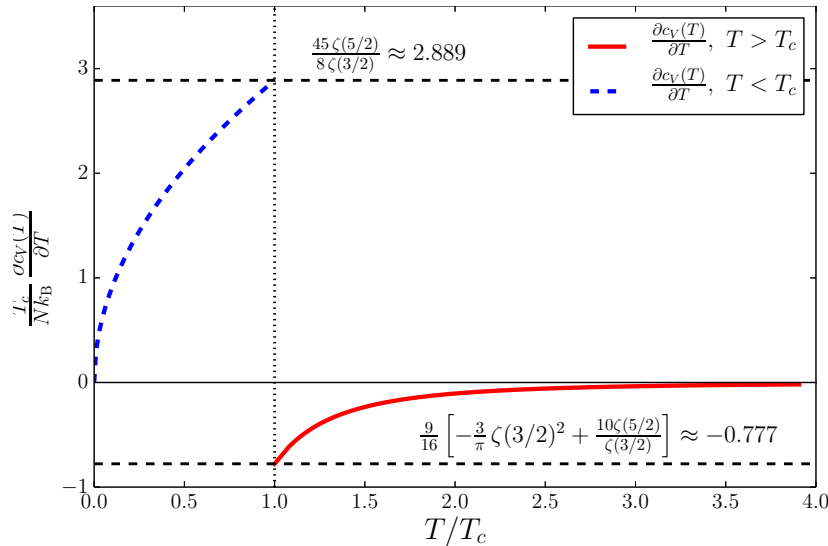


7. ábra. Állandó térfogaton vett fajhő hőmérsékletfüggése.

2.7. $\frac{\partial C_V(T)}{\partial T}$ hőmérsékletfüggése:

$$\frac{\partial C_V(T)}{\partial T} = \begin{cases} \frac{Nk_B}{T} \left(\frac{45}{8} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} - \frac{27}{8} \frac{[g_{3/2}(z)]^2 g_{-1/2}(z)}{[g_{1/2}(z)]^3} \right), & T > T_c, \\ \frac{Nk_B}{T_c} \frac{45\zeta(5/2)}{8\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{1/2}, & T < T_c, \end{cases} \quad (14)$$

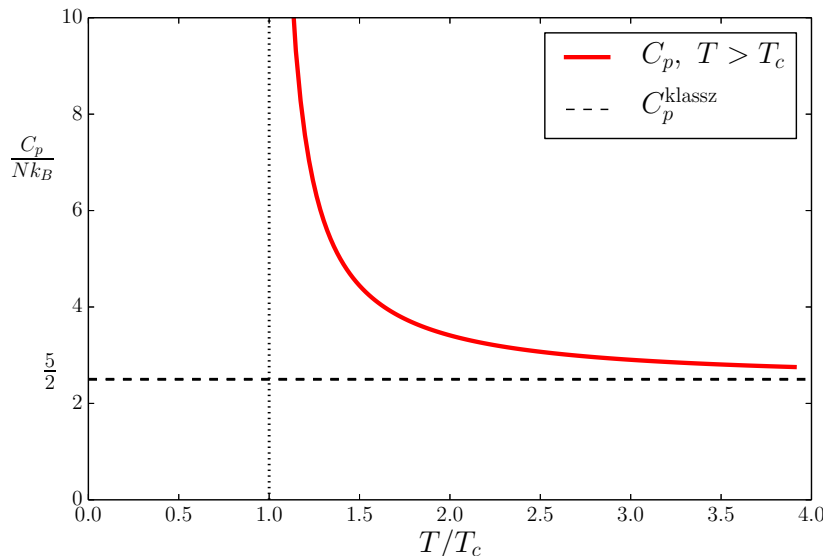
$$\left. \frac{\partial C_V}{\partial T} \right|_{T=T_c-0} - \left. \frac{\partial C_V}{\partial T} \right|_{T=T_c+0} = \frac{27}{16\pi} \frac{Nk_B}{T_c} \left[\zeta \left(\frac{3}{2} \right) \right]^2 \approx 3.666 \frac{Nk_B}{T_c}. \quad (15)$$



8. ábra. $\frac{\partial C_V(T)}{\partial T}$ hőmérsékletfüggése.

2.8. Az állandó nyomáson vett fajhő hőmérsékletfüggése:

$$\frac{C_p(T)}{Nk_B} = \frac{25}{4} \frac{[g_{3/2}(z)]^2 g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^3} - \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, \quad T > T_c. \quad (16)$$



9. ábra. Állandó nyomáson vett fajhő hőmérsékletfüggése.

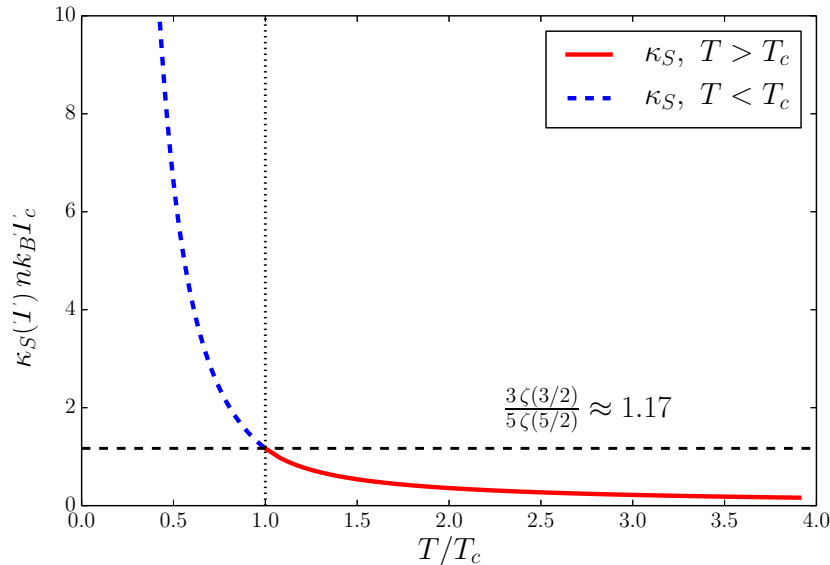
Megjegyzés: $T < T_c$ esetén a c_p fajhő nincs értelmezve, mert ekkor $p = \text{állandó}$, és így $T = \text{állandó}$.

2.9. Adiabatus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése:

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{S,N},$$

$$\kappa_S(T) = \frac{1}{nk_B T_c} \begin{cases} \frac{3g_{3/2}(z)}{5g_{5/2}(z)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-1} & T > T_c, \\ \frac{3\zeta(3/2)}{5\zeta(5/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-5/2}, & T < T_c, \end{cases} \quad (17)$$

ahol $n = N/V$.



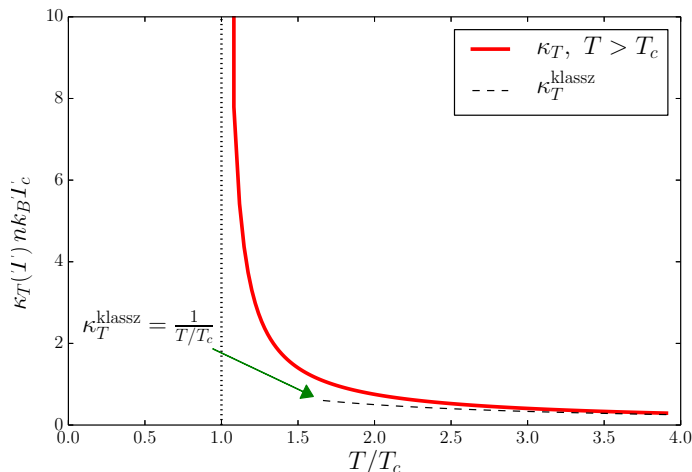
10. ábra. Adiabatus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése.

2.10. Izotermikus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése:

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{T,N},$$

$$\kappa_T(T) = \frac{1}{nk_B T} \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, \quad T > T_c. \quad (18)$$

ahol $n = N/V$.



11. ábra. Izotermikus kompresszibilitás hőmérsékletfüggése.

Megjegyzés: $T < T_c$ esetén a c_p fajhő nincs értelmezve, mert ekkor $p = \text{állandó}$, és így $T = \text{állandó}$.

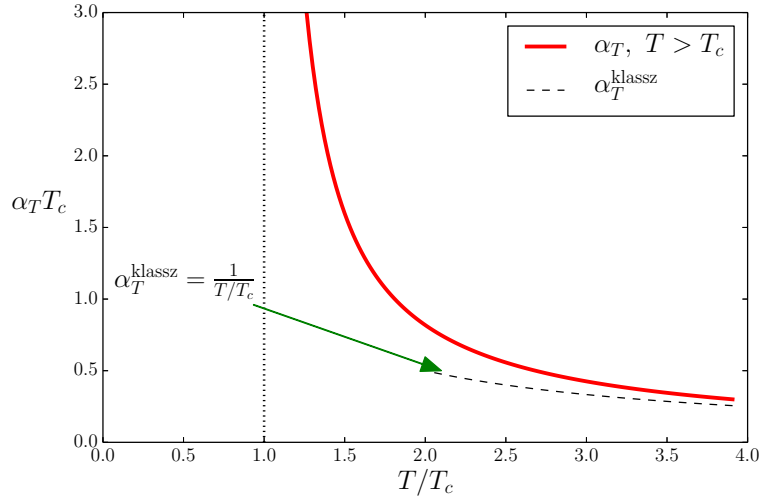
2.11. Hőtágulási együttható hőmérsékletfüggése:

$$\alpha_T = \frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial T} \right|_{p,N},$$

$$\alpha_T(T) = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z)g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^2} - \frac{3}{2} \right), \quad T > T_c. \quad (19)$$

Magashőmérsékleti közelítésben $\alpha_T^{\text{klassz}}(T) = 1/T$.

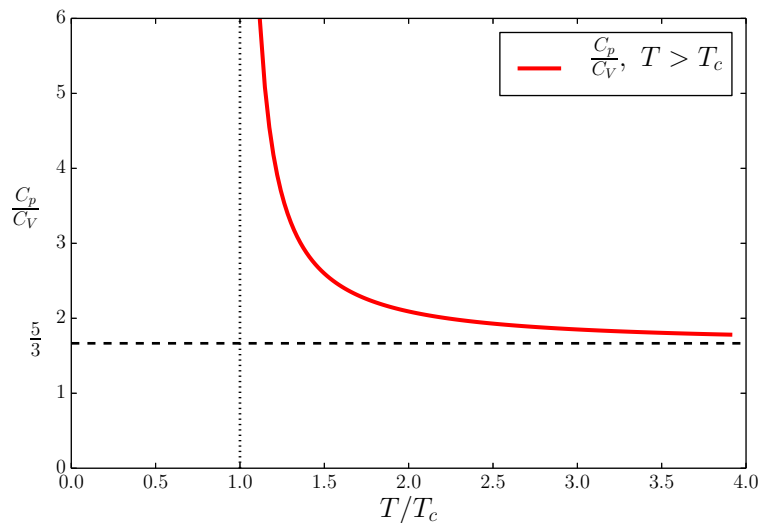
Megjegyzés: $T < T_c$ esetén a c_p fajhő nincs értelmezve, mert ekkor $p = \text{állandó}$, és így $T = \text{állandó}$.



12. ábra. Hőtágulási együttható hőmérsékletfüggése.

2.12. $\frac{C_p}{C_V}$ hőmérsékletfüggése:

$$\frac{C_p}{C_V} = \frac{5}{3} \frac{g_{5/2}(z)g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^2}, \quad T > T_c. \quad (20)$$



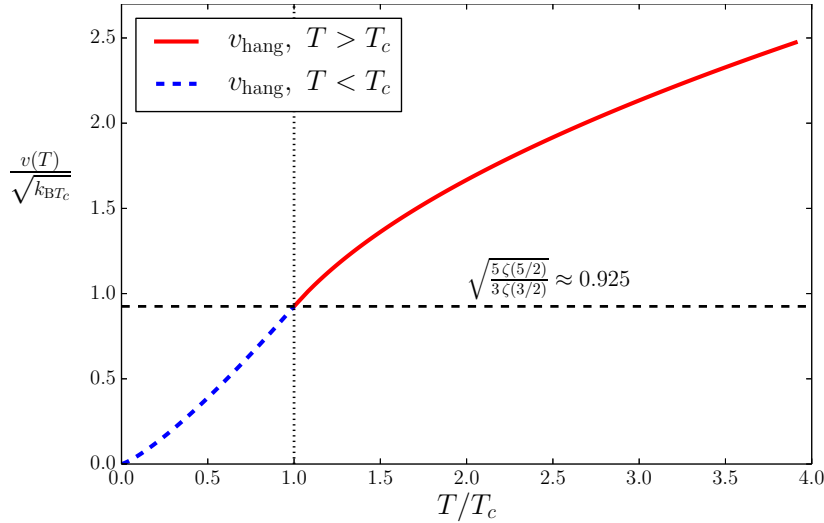
13. ábra. $\frac{C_p}{C_V}$ hőmérsékletfüggése.

Megjegyzés: $T < T_c$ esetén a c_p fajhő nincs értelmezve, mert ekkor $p = \text{állandó}$, és így $T = \text{állandó}$.

2.13. Hangsebesség hőmérsékletfüggése:

$v_{\text{hang}}(T) = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \varrho} \right|_{S,N}} = \sqrt{\frac{V}{mN} \frac{1}{\kappa_S}}$, ahol $\varrho = mN/V$ a tömegsűrűség.

$$\frac{v_{\text{hang}}(T)}{\sqrt{\frac{k_B T_c}{m}}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{5g_{5/2}(z)}{3g_{3/2}(z)} \frac{T}{T_c}}, & T > T_c, \\ \sqrt{\frac{5\zeta(5/2)}{3\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2}}, & T < T_c. \end{cases} \quad (21)$$



14. ábra. Hangsebesség hőmérsékletfüggése.

3. Irodalom:

1. R. K. Pathria: Statistical Mechanics, 2nd Edition, 1996, Bunerworth-Heinemann Linacre House
2. Linda E. Reichl: A Modern Course in Statistical Physics 2nd Edition, 1998, Wiley-VCH
3. Franz Schwabl: Statistical Mechanics, 2000, Springer-Verlag, Berlin
4. K. Huang: Statistical Mechanics, 2nd Edition, 1987, John Wiley & Sons

Foton gáz, fekete-test sugárzás:

45/a

$E(p) = c|p|$, $\rho(\epsilon) = g \frac{8\pi}{(hc)^3} V \epsilon^2$, $g=2$ (két polarizáció)

Az N részecske szám nem marad meg. Termikus egyensúly
 az üreg falával, foton elnyelődhet a falnál (csillag képleténél).
 Nagy számú részecske leírásában nem szerepel a μN tag,
 mivel μ Lagrange - multiplikatív!

Látásból, ha N a fotonok száma, akkor $F(T, V, N)$
 szabadenergia minimalizálásával lehetne N -t meghatározni,
 azaz $\frac{\partial F}{\partial N}|_{T, V} = 0$. A foton boson!

$\Phi(T, V) = -pV = \frac{1}{\beta} T \int_0^\infty \rho(\epsilon) \ln(1 - e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon =$
 $= \frac{1}{\beta} T \cdot A \cdot V \cdot \int_0^\infty \epsilon^2 \ln(1 - e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon$ $x = \beta \epsilon$ és parci. int.

Megismételjük a 38/a oldalon lévő számolást

$\Phi = -pV = \int_0^\infty \rho(\epsilon) \ln(1 - e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon = \dots =$
 $= -A \cdot V \left(\frac{8\pi}{(hc)^3}\right)^4 \cdot \frac{1}{3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = -A \cdot V \left(\frac{8\pi}{(hc)^3}\right)^4 \frac{1}{3} \frac{\pi^4}{15}$
 $\Gamma(4) g_4(1) = 3! \zeta(4) = 6 \cdot \frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15}$

Használjuk:

$E = \int_0^\infty \epsilon \rho(\epsilon) f_-(\epsilon) d\epsilon = A \cdot V \cdot \left(\frac{8\pi}{(hc)^3}\right)^4 \cdot \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = A \cdot V \left(\frac{8\pi}{(hc)^3}\right)^4 \frac{\pi^4}{15}$

Teljesen $pV = \frac{1}{3} E$

és

$E = \frac{8\pi}{(hc)^3} V \left(\frac{8\pi}{(hc)^3}\right)^4 \frac{\pi^4}{15} \sim T^4$

1879 1884
 ↑ ↑
 Stefan-Boltzmann-
 törvény

Állapotegyenlet: $p = \frac{1}{3} \frac{E}{V} = \frac{8\pi^5}{45 (hc)^3} \left(\frac{8\pi}{(hc)^3}\right)^4 = a \cdot T^4$
 ↳ Nem függ V -től!

Entropia: $(G-D) \Rightarrow S = \frac{E+PV}{T} = \frac{4}{3} \frac{E}{T} \sim VT^3$ 45/6

\uparrow
 $\mu=0$

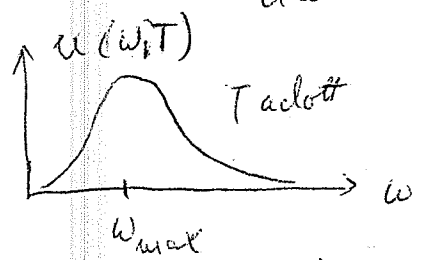
$S \downarrow \rightarrow 0$

$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_V = \dots = 3S = 4 \frac{E}{T} \sim T^3$

Planck sugartási törvény: Mekkora jelerősség ad az $\frac{E}{V}$

Energia sűrűségbe egy $d\omega = \frac{dE}{V}$ frekvenciaintervallum?

$u(\omega) = \frac{d(E/V)}{d\omega} = \frac{1}{V} \frac{d(E/V)}{dE} = \frac{1}{V} A \frac{E^3}{e^{\beta E} - 1} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$



$\beta \hbar \omega_{max} = 2.814 \leftarrow$ numerikusan.
 $\Rightarrow \lambda_{max} T = \text{állandó}$. Wien-féle eltolódási törvény.

Nagy T-re és λ -ra ($\beta \hbar \omega \ll 1$): $u(\omega) \approx \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^2$

Rayleigh-Jeans-törvény, ultravibona katasztrófa (1900-1905)!
 Rövid hullámhosszra, $\lambda T \ll \frac{hc}{E_B}$, azaz $\beta \hbar \omega \gg 1$ esetre:

$u(\omega, T) \approx \frac{1}{\pi^2 c^3} \omega^3 e^{-\beta \hbar \omega}$, Wien-törvény (1896).

Ekvivalens modellek: egyazon a statisztikus fizikában!

- Akustikus fononok, $T < T_D$: $C_V \sim T^3$ ("sigetelés")
- Kristályban $C_V = aT + bT^3 \Rightarrow \frac{C_V}{T} \sim T^2$
 - fononok el. fonon
 - egyes tökéletes egyensúly a létezésével!

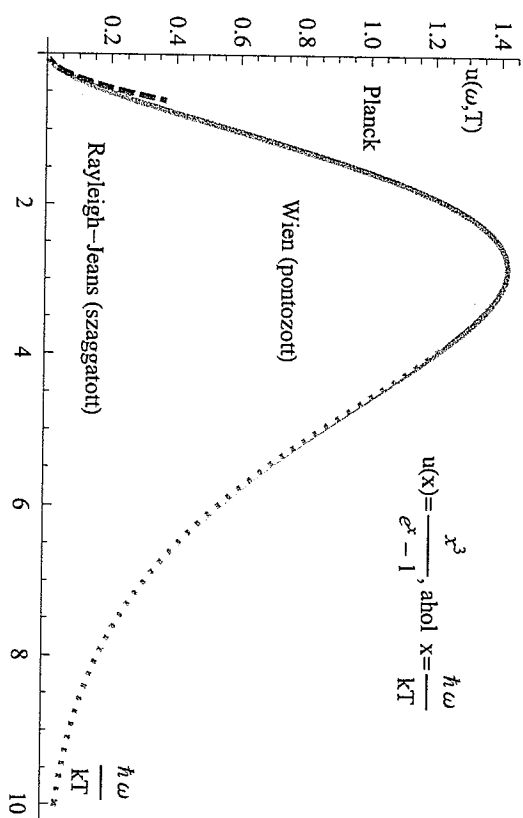
Termodinamika III. fejelet (ismét):

Rész megmaradást: $S = k_B \ln \Omega$, ha az állapotok nem elfajult $\Omega_0 = 1 \Rightarrow S = 0$
 De makroszkopikus fester az energiahatékony sűrűség $\equiv \frac{1}{V} \frac{dE}{E_B} \sim 10^{-23}$
 Az igazi az, hogy az állapot sűrűség $\int_0^E g(E) \rightarrow 0$
 Az alacsony hőmérsékletű gőzök és szilárd testek reverzen vannak!!

- Fermion: $S \sim T$
- Boson (Bose-Einstein): $S \sim T^{3/2}$
- Boson ($\mu_0 = 0$, foton, fonon): $S \sim T^3$
- Iszotópok spin: $S \sim e^{-\Delta/T}$

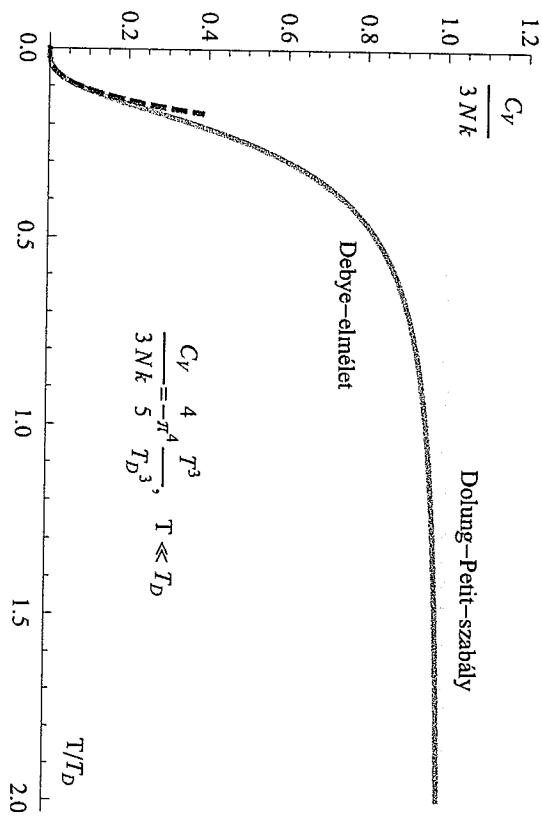
Üveg, károl, stb befagyott maradék entropia.

Planck - féle sugárzási törvény



Kristály fajhője a
Debye-elélet alapján

$$C_V \sim T^3, T \rightarrow 0$$



Kölcsonbataló (nem-ideális) gáz:

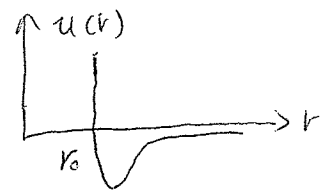
$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \underbrace{\sum_{i < j} u(r_{ij})}_{\text{modell}}$$

def. $u(r_1, \dots, r_N)$

Lenard-Jones:

$$u(r) = \epsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

A tarrtó magban $u(r)$ nagy, a direkt perturbációs sor nem működik.

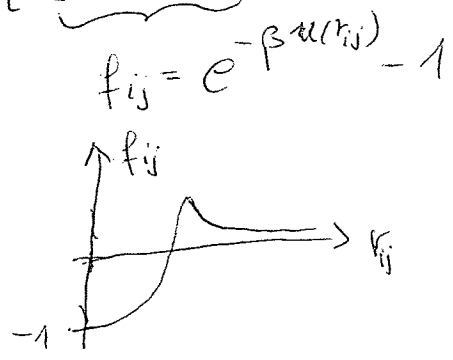
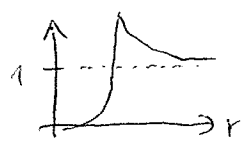


$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^3p e^{-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m}} \cdot \underbrace{\int d^3r e^{-\beta \sum_{i < j} u(r_{ij})}}_{Q_N(T, V) \text{ ideális gázra: } V^N}$$

$$N! (\lambda_T)^{3N}, \quad \lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

$F(T, V, N) = -k_B T \ln Z$ és $p = -\left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_{T, N} = k_B T \frac{\partial}{\partial V} \ln Q_N(T, V)$
 ideális gázra: $p = k_B T N \frac{1}{V}$

$$e^{-\beta \sum_{i < j} u(r_{ij})} = \prod_{i < j} e^{-\beta u(r_{ij})} = \prod_{i < j} \left[\underbrace{\left(e^{-\beta u(r_{ij})} - 1 \right) + 1}_{f_{ij} = e^{-\beta u(r_{ij})} - 1} \right]$$



$$Q_N = \int_{V^N} d^3r e^{-\beta \sum_{i < j} u(r_{ij})} = \int_{V^N} d^3r \left[(1 + f(r_{12})) (1 + f(r_{13})) (1 + f(r_{23})) \dots \right]$$

Kis sűrűségre: állapotegyenletet viriálsorral közelítjük:

$$p = k_B T \left[\frac{N}{V} + B(T) \left(\frac{N}{V} \right)^2 + C(T) \left(\frac{N}{V} \right)^3 + \dots \right]$$

↑ másodlagos viriális együttható

$$Q_N = \int_{V^N} dr (1 + f(r_{12}) (1 + f(r_{13}) (1 + f(r_{23}) \dots \approx$$

$$\approx \int_{V^N} dr (1 + f(r_{12}) + f(r_{13}) + f(r_{23}) + \dots + \cancel{f(r_{12}) f(r_{13})} + \dots$$

$$\approx V^N + \frac{N(N-1)}{2} V^{N-1} \int_0^\infty 4\pi r^2 f(r) dr + \dots$$

elhanyagoljuk az N/V -re
Csak akkor lényeges, ha
1, 2, 3 egyenre eszel
észel.

paros
számra
 $\sim \frac{N^2}{2} (N \gg 1)$

$$B(T) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty 4\pi r^2 (e^{-\beta u(r)} - 1) dr$$

Igy $Q_N = V^N (1 - \frac{N^2}{V} B(T) + \dots) \Rightarrow$

$$\ln Q_N \approx N \ln V - \frac{N^2}{V} B(T) \Rightarrow$$

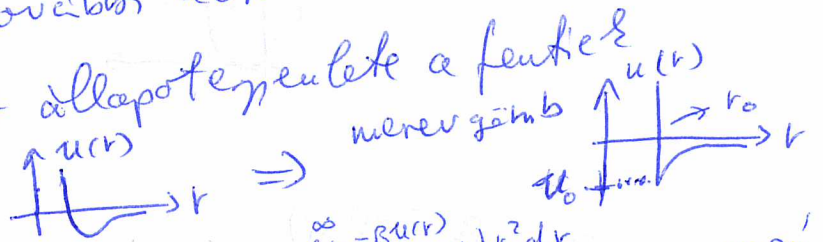
$$P = \frac{2}{\beta T} \left[\frac{N}{V} + \frac{N^2}{V^2} B(T) + \mathcal{O}\left(\frac{N}{V}\right)^3 \right]$$

Magasabb rendű tagokat a Mayer-féle kláster-sorfejtéssel
láthatunk.

Nagy sűrűségűnél Q_N divergál!

A kvantumos Adolais további korrekciókat ad $B(T)$ -hez.

A Van der Waals-gáz állapotegyenlete a fentiek
alapján levezethető.



$$B(T) = -2\pi \int_0^\infty (e^{-\beta u(r)} - 1) r^2 dr = 2\pi \int_0^{r_0} r^2 dr - 2\pi \int_{r_0}^\infty (e^{-\beta u(r)} - 1) r^2 dr$$

$\beta u(r) \ll 1$ gyenge vonzó potential

$$\approx \frac{2\pi}{3} r_0^3 - 2\pi \int_{r_0}^\infty (-\beta) u(r) r^2 dr = b - \frac{a}{k_{BT}}$$

ahol $a > 0$ és $b > 0$,
amagát függ.

Igy $\frac{P}{k_{BT}} = \frac{N}{V} \left[1 + \frac{N}{V} B(T) \right] = \dots = \frac{N}{V} \left(1 + b \frac{N}{V} \right) - \frac{a}{k_{BT} V^2}$, mivel $(\frac{N}{V})^2$ -ig számoltunk

$$\Rightarrow \frac{P}{k_{BT}} \approx \frac{N}{V} \frac{1}{1 - b \frac{N}{V}} - \frac{a}{k_{BT}} \left(\frac{N}{V} \right)^2 = \frac{N}{V - bN} - \frac{a}{k_{BT}} \frac{N^2}{V^2}$$

a potencial falnal vonzó és.

\downarrow térfogatorösszes

$$\Rightarrow \left(P + a \frac{N^2}{V^2} \right) (V - bN) = N k_{BT}$$

Fluktuációk = ingadozás az átlag körül

47a

$$\Delta A = A - \langle A \rangle$$

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Korreláció: $\langle \Delta A \Delta B \rangle = \dots = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$

Honnan kell kiszámolni?

pl. 1) Energia (kanonikus sorozás) / Ismétlés (20a).

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_c E_c e^{-\beta E_c}}{\sum_c e^{-\beta E_c}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \dots = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} =$$

$$= -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \beta} = k_B T^2 C_V \sim N$$

$$\Rightarrow \frac{\sqrt{\langle (\Delta E)^2 \rangle}}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \rightarrow \text{"normális fluktuáció"}$$

C_V : az energia "válasza" egy "külső" változásra.

2.) Rendcsiszám (nagykanonikus sorozás) / Ismétlés (27b).

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = k_B T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \Big|_{T, V}$$

Kérdés mennyi $\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \Big|_{T, V}$? sorfele levezetés lehét.

Elhasznál $\langle \rangle$ illációt, $\frac{\partial N}{\partial \mu} \Big|_{T, V} = \frac{\partial N}{\partial P} \Big|_{T, V} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mu} \Big|_{T, V} =$

$$= -\frac{\frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T, N} = -V k_T}{\frac{\partial V}{\partial N} \Big|_{T, P}} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mu} \Big|_{T, V} = \frac{-V k_T}{\frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T, N}} \cdot \frac{\partial P}{\partial \mu} \Big|_{T, V}$$

Maxwell $\mu dN + V dp$

Euler-rel. $E = TS - pV + \mu N$

$G(T, p, N) = E - TS + pV = \mu N$

$dG = -SdT + Vdp + \mu dN$

$\Rightarrow \left. \frac{\partial \mu}{\partial p} \right|_{T, N} = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial G}{\partial p} \right|_{T, N} = \frac{V}{N}$

Másként

$\left. \frac{\partial p}{\partial \mu} \right|_{T, V} = ?$

$\Phi(T, V, N) = E - TS - \mu N = -pV$
 $\Rightarrow p = -\frac{\Phi}{V}$

Euler
↓

$d\Phi = -SdT - p dV - N d\mu$

$\Rightarrow \left. \frac{\partial p}{\partial \mu} \right|_{T, V} = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right|_{T, V} = -\frac{1}{V}(-N) = \frac{N}{V}$

Végül $\left. \frac{\partial N}{\partial \mu} \right|_{T, V} = \frac{V \cdot k_T}{\frac{V}{N}} \cdot \frac{N}{V} = \frac{N^2}{V} k_T$

$\langle (\Delta N)^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \epsilon_B T \cdot \frac{N^2}{V} k_T$

Bose, Fermi: $\langle (\Delta n_i)^2 \rangle = \epsilon_B T \cdot \frac{\partial \langle n_i \rangle}{\partial \mu} =$

$= \epsilon_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} \pm 1}$

Felső előjel: Fermi
 Alsó -"- : Bose

$= -\epsilon_B T \frac{1}{(e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} \pm 1)^2} \cdot e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} (-\beta) = \langle n_i \rangle \cdot \frac{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{(e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} \pm 1)}$

$= \langle n_i \rangle \frac{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} \pm 1 \mp 1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} \pm 1} = \langle n_i \rangle (1 \mp \langle n_i \rangle)$

$\Rightarrow \langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 = \langle n_i \rangle (1 \mp \langle n_i \rangle)$

Fermionra $n_i = 0, 1$ \Rightarrow ez is a fluktuáció
 Bosonra n_i lehet nagy \Rightarrow a fluktuáció is nagy lehet
 nem "normális" fluktuáció!

Sűrűségfluktáció:

48/a

= részecskék sűrűségfluktáció helyre-helyre

V térfogatban N atom, az i -edik atom helye \underline{R}_i

Egyrészecske sűrűség fu.:

$$n_1(\underline{r}) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{R}_i) \right\rangle$$

$\langle \rangle$: konfigurációk vagy termikus átlag

$$\Rightarrow \int n_1(\underline{r}) d^3r = N$$

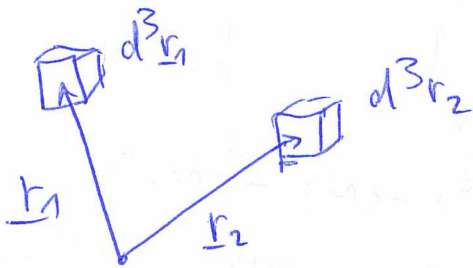
Két részecske sűrűség fu.:

$$n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\underline{r}_1 - \underline{R}_i) \delta(\underline{r}_2 - \underline{R}_j) \right\rangle$$

fontos $i \neq j$

$$\Rightarrow \int n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) d^3r_2 = (N-1) n_1(\underline{r}_1)$$

$$\int n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 = N(N-1)$$



$n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 =$
annak a valószínűsége, hogy két részecske \underline{r}_1 körüli d^3r_1 és az \underline{r}_2 -körül d^3r_2 térfogatban van.

Mire jó $n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$?

pl.: $U(\underline{R}_i, \underline{R}_j)$ két részecske közötti kölcsönhatás

Teljes eli. energia átlaga:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle U(\underline{R}_i, \underline{R}_j) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \sum_{i \neq j} \int U(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \delta(\underline{r}_1 - \underline{R}_i) \delta(\underline{r}_2 - \underline{R}_j) \cdot d^3r_1 d^3r_2 \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2} \int U(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\underline{r}_1 - \underline{R}_i) \delta(\underline{r}_2 - \underline{R}_j) \right\rangle d^3r_1 d^3r_2 = \frac{1}{2} \int U(\underline{r}_1, \underline{r}_2) n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$$

\uparrow $\underline{R}_i, \underline{R}_j$: konfigur. átlagoknál $\underline{r}_1, \underline{r}_2$ -re nem

Homogén rendhő: $n_2(r_1 - r_2)$

(48/6)

transzláció invariancia

$$n_2(r_1, r_2) = \frac{1}{V} \int \sum_{i \neq j} \langle \delta(r_1 - r'_i - R_i) \delta(r_2 - r'_j - R_j) \rangle d^3 r' =$$

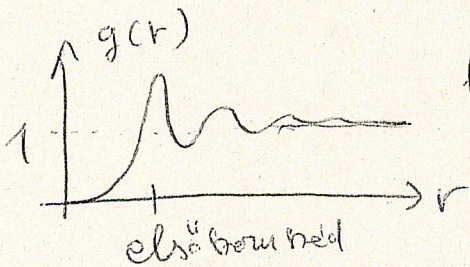
$$= \frac{1}{V} \sum_{i \neq j} \langle \delta(r_1 - r_2 - R_i + R_j) \rangle, \text{ ahol } r = r_1 - r_2 - \text{től függ.}$$

$$n_2(r) = \frac{1}{V} \sum_{i \neq j} \langle \delta(r - R_i + R_j) \rangle$$

izotrop esetben iránytól nem függ, ezért $n_2(|r_1 - r_2|)$

Homogén, izotrop rendhőre bevezetjük a $g(r)$ pártkorrelációs fu-t.

$$n_2(|r|) = \left(\frac{N}{V}\right)^2 g(|r|), \quad \frac{N}{V} = \text{sűrűség}$$



folysadékos
tipikus
 $g(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 1$

Kristályos: anizotrop és
csúcsos

nagyflankosság

$$\int n_2(r_1, r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 = \left(\frac{N}{V}\right)^2 V \int d^3 r g(r) = \underbrace{\langle N(N-1) \rangle}_{\substack{\text{páros} \\ \text{száma}}} = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle$$

$$\left(\frac{N}{V}\right)^2 V \int 4\pi r^2 [g(r) - 1] dr = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle - \langle N \rangle^2 =$$

$$= \langle (\Delta N)^2 \rangle - \langle N \rangle = \frac{2}{B} T \frac{N^2}{V} K_T - N$$

" $k_B T \frac{N^2}{V} K_T$

N-mel osztva

$$\Rightarrow \frac{N}{V} \int 4\pi r^2 [g(r) - 1] dr = \frac{2}{B} T \frac{N}{V} K_T - 1$$

$$\boxed{n k_B T K_T = 1 + n \int 4\pi r^2 [g(r) - 1] dr, \quad n = \frac{N}{V}}$$

Kompressibilitási egyenlet

Megjegyzés: Nagy számú részecske esetén. 49/a

Mechanikai észleletekben a kompresszibilitást fix N -re vessezük. Azonban κ_T kapcsolatos a $g(r)$ párkorrelációs függvényrel, amit részecske-észleletek alapján mérhetünk (lásd előbb leírt). Így a bejövő ugaláb a mióta egy kis térfogatát tapogatja le, amely rétegekben a részecskék hányáfluctuálhat.

Ideális gátra: $g(r) = 1 \Rightarrow n \kappa_B T \kappa_T = 1 \Rightarrow$

$\Rightarrow \kappa_T = \frac{V}{N \kappa_B T}$, amit könnyű belátni a $pV = N \kappa_B T$ állapotegyenlethelel is, $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{T, N}$

Kristály: Transzláció invariancia,

láthatólag $n_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \equiv n_2(|\underline{r}|) = \frac{1}{V} \sum_{i \neq j} \langle \delta(\underline{r} - \underline{R}_i + \underline{R}_j) \rangle$

$\Rightarrow n \int 4\pi r^2 g(r) dr = \frac{N}{V} \cdot \frac{n_2(r)}{\left(\frac{N}{V}\right)^2} = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} \int d^3r \langle \delta(\underline{r} - \underline{R}_i + \underline{R}_j) \rangle = N-1$
 $N(N-1)$ pár, \underline{R}_i és \underline{R}_j fix

$\Rightarrow n \int d^3r [g(r) - 1] = -1 \Rightarrow \kappa_T = 0$ az atomok helyben maradnak.

Fohradé-gáz: A kritikus pontban

$\kappa_T \rightarrow \infty$, mivel $\left. \frac{\partial p}{\partial V} \right|_{T=T_c} = 0$.



\Downarrow
 A részecske-hely-fluctuáció megnövekedés → kritikus opaleszcencia, zavartól ismétlődés a gátról.

Hogya lehet mérni $g(r) - t$?

49/6

bejövők
sík hullám



hört
hullám

$$\psi_{\underline{k}'}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}' \cdot \underline{r}}$$

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$$

Scattering potential $\sum_i u(\underline{r} - \underline{R}_i)$

→ itt van a
a középpont

Fermi-féle aránytalanság:

$$W_{\underline{k} \rightarrow \underline{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \underline{\epsilon}' | \sum_i u(\underline{r} - \underline{R}_i) | \underline{\epsilon} \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_{\underline{k}} - \epsilon_{\underline{k}'}),$$

$$\text{ahol } \langle \underline{\epsilon}' | \sum_i u(\underline{r} - \underline{R}_i) | \underline{\epsilon} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r \sum_i u(\underline{r} - \underline{R}_i) e^{i(\frac{\underline{k} - \underline{k}'}{\hbar}) \cdot \underline{r}} =$$

$$= \frac{1}{V} \sum_i \int d^3x u(\underline{x}) e^{i\underline{q} \cdot (\underline{x} + \underline{R}_i)} = \frac{u(\underline{q})}{V} \cdot \sum_{i=1}^N e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}_i}, \text{ és}$$

$$u(\underline{q}) = \int d^3r u(\underline{r}) e^{i\underline{q} \cdot \underline{r}} \text{ Fourier-transzformáció.}$$

$$\Rightarrow W_{\underline{\epsilon} \rightarrow \underline{\epsilon}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|u(\underline{q})|^2}{V^2} \underbrace{\left\langle \sum_{i,j} e^{i\underline{q} \cdot (\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \right\rangle}_{\text{struktúra faktorral kapcsolatos}} \cdot \delta(\epsilon_{\underline{k}} - \epsilon_{\underline{k}'})$$

Def: $S(\underline{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle e^{i\underline{q} \cdot (\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \rangle = N \delta_{\underline{q},0}$
 ↑ itt lehet $i=j$ is!!!
 levalasztjuk a direkt részt nyálkából.

Befüggés, hogy $S(\underline{q}) \leftrightarrow g(r)$ részt van kapcsolat.

$$g(r) = \frac{n_2(r)}{n_2} = \left(\frac{V}{N}\right)^2 n_2(r) = \frac{V}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle \delta(\underline{r} - \underline{R}_i + \underline{R}_j) \rangle =$$

$$= \frac{V}{N^2} \left[\sum_{i,j} \langle \delta(\underline{r} - \underline{R}_i + \underline{R}_j) \rangle - \sum_{i=j} \delta(\underline{r}) \right] = \frac{V}{N^2} \left[\sum_{i,j} \langle \delta(\underline{r} - \underline{R}_i + \underline{R}_j) \rangle - N \delta(\underline{r}) \right]$$

Vegyük a fenti explicit Fourier-transzformált! 50/a

$$\Rightarrow \frac{N}{V} \int g(r) e^{iqr} d^3r = \frac{1}{N} \int \left[\sum_{ij} \langle \delta(r - R_i + R_j) \rangle - N \delta(r) \right] e^{iqr} d^3r$$

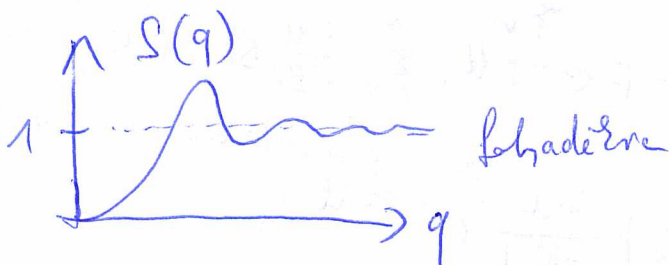
$$= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{ij} e^{iq(R_i - R_j)} \right\rangle - 1$$

$$\Rightarrow \frac{N}{V} \int [g(r) - 1] e^{iqr} d^3r = \frac{N}{V} \int g(r) e^{iqr} d^3r - N \delta_{q,0} =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle e^{iq(R_i - R_j)} \rangle - N \delta_{q,0} - 1$$

$S(q) := \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle e^{iq(R_i - R_j)} \rangle - N \delta_{q,0} =$

$$= 1 + \frac{N}{V} \int [g(r) - 1] e^{iqr} d^3r$$



$$S(q=0) = 0$$

$S(q)$ a $g(r)$ Fourier-transzformáltjaival van kapcsolásban.

hiszen $S(q) \approx \sum_{G} \delta(q - G)$
↑
 reciprokusvektor.

Szétintenzitás:

$$I(q = \underline{k}' - \underline{k}) \sim f(q) S(q) I_0 \rightarrow \text{bejöv}^o$$

↑
alakfaktor
(form factor)

↑
hővezetési tényező
(structure factor)

$$S(q) \leftrightarrow \mathcal{F}\{g(r)\} \leftrightarrow K_T$$

Kérdés: Az állapotegyenlet és $g(r)$ párharmelációs fv. kapcsolata

50/6

Keressük látható (46/a), hogy

$$p = \frac{Nk_B T}{V} \frac{\partial \ln Q_N}{\partial V}, \quad Q_N = \frac{1}{N!} \int d^3R e^{-\beta \sum_{i,j} u(R_{ij})}$$

A V -neként derül ki az

$R_i = \alpha x_i$ változótrafoval
 számolható (Lásd Kubo

↑ konfigurációs integrál
 R_i az atomok helye
 $u(R_{ij})$ párpotenciál

$$V = \int d^3R = \alpha^3 \int d^3x$$

Stat. mech. 1976
 360. oldal)

$$u(R_1, R_2, \dots, R_N) = \sum_{i,j} u(R_{ij})$$

$$Q_N = \frac{1}{N!} \int d^3R e^{-\beta u(R_1, \dots, R_N)} = \frac{\alpha^{3N}}{N!} \int d^3x e^{-\beta u(x_1, \dots, x_N)}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \ln Q_N}{\partial V} = \frac{\frac{\partial Q_N}{\partial V}}{Q_N} = \frac{1}{Q_N} \left(\frac{\partial Q_N}{\partial \alpha} \cdot \frac{\partial \alpha}{\partial V} \right) \Big|_{\alpha=1} = \frac{1}{3V Q_N} \cdot \frac{\partial Q_N}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=1} =$$

$$= \frac{1}{3V Q_N} \left(3N Q_N + \frac{1}{N!} \int -\beta e^{-\beta u} \cdot \sum_{i=1}^N \frac{\partial u}{\partial R_i} R_i d^3R \right) =$$

$$= \frac{N}{V} - \frac{\beta}{3V} \frac{1}{Q_N} \sum_{i,j} \int \frac{d^3R}{N!} \frac{1}{2} |R_{ij}| \frac{\partial u}{\partial R_{ij}} e^{-\beta u} =$$

$$= \frac{N}{V} - \frac{\beta}{6V} \sum_{i,j} \left\langle |R_{ij}| \frac{du}{d|R_{ij}|} \right\rangle = \frac{N}{V} - \frac{\beta}{6V} \left(\sum_{i,j} \langle \delta(r_1 - R_i) \delta(r_2 - R_j) |r_{12}| \frac{du}{dr_{12}} \rangle \right)$$

$$= \frac{N}{V} - \frac{\beta}{6V} \int V n_2(r_{12}) |r_{12}| \frac{du}{dr_{12}} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{N}{V} - \frac{\beta}{6} \int \left(\frac{N}{V} \right)^2 g(r_{12}) r \frac{du(r)}{dr} g(r) d^3r$$

$$\Rightarrow p = \frac{Nk_B T}{V} - \frac{\beta}{6} \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int r \frac{du(r)}{dr} g(r) d^3r$$

Fluktuáció - válassz (disszipáció) tétel

51/a

A fluktuáció ~ válassz en zűlső térre

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{B} \cdot F \quad \text{zűlső elektronos tér}$$

↑
dipólmomentum

\hat{A} a megfigyelt mennyiség

$$\chi_{AB} = \left. \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial F} \right|_{F=0}$$

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_e A_{ee} e^{-\beta E_e}}{\sum_e e^{-\beta E_e}} = \text{Tr} \left(\hat{\rho} \hat{A} \right), \quad \text{ahol} \quad A_{ee} = \langle e | \hat{A} | e \rangle$$
$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$$

Exetűnűben

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H_0 + \beta \hat{B} \cdot F} A]}{\text{Tr} e^{-\beta H_0 + \beta \hat{B} \cdot F}}$$

Klaszikus közelítés: A, B, H₀ felcserélhető

$$\chi_{AB} = \left. \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial F} \right|_{F=0} = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H_0} \beta A B) \text{Tr}(e^{-\beta H_0}) - \text{Tr}(e^{-\beta H_0} A) \text{Tr}(e^{-\beta H_0} B)}{(\text{Tr} e^{-\beta H_0})^2}$$

$$= \beta \left[\langle AB \rangle_0 - \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0 \right]$$

fluktuáció

G_{AB}: korrelációs mátrix

$$G_{AB} = \epsilon_B T \chi_{AB}$$

Fluktuáció - disszipáció tétel
időfüggő esetben
disszipáció

PL: $\uparrow \downarrow$ szétválasztási spin
 mágneses momentum $\mu_i = \pm \mu_B$ (51/b)

paramágneses állapotban $\langle M \rangle_0 = 0$

$$M = \sum_i \mu_i$$

↑
mágnesesség

$$G_{MM} = \langle M^2 \rangle_0 - \langle M \rangle_0^2 = \langle M^2 \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \mu_i^2 \right\rangle_0 + \sum_{i \neq j} \langle \mu_i \mu_j \rangle_0 = N \mu_B^2$$

$$\Rightarrow \chi = N \frac{\mu_B^2}{k_B T} \quad \text{Curie-törvény (lásd 41/b).}$$

Helyfüggő tér $\hat{H} = \hat{H}_0 - \int d^3 r' \hat{B}(r') F(r')$

$$\langle A(r) \rangle_{\text{lin}} \approx \langle A \rangle_0 + \int d^3 r' \chi_{AB}(r, r') F(r') + \dots$$

homogén: $\chi_{AB}(r-r')$

izotrop: $\chi_{AB}(|r-r'|)$

$$\chi_{AB}(r, r') = \frac{\delta \langle A(r) \rangle}{\delta F(r')} \underset{\text{elastikus}}{\approx} \frac{1}{k_B T} \left[\langle A(r) B(r') \rangle_0 - \langle A(r) \rangle_0 \langle B(r') \rangle_0 \right]$$

$G_{AB}(r-r')$

$G_{AB}(r-r') = k_B T \chi_{AB}(r-r')$

PL: $\underline{M}(r)$ mágnesesség

$$G(r, r') = \langle \underline{M}(r) \underline{M}(r') \rangle_0 - \langle \underline{M}(r) \rangle_0 \langle \underline{M}(r') \rangle_0$$

Spin polarizált neutron-szórás kísérletben mérhető

lef: $\chi_{AB} = \int d^3 r d^3 r' \chi_{AB}(r, r') = V \int \chi_{AB}(r) d^3 r = \frac{V}{k_B T} \int G_{AB}(r) d^3 r$

χ_{AB} nagy, ha hosszú távú szemelődés van! kritikus jelenségek

Transzláció invariáns rendszer:

52/a

$$\langle A(\underline{r}) \rangle_0 = A_0, \quad \langle B(\underline{r}') \rangle_0 = B_0 \quad \text{független a helytől}$$

és $\langle A(\underline{r}) B(\underline{r}') \rangle_0$ csak $\underline{r} - \underline{r}'$ távolságtól függ

$$\chi_{AB}(\underline{r} - \underline{r}') = \frac{1}{k_B T} G_{AB}(\underline{r} - \underline{r}') = \frac{1}{k_B T} [\langle A(\underline{r}) B(\underline{r}') \rangle_0 - A_0 B_0] \equiv \chi_{AB}(\underline{r} - \underline{r}')$$

Térben periodikus rülső léte adott lineáris válat:

$$F(\underline{r}) = F(q) e^{i q \underline{r}} \quad (\text{v-n für összevont lineáris kombinációja})$$

$$\begin{aligned} \langle A(\underline{r}) \rangle_{\text{lin}} &= \langle A \rangle_0 + \int d^3 r' \chi_{AB}(\underline{r} - \underline{r}') F(q) e^{i q \underline{r}'} = \\ &= \langle A \rangle_0 + F(q) e^{i q \underline{r}} \cdot \int d^3 (\underline{r} - \underline{r}') \chi_{AB}(\underline{r} - \underline{r}') e^{-i q (\underline{r} - \underline{r}')} \end{aligned}$$

$\tilde{\chi}_{AB}(q)$ Fourier-transzformáltja

$$\Rightarrow \langle A(\underline{r}) \rangle_{\text{lin}} = A_0 + \tilde{\chi}_{AB}(q) F(q)$$

$\chi_{AB}(\underline{r} - \underline{r}')$ -nek

$$i\text{gy} \quad \tilde{\chi}_{AB}(q) = \frac{1}{k_B T} \int \underbrace{[\langle A(\underline{s}) B(\underline{0}) \rangle_0 - A_0 B_0]}_{G_{AB}(\underline{s})} \underbrace{e^{-i q \underline{s}} d^3 \underline{s}}_{\tilde{G}_{AB}(q)}$$

Homogén esetben $q=0$, $F(\underline{r}) = \text{const}$

$$\tilde{\chi}_{AB}(q=0) = \int d^3 r \chi_{AB}(\underline{r}) = \frac{1}{k_B T} \tilde{G}(q=0) = \frac{1}{k_B T} \int G_{AB}(\underline{r}) d^3 r$$

hat

$$\chi_{AB} = \int d^3r d^3r' \chi_{AB}(r-r') = \frac{V}{\epsilon_B T} \int G_{AB}(r) d^3r$$

ahogy ezt láttuk 51/b oldalon.

Kiegészítés: Curie-törvény más levezetése
 Suszeptibilitás magashőmérsékletű sorfejtése (Ising-modell)

$$e^{\beta E} \approx 1 - \beta E, \text{ ha } \beta E \ll 1, T \gg T_c$$

a) Veretekend: $e^{\beta E} \approx 1$ $\chi(T) = \frac{1}{\epsilon_B T} \sum_{ij} [\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle]$

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_{\{S_i\}} S_i e^{-\beta H}}{\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H}} \approx \frac{\sum_{\{S_i\}} S_i}{\sum_{\{S_i\}} 1} = 0$$

$$\langle S_i S_j \rangle \approx \frac{\sum_{\{S_i\}} S_i S_j}{\sum_{\{S_i\}} 1} = \delta_{ij} \cdot 1 \rightarrow \chi(T) = \frac{1}{\epsilon_B T} \sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle = \frac{N}{\epsilon_B T}$$

b) Elsorend: $\langle S_e \rangle \approx \frac{\sum_{\{S_i\}} S_e [1 + \beta J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j]}{\sum_{\{S_i\}} 1} \approx J \sum_{\{S_i\}} S_e (\sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j) = 0$

$$\langle S_e S_k \rangle \approx \sum_{\{S_i\}} S_e S_k [1 + \beta J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j] = \delta_{ek} + \beta J \sum_{\{S_i\}} \begin{matrix} S_e^2 & S_k^2 \\ \parallel & \parallel \\ 1 & 1 \end{matrix} \delta_{ei} \delta_{kj}$$

$$= \delta_{ek} + \beta J \delta_{ei} \delta_{kj}$$

$$\chi(T) = \frac{1}{\epsilon_B T} \sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle = \frac{N}{\epsilon_B T} \left(1 + \frac{zJ}{\epsilon_B T} \right) \approx \frac{\frac{N}{\epsilon_B T}}{1 - \frac{zJ}{\epsilon_B T}} = \frac{N}{\epsilon_B T - zJ}$$

$$\Rightarrow \chi(T) = \frac{N}{\epsilon_B (T - T_c)}, \quad T_c = \frac{zJ}{\epsilon_B}$$

Fázisátalakulások termodinamikai leírása:

53/a

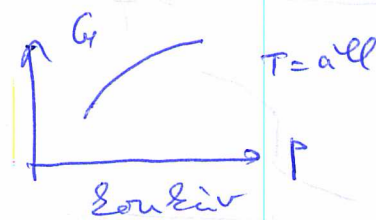
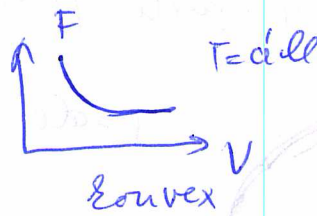
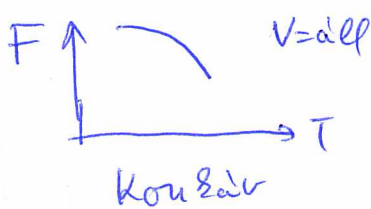
gázokra; $N = \text{rögzített}$

$F(T, V) = E - TS$; $dF = -SdT - pdV$

$G(T, P) = E - TS + pV$; $dG = -SdT + Vdp$

$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial F}{\partial T}|_V = -S < 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}|_V = -\frac{\partial S}{\partial T}|_V = -\frac{1}{T} C_V < 0 \\ \frac{\partial F}{\partial V}|_T = -P < 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 F}{\partial V^2}|_T = -\frac{\partial P}{\partial V}|_T = \frac{1}{V\kappa_T} > 0 \end{cases}$

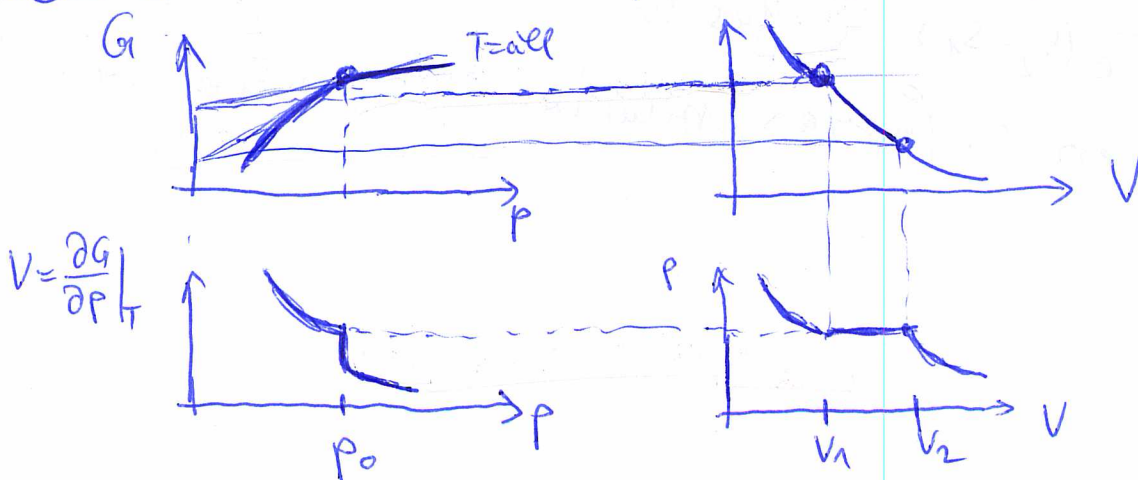
$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial G}{\partial T}|_P = -S < 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 G}{\partial T^2}|_P = -\frac{\partial S}{\partial T}|_P = -\frac{C_P}{T} < 0 \\ \frac{\partial G}{\partial P}|_T = V > 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 G}{\partial P^2}|_T = \frac{\partial V}{\partial P}|_T = -V\kappa_T < 0 \end{cases}$



F és G folytonos függvények, de deriváltjai rendelkezhetnek singularitásokkal.

a) Első deriváltak ugrásai:

$F = G - pV = G - P \frac{\partial G}{\partial P}|_T$



$P = -\frac{\partial F}{\partial V}|_T$

$V-p$ fv. $\Rightarrow V_1$ és V_2 -nél átvonás a p_0 nyomás | 53/6

$\Rightarrow F(V)$ a V_1 és V_2 között egyenes

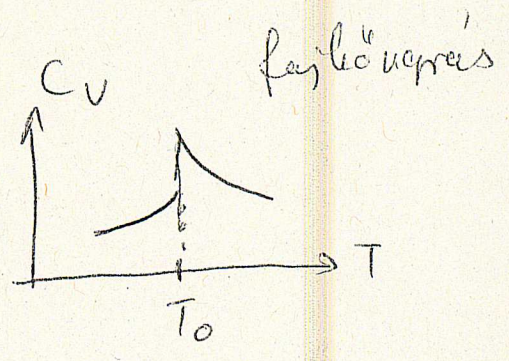
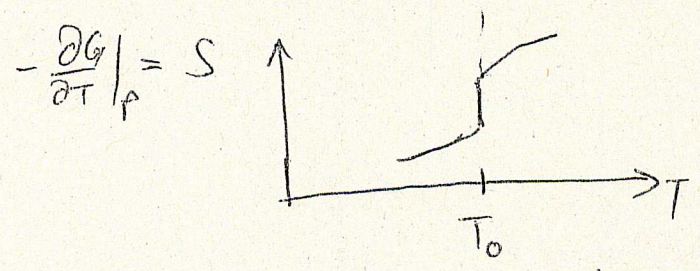
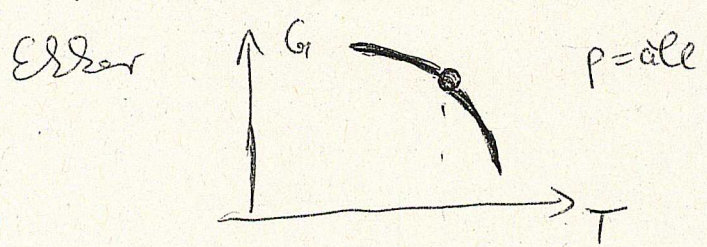
A p_0 nyomásnál két fázis van jelen \rightarrow fázisátalakulás
 Általában is igaz, hogy átörben a pontokban történik
fázisátalakulás, ahol a termodinamikai potenciálok
nem analitikus függvények.

1. rendű : Ha az 1. deriváltak nem folytonosak

2. rendű : Ha a 2. vagy magasabb rendű deriváltak
 nem folytonosak.

(folytonos fázisátalakulás) Gyakorlatban a 2. deriváltban nem analitikus
 termodinamikai potenciálok jelentősek.

A fenti ábra a 1. rendű fázisátalakulást mutatja le.

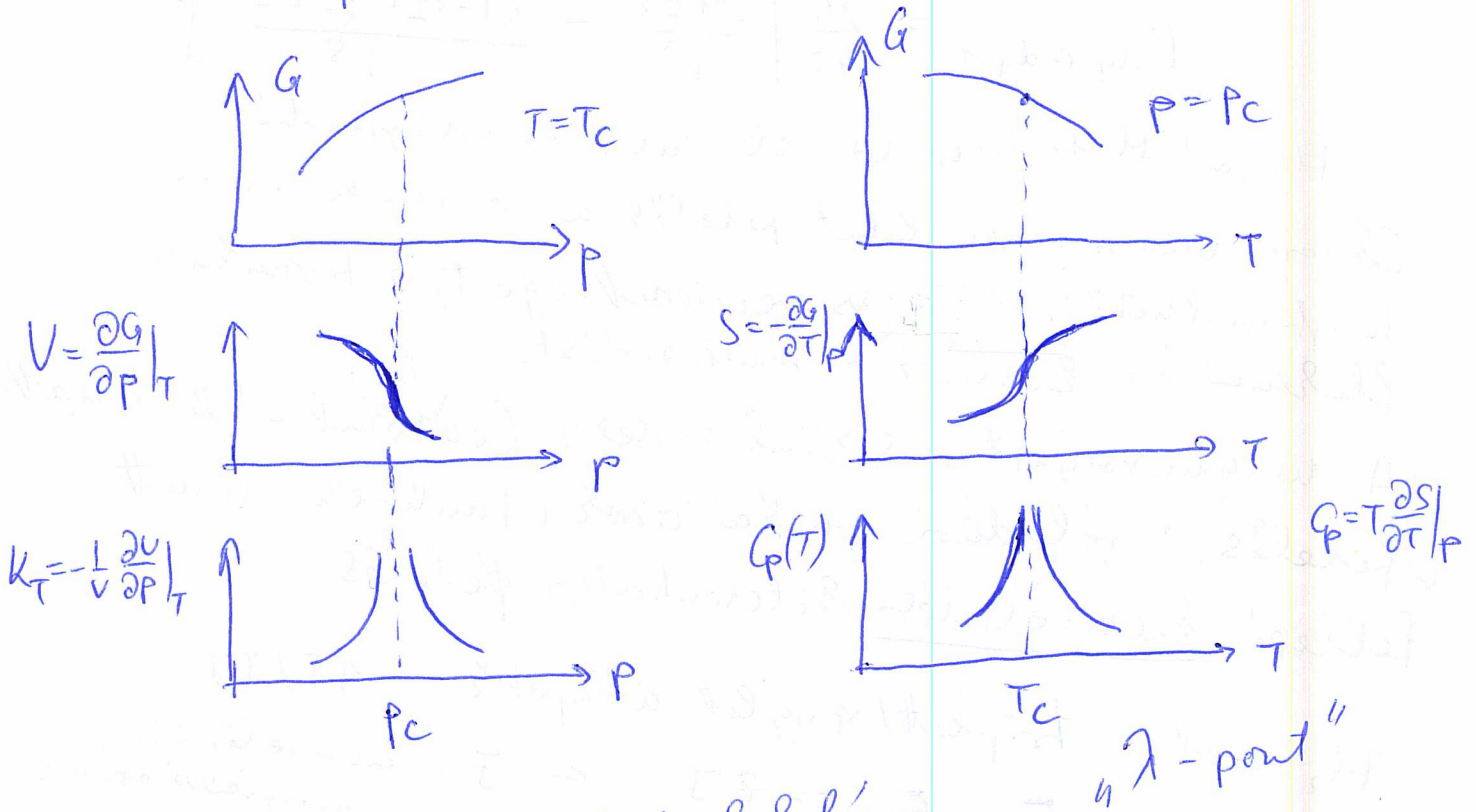


$T_0 (S_2 - S_1) = \text{latens hő}$

pl.: forrás, párologás, miltádképzésben képződő átmenetek.

b) 2. rendű fázisátalakulás

Általában az 1. deriváltak függvényes érintőjű inflexiós pontja van.



1. rendű folyadék-gáz átalakulás:

Van der Waals $\left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - bn) = Nk_B T$



folyadék \leftrightarrow gáz: atomos szimmetriájú fázisok
 (izotróp) \Rightarrow 2. rendű, helytoros f.átalakulás

folyadék - szilárd: szubsztanciák szimmetriájú fázisok
 (izotróp \leftrightarrow rácsvesztés)
 \Rightarrow 1. rendű fázisátalakulás

Pl. Mágneses rendszerek

Atom mágneses momentumok között mindig van dipól-dipól sz.

$$\mu_{\text{dipól-dipól}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\mu_1 \mu_2}{r^3} - \frac{3(\mu_1 \cdot \underline{r})(\mu_2 \cdot \underline{r})}{r^5} \right]$$

Megmutatható, hogy ez kb. meV nagyságrendű. Ez az energia nem lehet felelős a ~100K-en is megfigyelhető mágneses rendezettségért, a termikus fluktuációk zölnél a rendeződést.

A mágnességért a sokkal erősebb Coulomb- és Pauli-elv miatt de csak kvantummechanikai okok (Pauli-elv) miatt felelős szűréselődés kölcsönhatás felelős.

H₂ mol. triplett/singlett állapotok ↑↑/↑↓
 $E_t - E_s = -J \leftarrow J$: szűréselődés energia

Dirac mome. \hat{H} Hamilton-op. leképezhető egy effektív \hat{H} -op.-ra (a sajátértékek atomosak).

S_1 és S_2 két 1/2 spin. $S^2 \rightarrow s.d. = S(S+1)$
 $|\frac{1}{2}\rangle \oplus |\frac{1}{2}\rangle \rightarrow S=1, \uparrow\uparrow$
 $\rightarrow S=0, \uparrow\downarrow$

$$(S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$$

$\begin{matrix} / & \backslash \\ 0.1 & 1.2 \end{matrix}$
 $\begin{matrix} \uparrow & \uparrow \\ \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) & \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) \end{matrix}$
 $\Rightarrow S_1 \cdot S_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4}, \uparrow\downarrow, \text{singlett} \\ \frac{1}{4}, \uparrow\uparrow, \text{triplett} \end{cases}$

$\hat{H} = -J \cdot S_1 \cdot S_2 + \text{const}$

$\Rightarrow E_t - E_s = -J$

Heisenberg - modell :

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - g_e \mu_B \underline{B} \sum_i \hat{S}_i^z$$

első tagoknál

$$S^z = -S, -S+1, \dots, S-1, S$$

Klasszikus/
kvantum tárgyalás

$$g_e \approx -2$$

Kristályban erős anizotrópia van?

$$\underline{S}_i \cdot \underline{S}_j \Rightarrow S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z$$

↑
anizotrópia

$\Delta > 1$: S^z komponens erősen csatolt a \underline{B} térhez.

$\Delta < 1$: S^x, S^y komponensek csatolódnak a \underline{B} térhez, XY-modell

triviális eset: csak S^z csatolódik \Rightarrow Ising-modell

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \quad \text{és} \quad S_i \rightarrow \pm 1/2 \text{ spin}$$

Klasszikusan:

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1$$

→ Redukció: ↑ H ↑ S_i

$J > 0$: ferromágnes, alapállapot (T=0)

↑↑↑↑ vagy ↓↓↓↓

$J < 0$: antiferromágnes, alapállapot

↑↓↑↓ vagy ↓↑↓↑

• Az alapállapot szimmetriasértő = rendezett fázis

• Magas hőmérsékleti állapot ($k_B T \gg |J|$) = szimmetrikus = rendezetlen

Közben valahol „megszűnik” a szimmetria

55/6

\Rightarrow Fázisátalakulás, $T = T_c$ -nél.

Neu triviális jelenség, ha $k_B T_c \neq 0$, véges hőmérsékleten változik a rendszer szimmetriája.

Atlagter-elmélet (Mean field theory, Weiss, 1907):

pl. Ising-modell, homogén: $m = \langle S_i \rangle$

Mágnesesség: $M = \langle \sum_i S_i \rangle$,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i$$

$$S_i S_j = (\underbrace{S_i - m + m}_{S_i - m + m}) (\underbrace{S_j - m + m}_{S_j - m + m}) = + m^2 + m(S_i - m) + m(S_j - m) + \cancel{(S_i - m)(S_j - m)}$$

$$\Rightarrow S_i S_j \approx -m^2 + m S_i + m S_j$$

fluktuációkat konstansként elhanyagoljuk

$$\mathcal{H} \approx + J m^2 \frac{q}{2} N - J m \sum_{\langle ij \rangle} S_i - J m \sum_{\langle ij \rangle} S_j - H \sum_i S_i =$$

q : koordináták száma

$$- J m \frac{q}{2} \sum_i S_i \quad - J m \frac{q}{2} \sum_i S_i$$

$$= + J m^2 \frac{q}{2} N - (J m q + H) \sum_i S_i$$

H_{eff} effektív, átlagter

Állapotösszeg:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\frac{1}{2} \beta J m^2 q N} \cdot e^{\beta H_{\text{eff}} \sum_i S_i} =$$
$$= \dots = e^{-\frac{1}{2} \beta J m^2 q N} \cdot [2 \text{ch}(\beta H_{\text{eff}})]^N$$

$$\ln Z = N \left\{ -\frac{1}{2} \beta J m^2 q + \ln 2 + \ln \text{ch}(\beta H_{\text{eff}}) \right\}$$

$$M = \langle \sum_i S_i \rangle = N \langle S_i \rangle = N \cdot m =$$

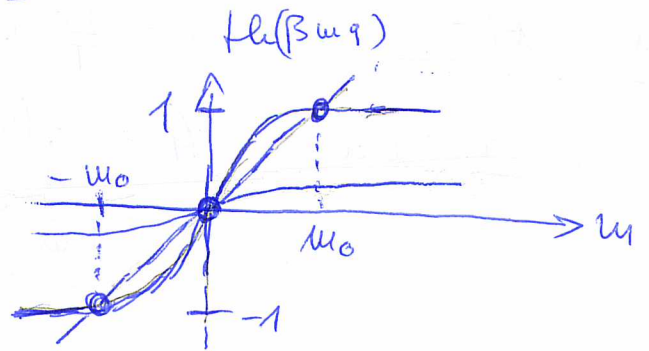
$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \left(\sum_i S_i \right) e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \left(\sum_i S_i \right) e^{-\frac{1}{2} \beta J m^2 N + \beta H_{\text{eff}} \sum_i S_i}$$

$$= \frac{\partial}{\partial (\beta H_{\text{eff}})} \ln Z = N \text{th}(\beta H_{\text{eff}})$$

$$\Rightarrow m = \text{th}[\beta (J m q + H)]$$

a) Legyen $H=0$

$$m = \text{th}(\beta J m q)$$



$T = T_c$: rendezettség = 1

$$\beta_c J q = 1 \Rightarrow T_c = \frac{J q}{k_B} : \text{Kritikus hőmérséklet}$$

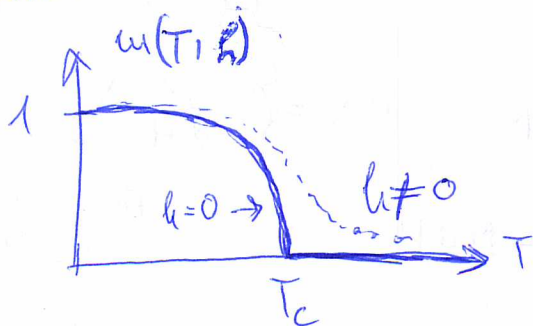
$T > T_c$: $m=0$ stabil megoldás

$T < T_c$: $m=0$ (instabil), $m = \pm m_0$ stabil megoldás

b) $H \neq 0$ $m = \text{th}(\beta J m q + h)$, $h = \beta H$ jelöléssel

" állapot egyenlet : $H(m, T) = H$

Rögzített h mellett $m(T)$ függés



m : rendezettség a rendezettséget jellemzi

\rightarrow Az előbb triviális $m \rightarrow -m$ tükrözésre

Állapot-egyenlet $\beta T_c = J q \rightarrow$

$$m = \text{th}\left(\frac{T_c}{T} m + h\right)$$

• Hogy függ $m(T)$ T_c körül, $h=0$ esetén? 56/b
 $T \rightarrow T_c - 0^+$, $m \rightarrow 0$ (szűk), sűrűség

$$h \approx x - \frac{1}{3}x^3 + \dots; \quad x \ll 1$$

$$m = \frac{T_c}{T} m - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} m \right)^3 + \dots$$

$$m \neq 0 \text{ és } T < T_c \implies m \sim \sqrt{T_c - T} = (T_c - T)^{1/2} \text{ hatványfüggés!}$$

• Ha $H \neq 0$: $m = \frac{T_c}{T} m + h - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} m + h \right)^3 + \dots$

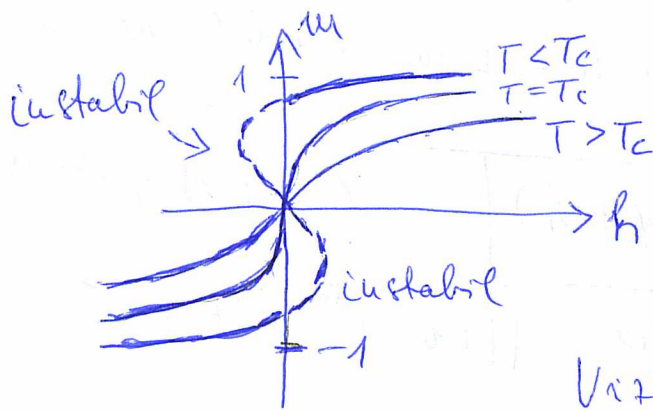
$T = T_c$ -nél $h = \frac{1}{3} (m+h)^3$, $h \ll 1 \implies h \approx \frac{1}{3} m^3$

$$\implies \boxed{m \sim h^{1/3}} \text{ , ha } T = T_c \text{ és } h \ll 1$$

hatványfüggés!

Nagypolitikai keretben az állapotegyenlet ~~széles~~ numerikus megoldása.

$$m = h \left(\frac{T_c}{T} m + h \right) \implies h = -\frac{T_c}{T} m + \frac{1}{2} h \frac{1+m}{1-m}$$



$T < T_c$ -nél lehetnek instabil megoldások

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} < 0 \text{ negatív sűrűséghatékonyság!}$$

Vizsgáljuk meg a termodinamikai potenciálokat!

Leopold \rightarrow intenzív $G(T, H) = -k_B T \ln Z$

analóg \rightarrow extenzív $G(T, H) \leftrightarrow G(T, P)$

$$\implies E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \text{ és } M = \langle \sum_i S_i \rangle = \left\langle -\frac{\partial \ln Z}{\partial H} \right\rangle = -\frac{\partial G(T, H)}{\partial H} \Big|_T$$

$$dG(T, H) = -SdT - MdH$$

Feynman-Hellman (23(a) oldal)

szabadenergia: Legendre-transzformáció

$$F(T, M) = G + MH \text{ és } dF(T, M) = -SdT + HdM$$

Analóg \rightarrow extenzív $F(T, V)$

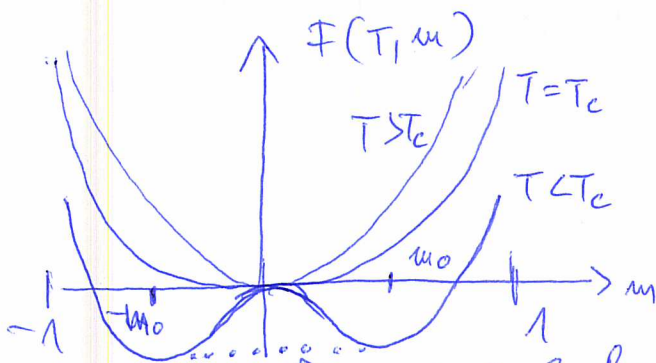
Künnens belátható, hogy

(57/a)

$$\frac{F(T, m)}{N F} = -\frac{1}{2} q m^2 - \frac{T}{T_c} q \left\{ \ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1-m^2) - \frac{m}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \right\}$$

(Felhasználjuk, hogy $h = -\frac{T_c}{T} m + \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m}$)

és $dh^2 \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} = \frac{1}{1-m^2}$ arányosságát)



$F(T, m)$ szerkesztése T_c körül

$$F(T, m) \sim (T - T_c) m^2 + \frac{T_c}{2} m^4 - m h + \text{const}$$

stabil helyzet: két fázis van egyensúlyba, $\pm m_0 \Rightarrow$
 \Rightarrow doméngészítés

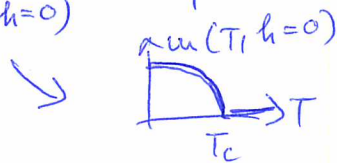
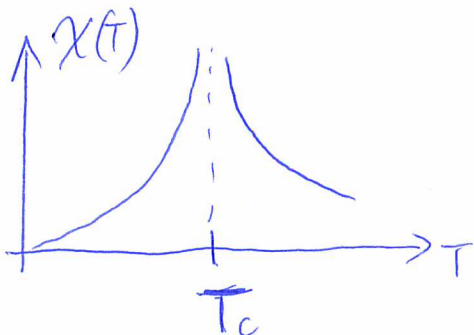
Suszeptibilitás:

$$\chi(T) = \frac{\partial m}{\partial h} \Big|_{h=0} = ? \quad m = h \left(\frac{T_c}{T} m + \frac{1}{2} \right)$$

$$\frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{dh \left(\frac{T_c}{T} m + \frac{1}{2} \right)} \cdot \left(\frac{T_c}{T} \frac{\partial m}{\partial h} + 1 \right) \xrightarrow{h=0} (1-m^2) \left(\frac{T_c}{T} \frac{\partial m}{\partial h} + 1 \right)$$

$$\frac{1}{dh^2 x} = 1 - h^2 x^2$$

$$\Rightarrow \chi(T) = \frac{\partial m}{\partial h} \Big|_{h=0} = \frac{1}{1 - m^2(T, h=0)} - \frac{T_c}{T}$$



$T = T_c$ -nél $\chi(T)$ szinguláris!

$$T > T_c \text{ -re } m(T, h=0) = 0$$

57/b

$$\chi(T) = \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}} \quad \downarrow \begin{matrix} T \\ T_c \end{matrix} \rightarrow \infty$$

Mivel χ a korrelációs fun. integrálja,
 $\chi \rightarrow \infty$ a fluktuációk növekedését jelenti \Rightarrow
 \Rightarrow az átlagértékelmelet T_c körül inkoheritenseé
 válik (hiszen ebben az elméletben éppen a fluktuációkat
 bizonyítjuk el).

Kiegészítés: $F(T, m)$ levezetése (57/a oldalán felül alár)

55/b oldalán kiindultunk az $\ln Z \Rightarrow$

$$G(T, H) = -k_B T \ln Z = N k_B T \left\{ \frac{1}{2} \beta J m^2 q - \ln 2 - \ln \text{ch}(\beta J m q + H) \right\}$$

$$\Rightarrow \frac{G}{N J} = \frac{1}{2} m q^2 - q (\ln 2) \cdot \frac{T}{T_c} - \frac{T}{T_c} q \ln(\text{ch}(\frac{T_c}{T} m q + h))$$

$$T_c = \frac{J q}{k_B}$$

$$m = M/N$$

$$F(T, M) = G + M \cdot H = N J \left(\frac{G}{N J} + \frac{M H}{N J} \right) \Rightarrow$$

$$\frac{F}{N J} = \frac{G}{N J} + m \frac{H}{J} = \frac{G}{N J} + m \frac{T}{T_c} q \cdot h = \text{beírva a fenti } G\text{-t}$$

$$= \frac{1}{2} m q^2 - \frac{T}{T_c} q \left\{ \ln 2 + \ln(\text{ch}(h + m \frac{T_c}{T})) - m h \cdot q \right\} =$$

$$= \frac{1}{2} m q^2 - \frac{T}{T_c} q \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2} \ln(\text{ch}^2(\frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m})) - m \left(-\frac{T_c}{T} m q + \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \right) \right\} =$$

felhasználjuk a $\ln \text{ch}^2$ -re $m = \frac{1}{2} \ln(\beta J m q + h)$
 egyenletből $h = -\frac{T_c}{T} m + \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m}$

Azonosság:

$$\text{ch}^2 \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} = \frac{1}{1-m^2}$$

Végül:

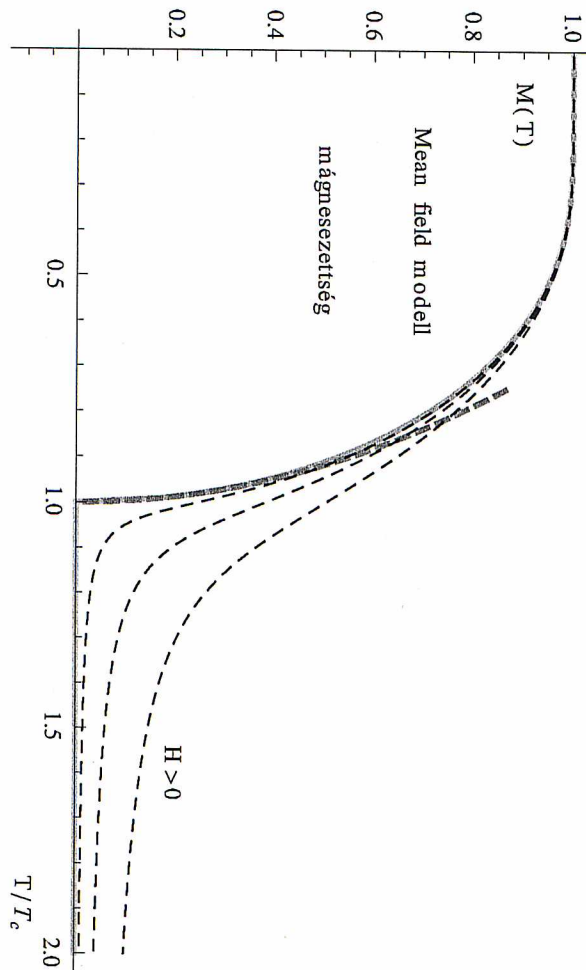
$$F(T, m) = - \frac{1}{2} m q^2 - \frac{T}{T_c} q \left\{ \ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1-m^2) - \frac{m}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \right\}$$

Mean field

Mágnesezettség T függvényében
 H rögzített

$$M = \langle \sum_i S_i \rangle = N \cdot m$$

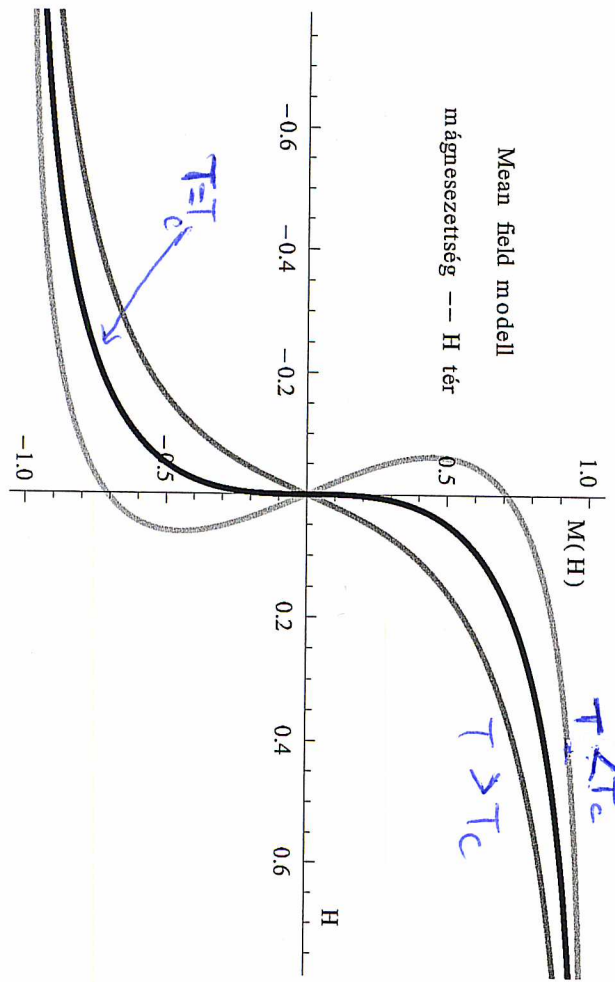
homogén: $m = \langle S_i \rangle$



$m \sim (T_c - T)^{1/2}$ a T_c körül, $T < T_c$ esetén
 $m = 0$, ha $T > T_c$

Mean field

$M(H)$ függés rögzített T mellett



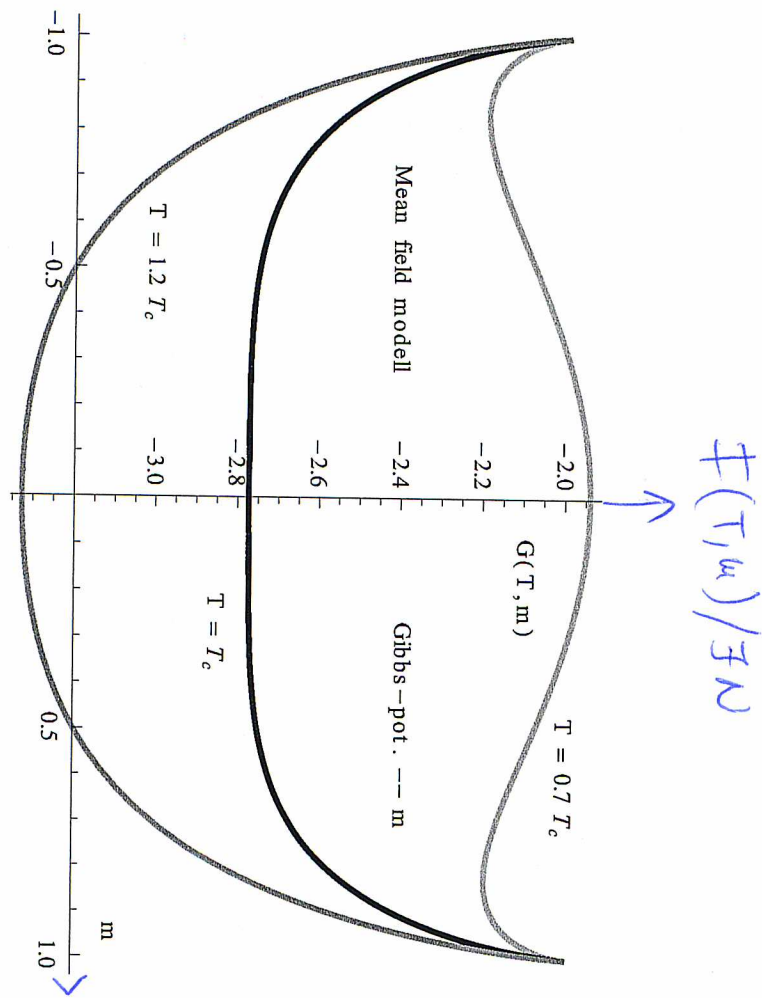
$$h = -\frac{T_c}{T} m + \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \quad \text{alapjén átalakítás}$$

57/e

Mean field

$F(T, M)$ Nabadenergia
zilübütö T -re, $H=0$ erlben

$$M = N \cdot m$$



$$G(T, H) = -k_B T \ln Z \Rightarrow M = \langle \sum_i s_i \rangle = \left\langle -\frac{\partial \ln Z}{\partial H} \right\rangle = -\frac{\partial G}{\partial H} \Big|_T$$

$$\Rightarrow dG(T, H) = -S dT - M dH$$

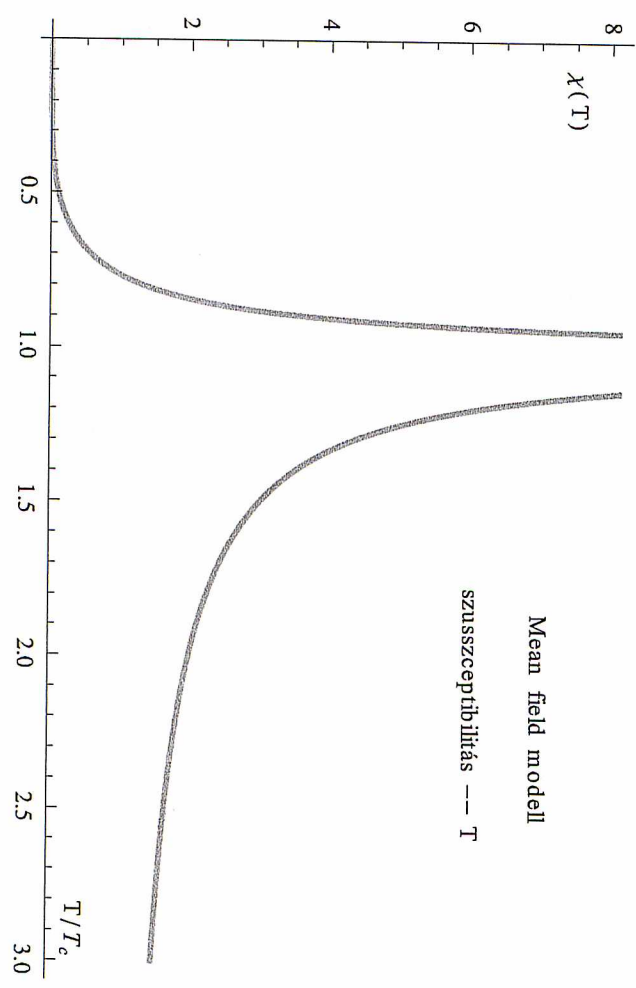
$$\Rightarrow F(T, M) = G - (-M)H = G + MH$$

$$\Rightarrow dF(T, M) = -S dT + H dM$$

Mean field

Szusszeptibilitás T függése, H=0

$$\chi(T) \sim |T - T_c|^{-1} \quad T_c \text{ körül
singuláris}$$



$$\chi(T) = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0, T} \sim \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0, T}$$

Fázisátalakulások Landau-elmélet:

58/a

Landau, 1937, fenomenológus elmélet.

Rend jellemzése \rightarrow rendparaméter, M

híziái jelentése függ az átalakulás jellegétől

Mágneses rendmerékben ferromágneses esetben a mágnesesség, antiferromágnesnél az abszolút mágnesesség.

Landau feltételei, 2. rendű fázisátalakulás leírására:

- 1) A fázisátalakulás folytonos, M rendparaméter $M(T)$ folytonos $T < T_c$ és $T > T_c$ -re $M=0$.
- 2) $F(T, M)$ szabadenergia nem egyszerű, azaz M nem egyszerű értékre is értelmezhető $F(T, M)$ -et M egyszerű értéket $F(T, M)$ minimuma határozza meg.
- 3) $F(T, M)$ analitikus, sorbafesthető M -szerint.
- 4) A sorbafestési együtthatók T -vel analitikus függvényei.

$$F(T, M) = F_0(T, 0) + \alpha(T - T_c) M^2 + b M^4 - H \cdot M$$

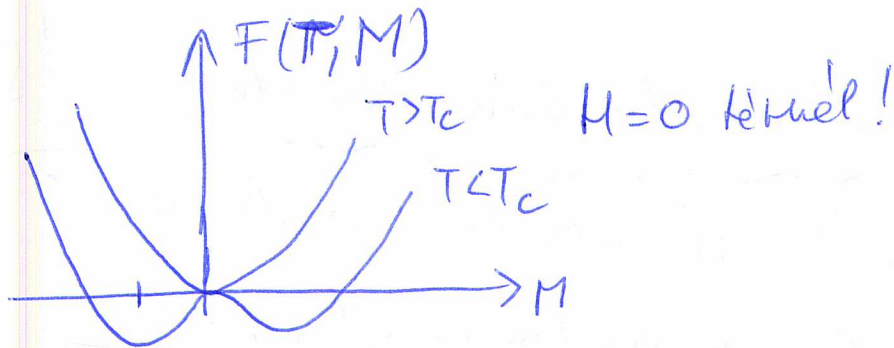
\uparrow külső tét

Nincs M és M^3 -ös tag!

\uparrow nem írna le fázisátalakulást $T = T_c$ -nél

\uparrow nem lenne folytonos F minimum helye T -vel.

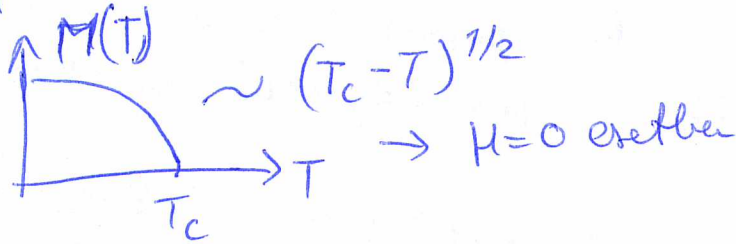
Mágneses átalakulásoránál $S_i \rightarrow -S_i$ szimmetria miatt hidrogénhez esik a tagok.



58/6

• Magneseszerettség, M :

$$0 = \frac{\partial F}{\partial M} = 2\alpha(T - T_c)M + 4bM^3 \rightarrow \begin{cases} M=0, T > T_c \\ M = \sqrt{\frac{\alpha}{2b}(T_c - T)}, T < T_c \end{cases}$$



• Suszeptibilitás, $H \neq 0$

$$2\alpha(T - T_c)M + 4bM^3 - H = 0$$

$T > T_c$: $M(H=0) = 0$, M^3 elhanyagolható!

$$M = \frac{1}{2\alpha(T - T_c)} H \Rightarrow \chi = \frac{1}{2\alpha(T - T_c)}$$

$$T < T_c: \chi^{-1} = \frac{\partial H}{\partial M} = 2\alpha(T - T_c) + 12bM^2 =$$

$$= 2\alpha(T - T_c) - 6\alpha(T - T_c) = 4\alpha(T_c - T) - \frac{\alpha}{2b}(T_c - T)$$

$$\Rightarrow \chi = \frac{1}{4\alpha(T_c - T)}, \text{ ha } T < T_c$$

így

$$\chi \propto |T - T_c|^{-1}$$

• Kritikus izoterma, $T = T_c$ / $H \neq 0$

$$4bM^3 = H \Rightarrow M \propto H^{1/3}$$

• fejsho⁴ $H=0$ (analóg a gátörvénnyel, C_p) $[5 \text{ g/a}]$

$$C_{H=0}(T) = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{H=0} = -T \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_{H=0}$$

$$F(T, M) = F_0(T, M=0) + \alpha(T-T_c)M^2 + bM^4$$

$T < T_c$ »

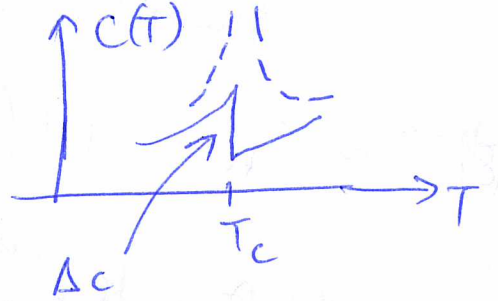
$$C_{H=0} = C(M=0) - T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[\alpha(T-T_c) \frac{\alpha(T_c-T)}{2b} + b \left(\frac{\alpha(T_c-T)}{2b} \right)^2 \right]$$

$T > T_c$: csak
erő marad

$$= C_0(T) + T_c \underbrace{\frac{\alpha^2}{2b}}_{\Delta C}$$

fejshővel ugrás van!

$$-\frac{\alpha^2}{4b}(T_c-T)^2, \text{ ha } T < T_c$$



Méretek?

$$\frac{T-T_c}{T_c} \equiv t$$

elvetés T_c -től
dimenziótlan

$$t < 0: M \propto |t|^\beta$$

$$\chi \propto |t|^{-\gamma}$$

$$t=0: M \propto H^{1/\delta}$$

$$H=0: C \propto |t|^{-\alpha}$$

Landau	mérés
$\beta = 1/2$	0.3 - 0.4
$\gamma = 1$	1.2 - 1.4
$\delta = 3$	4 - 5
$\alpha = 0$ (ugrás)	$0 < \alpha < 0.2$

↓
Zdim / sug: $C \sim -\ln|t|$

A Landau-elmélet nem jó!
 α méretek kerint!

Átalában: $\text{exponens} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{d \ln f(t)}{d \ln t}$

• Ha $f(t) \sim t^a \Rightarrow \text{exponens} = a$

• Ha $f(t) \sim \ln t \Rightarrow \text{exponens} = 0$

Logaritmius singularitás \Leftrightarrow
exponens = 0

Az exponensek között egyenlőségek vezethetők le a termodinamikából.

p-l: Rushbrooke-egyenlőség:

$$\alpha + 2\beta + \delta \geq 2$$

gáztörvény: $C_p - C_v = \frac{TV\alpha^2}{k_T} \leftrightarrow$ analog $-p \leftrightarrow H$
 $V \leftrightarrow M$ $\alpha = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_p$

udques: $C_u - C_M = TV \left(\frac{\partial M}{\partial T} \Big|_H \right)^2 \chi^{-1}$

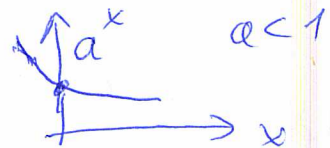
$C_H \sim |t|^{-\alpha}$
 $M \sim |t|^\beta$
 $\chi \sim |t|^{-\gamma}$

stabilitás miatt: $C_M > 0 \Rightarrow$

$|t|^{-\alpha} \sim C_H > TV \left(\frac{\partial M}{\partial T} \Big|_H \right)^2 \chi^{-1} \sim T |t|^{2\beta - 2 + \gamma}$

azaz $|t|^{-\alpha} > |t|^{2\beta - 2 + \gamma}$

és $|t| \ll 1$



$\Rightarrow -\alpha \leq 2\beta - 2 + \gamma$

$$\Rightarrow \alpha + 2\beta + \delta \geq 2$$

Más egyenlőségek is levezethetők:

p-l: Josephson: $dV \geq 2 - \alpha$

ahol $\xi \sim |t|^{-\nu}$

és a korrelációs hossz-exponens.

Kiderül, hogy a mérték szerint az egyenlőségek nagy pontossággal egyenlőségek!
 Kritikus jelenségek általános elmélete alapján (RG) ez bizonyítható.

$$\gamma = \beta(\delta - 1)$$

$$\alpha + 2\beta + \delta = 2$$

(Widom)
 (Rushbrooke)

Landau-elmélet létezőtől is inhomogén
magnesezterre, Ginzburg-Landau-elmélet)

60/a

$$F(T, M) = F(T, M=0, H) + \int d^3r \left\{ \alpha(T-T_c) m^2(r) + b m^4(r) + c [\text{grad } m(r)]^2 - H(r) m(r) \right\}$$

\uparrow inhomogenitási szabadenergia
 $H=0$ esetén homogén $m(r)$.

F minimalitása adott $H(r)$ esetén: $m(r) \rightarrow m(r) + \delta m(r)$; $\delta F = 0$

$$\delta F = \int d^3r \left\{ 2\alpha(T-T_c) m(r) \delta m(r) + 4b m^3(r) \delta m(r) - H(r) \delta m(r) + 2c \text{grad } m(r) \text{ grad } \delta m(r) \right\}$$

$$\text{div}(\text{grad } m(r) \delta m(r)) - \Delta m(r) \delta m(r)$$

$$\int d^3r (\dots) = 0$$

192

$$\delta F = \int d^3r \left\{ \underbrace{2\alpha(T-T_c) m(r) + 4b m^3(r) - 2c \Delta m(r) - H(r)}_{=0} \right\} \delta m(r) = 0$$

$$\Rightarrow \Delta m(r) - \frac{1}{\xi^2} m(r) - \frac{2b}{c} m^3(r) = -\frac{1}{2c} H(r)$$

G-L
egyenlet

ahol $\xi = \left[\frac{\alpha(T-T_c)}{c} \right]^{-1/2} \rightarrow$ korrelációs hossz.

Ez a Ginzburg-Landau-egyenlet.

Általában: $\xi \sim |T|^{-\nu}$, Landau: $\nu = 1/2$
 kísérlet: $\nu \approx 0.6 - 0.7$

$\xi \xrightarrow{T \rightarrow T_c} \infty$ hosszitávú korrelációk T_c körül!!

$T > T_c$: $m(\underline{r}) \sim H$, $m^3 \sim H^3$ elhanyagolható, (60/b)
 ha H gyenge tér.

Első

$$\Delta m(\underline{r}) - \frac{1}{\xi^2} m(\underline{r}) = -\frac{1}{2c} H(\underline{r})$$

Suszeptibilitás: (51/b oldal) $m(\underline{r}) = \int d^3 r' \chi(\underline{r}-\underline{r}') H(\underline{r}')$

Legyen $H(\underline{r}) = \delta(\underline{r})$, ekkor $m(\underline{r}) = \chi(\underline{r})$

Igy a Ginzburg-Landau-egyenlet megoldása $m(\underline{r})$ -re

$H(\underline{r}) = \delta(\underline{r})$ szintén tér esetén éppen $\chi(\underline{r})$ -t adja.

$$\Delta m(\underline{r}) - \frac{1}{\xi^2} m(\underline{r}) = -\frac{1}{2c} \delta(\underline{r}) \quad \text{Green-fu } m(\underline{r})$$

Fourier transzformáció:

$$\chi(\underline{r}) \equiv m(\underline{r}) = \frac{1}{8\pi c} \frac{e^{-r/\xi}}{r} \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}} \quad \begin{array}{l} d: \text{dimenzió} \\ \text{Yukawa-fu.} \end{array}$$

Korrelációs fu. (51/b):

$$G(\underline{r}-\underline{r}') = \langle m(\underline{r}) m(\underline{r}') \rangle - \langle m(\underline{r}) \rangle \langle m(\underline{r}') \rangle = \\ = k_B T \chi(\underline{r}-\underline{r}')$$

Igy $G(r) = \frac{k_B T}{8\pi c} \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}}$ Landau-elmélet szerint:

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad \nu = 1/2$$

Méret (diffrakció), T_c körüli:

$$G(r, T) \approx \frac{f(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}$$

Landau méretezés $\eta = 0 \sim 0.05$

Domenkatar: $T < T_c$, $H(x) = 0$

61/a

1 dimenzió

G-L: $m_0 = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2b} (T_c - T)}$
 $\Delta m \equiv m''(x) = -\frac{\alpha(T_c - T)}{c} m(x) + \frac{2b}{c} m^3(x)$

$m''(x) = -\frac{1}{\xi^2} \left(m(x) - \frac{m^3(x)}{m_0^2} \right) = -\frac{2}{2m} \left[\frac{1}{\xi^2} \left(\frac{m^2}{2} - \frac{m^4}{3m_0^2} \right) \right]$

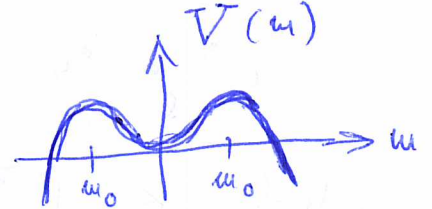
"mózgásegyenlet"

$m \rightarrow$ "koordináta"

$x \rightarrow$ "idő"

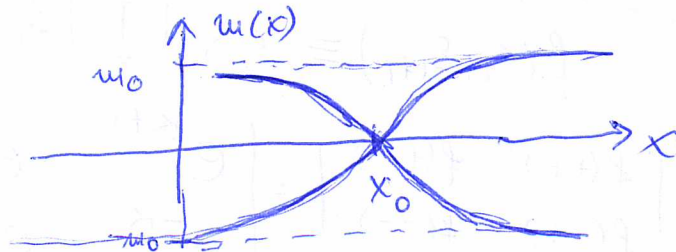
$V(m)$
"potencial"

$m'' m' = \left(\frac{1}{2} (m')^2 \right)'$ "energiaintegrál"



megoldás:

$m(x) = \pm m_0 \operatorname{th} \frac{x - x_0}{\sqrt{2} \xi}$



A domenkatar vastagság $\approx \xi$.
 Ma $T \rightarrow T_c \Rightarrow \xi \rightarrow \infty$.

Összefoglalva: A Landau-elmélet ugyanazt adja a kritikus exponenseket adja, mint az a fluktuációelmélet emellett, hogy a fluktuációkat mindig elmélet elhanyagolja.

Megj: $\chi = \frac{1}{\xi_{BT}} \int d^3 r' G(r-r') = \frac{1}{\xi_{BT}} \tilde{G}(q=0) \sim \rightarrow$ Fourier

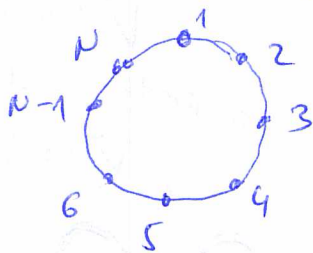
Yuzawa-fü. Fourier tr. $\Rightarrow \chi = \frac{1}{2c} \frac{1}{\xi^{-2} + q^2} \Big|_{q=0} \sim \xi^2$ Egyszerű divergál $T \rightarrow T_c$ érték

Mit welcher Technik a. kritischer Vorgehensschritt
 atlagter - amelyet nélkül? (6/16)

Néhány egyszerű eredmény (sing-modellre):

1) Egydimenziós /sing-modell
 (Transfer-matrix módszer)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^N s_i = -J \sum_{i=1}^N \left[s_i s_{i+1} - \frac{H}{2}(s_i + s_{i+1}) \right]$$



Ciklikus hat. felt.: $s_{N+1} = s_1$

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{s_j\}} e^{K \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1})}$$

ahol $K = \beta J$ és $h = \beta H$

$$Z = \sum_{\{s_j\}} \prod_i e^{K s_i s_{i+1} + \frac{h}{2} (s_i + s_{i+1})}$$

$$f(s_i, s_{i+1}) \equiv \langle s_i | \underline{T} | s_{i+1} \rangle$$

$$\text{ahol } \underline{T} = \begin{bmatrix} f(++) & f(+-) \\ f(-+) & f(--+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{bmatrix}$$

$$Z = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N = \pm 1} \langle s_1 | \underline{T} | s_2 \rangle \langle s_2 | \underline{T} | s_3 \rangle \langle s_3 | \underline{T} | s_4 \rangle \dots \langle s_N | \underline{T} | s_1 \rangle$$

$$= \text{Tr} \underline{T}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad \lambda_1, \lambda_2 \text{ a } \underline{T} \text{ sajátértékei,}$$

Sajátérték egyenlet:

$$(e^{K+h} - \lambda)(e^{K-h} - \lambda) - e^{-2K} = 0 \Rightarrow$$

$$\lambda_{1/2} = e^K \cosh h \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K}}$$

mivel $\lambda_1 > \lambda_2 \Rightarrow$ termodin. limit, $N \rightarrow \infty$ 62/a

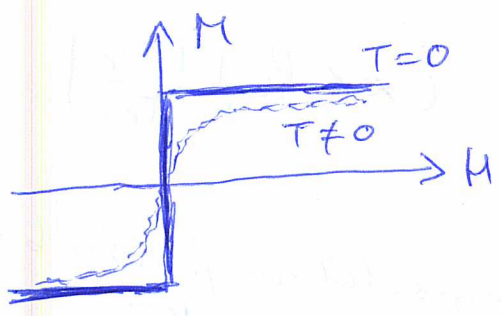
$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \xrightarrow{\infty} \lambda_1^N$$

199

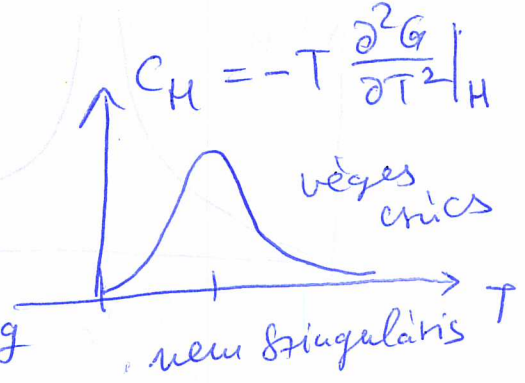
$$G(T, H) = -k_B T \ln Z = -N k_B T \ln \lambda_1$$

$$\langle \sum_{i=1}^N s_i \rangle = M = - \frac{\partial G}{\partial H}$$

a térfogategység mágnesességéé



$T \neq 0$ esetén
NINCS
spontán
mágnesesség



1D Ising-modellben nincs fázisátmenet,
rendeződés csak $T=0$ -nál van.

Q2a: ↑↑↑(↑↓)↓↓↓(↓↑)↑↓ ↓ ↓ "ponthiba-olat"
felek \equiv ponthiba

Szeverési $\sim -RT \ln x \rightarrow$ ponthiba koncentráció!

E_{hiba} $\sim x$

$F = E - TS$ először a hibától; megszünteti a rendeződést, $M = \langle \sum s_i \rangle = 0$.

Megj: 1D Ising-lánc megoldható

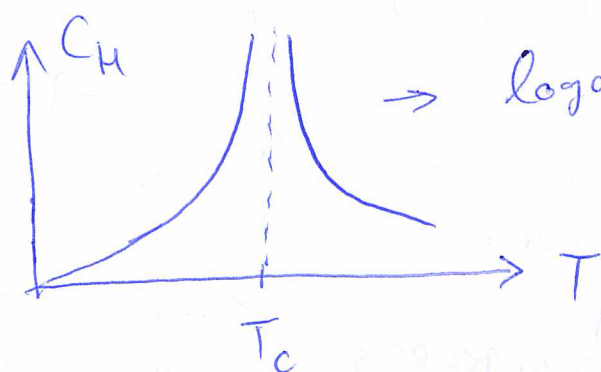
$S > \frac{1}{2}$ spinű láncra is egyértelmű a transfer-mátrix módszerrel (lásd Elvilek Fiz. példakönyv, II. kötet 15.12 feladat).

2.) 2 dimenziós Ising-modell:

62/b

Egyszerű megoldás négyzetláncra: Onsager, 1943

Transfer-mátrix módszerrel, de elég bonyolult számolás. Analitikusan ismert $Z \rightarrow G(T, H) \rightarrow$ fűző



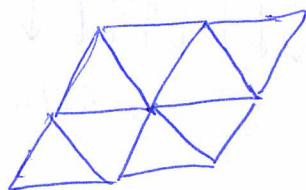
→ logaritmusos singularitás

$$C_H \sim \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|$$

T_c : $\text{sh } 2K_c = 1$ egyenlet megoldésából

$$K_c^{\square} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) = 0.44 \Rightarrow \frac{\epsilon_B T_c}{J} = 2.269185, \text{ négyzetlánc}$$

Háromszögletes:



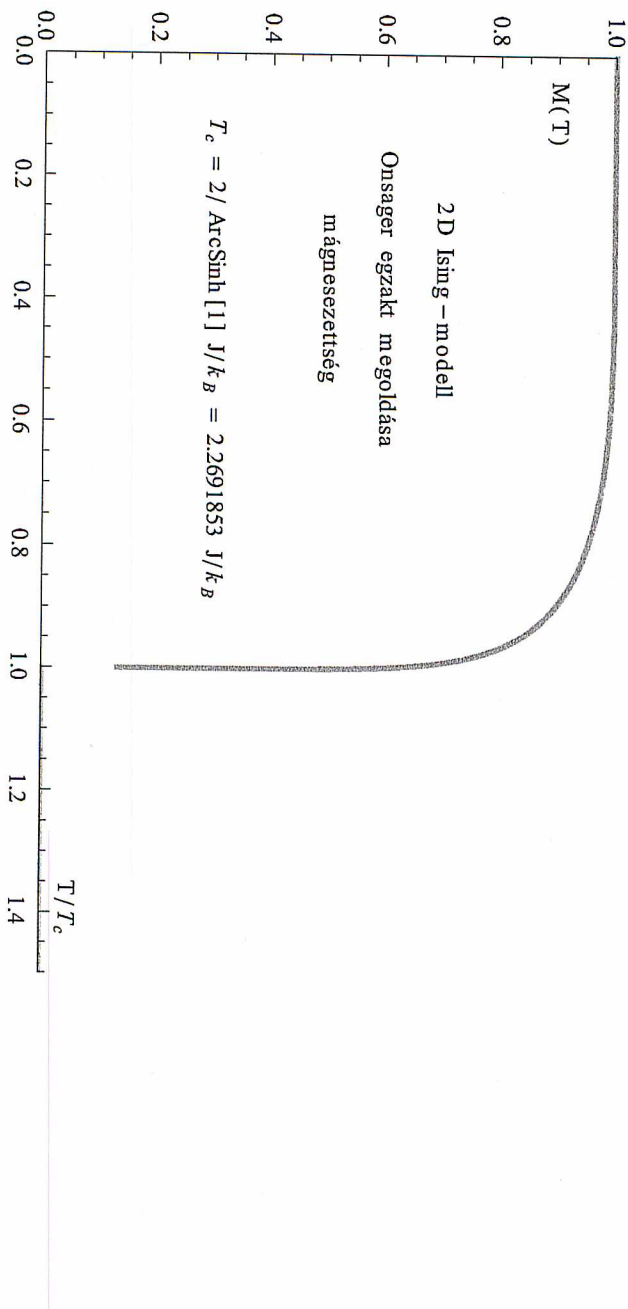
$$K_c^{\Delta} = \frac{\ln 3}{4} = 0.274653$$

	egyszerű	mean-field
Δ -lánc	0.275	1/3
\square -lánc	0.441	1/4

2D Ising-modell, négyzetláncra

62/c

$m(T) = \langle S_i \rangle$ - mágneszettség
hőmérsékletfüggése

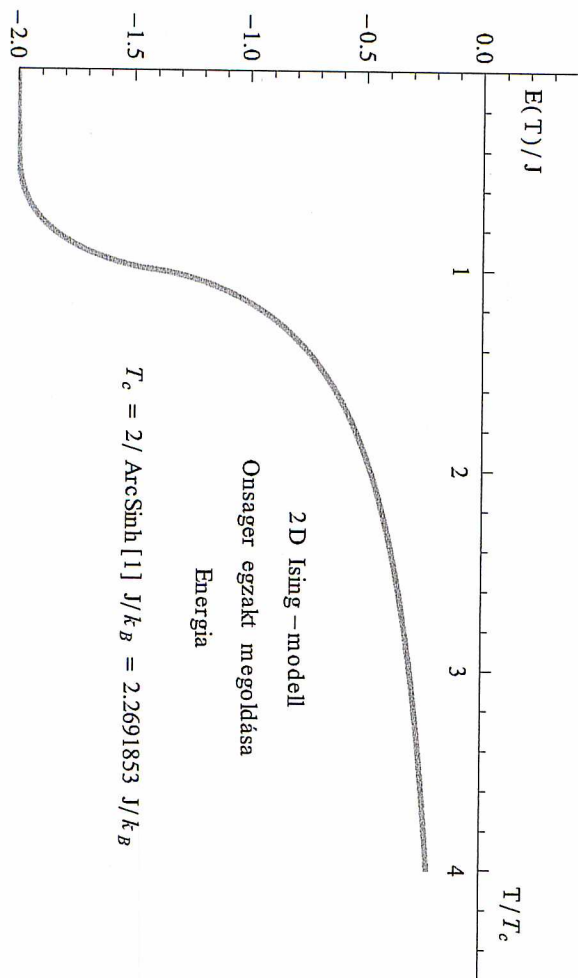


2D Ising-modell végytetradion

62/d

$E(T)$ energia T -függése

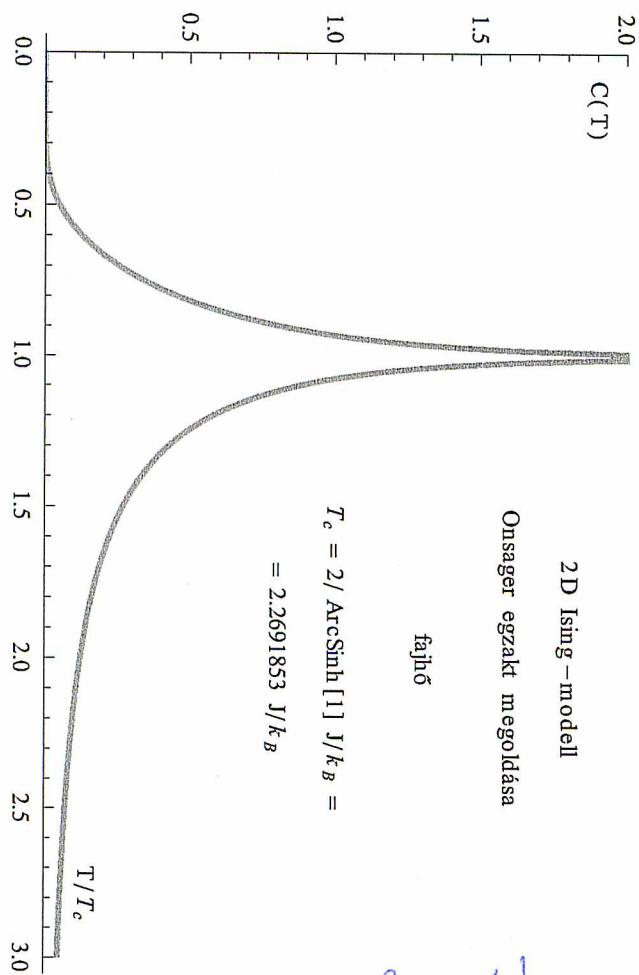
H tér zérus.



2D Ising-modell négytetredson

62/e

$C(T)$ fajhő T -függése



Logaritmiás szingularitás $T = T_c$ -nél

$$\frac{C(T)}{N k_B} \approx \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \text{const.}$$

Kritikus jelenségek modern elmélete

[63/a]

Mindenhol hatványfüggés van.
Skálainvariancia \sim önhasonlóság

$$\text{pl.: } f(x) = x^n \Rightarrow f(\mu x) = \lambda f(x)$$

$$\text{Legyen } \lambda = \mu^n \Rightarrow \mu = \lambda^{\frac{1}{n}} \equiv \lambda^a, \quad a = \frac{1}{n}$$

$$\text{vagy } f(\lambda^a x) = \lambda f(x)$$

Általánosított homogén fv.

Mi van a skálatorvények mögött? $t = \frac{T - T_c}{T_c}$

$$G(T, H) = G_{\text{reguláris}}(T, H) + G_{\text{szinguláris}}(t, H)$$

és $G_{\text{szing}}(t, H)$ általánosított homogén függvény:

$$G_{\text{szing}}(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) = \lambda G_{\text{szing}}(t, H)$$

$$(a_t, a_H) \xrightarrow{\text{deriválás}} (\alpha, \beta, \gamma, \delta)$$

kritikus exponensek

Kell hogy legyen szétválasztva 2 exponens
(Rushbrook, Widom)

DE MIÉRT?

Miért általánosított homogén fv. a $G_{\text{szing}}(T, H)$
Gibbs-potencial?

Kadanoff - lép (1965):

63/b

A fluktuációk térbeli inhomogenitását egy karakterisztikus hosszúság jellemzi, a korrelációs hossz:

$$\xi(T) \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu} = |t|^{-\nu} \quad \begin{array}{c} T \\ \downarrow \\ T_c \end{array} \rightarrow \infty$$

- A szinguláris mennyiségek (pl. $G_{\text{sing}}(T, H)$, fajhő, susceptibilitás, stb.) csak ezen keresztül függenek T -től, ami ösztönelesen "élet" \rightarrow "skalárvételek".
- Minden mikroszkopikus hossz (rácsállandó, rölesközhatás hatótávolsága) lényegtelen, ha ezek a hokok $\ll \xi(T)$.
- Ami lényeges, az az elmoshatóan felajdosságot: d ; n ; hosszúságú eh., globális szimmetria. (pl.: kristály anizotropia)
↑ dimenzió ↑ rendparameter dimenzió
- Ha két rendszám egy megegyeznek, akkor azonos az éritikus exponenseik.
UNIVERZALITÁS
a éritikus jelenségekben (modellhetőség).

Kadanoff öflete: a korrelációs függvényt 64/a

cella nézve, hatványfüggés ~ önhasonló korrelációk



„Tó a szigetben, sziget a tavon.”

Spin-spin korrelációs fu: $\Gamma(r, T, H) = \langle S_r S_0 \rangle - \langle S_r \rangle \langle S_0 \rangle$

(lásd: 51/b oldalt, ott G -vel jelöltük, most Γ -val fogjuk, hogy ne keverjük a $G(T, H)$ Gibbs-potenciállal)

$$\Gamma(r, T, H) = \Gamma_{\text{reg}}(r, T, H) + \Gamma_{\text{sing}}(r, t, H)$$

↑
önhasonló \Leftrightarrow általánosított homogén fu.

$$\Gamma\left(\frac{r}{s}, s^{y_t} \cdot t, s^{y_H} \cdot H\right) = s^{y_g} \Gamma(r, t, H)$$

Kadanoff „skalafeltétele”

Következményei?

T -függés (t -függés) csak a $\xi(T)$ korrelációs hosszra szorítható le.

Legyen $\mu=0$ és $t \neq 0$ és $s = r$!

64/b

Eller $\Gamma\left(\frac{r}{\xi}, \underbrace{\xi^{y_t} \cdot t, 0}\right) = \xi^{y_g} \Gamma(r, t, 0)$

↑ Ez szerinti a külön t -függes paraméter,
 mivel, ha $\xi^{y_t} \cdot t = \text{const}$

$\Rightarrow \xi \sim |t|^{-\frac{1}{y_t}} \sim |t|^{-\nu}$

$\Rightarrow \boxed{y_t = \frac{1}{\nu}}$

$\Gamma(r, t, 0) = \xi^{-y_g} \Gamma\left(\frac{r}{\xi}, 1, 0\right) = r^{-y_g} \underbrace{\left(\frac{r}{\xi}\right)^{y_g} \Gamma\left(\frac{r}{\xi}, 1, 0\right)}_{\tilde{g}\left(\frac{r}{\xi}, \mu=0\right)}$

60/b oldalán
a definíció

$\equiv \frac{\tilde{g}\left(\frac{r}{\xi}, 0\right)}{r^{d-2+\eta}}$

$\Rightarrow \boxed{y_g = d-2+\eta}$

- Tegyük vissza a μ -függést
- Vegyük figyelembe, hogy $T > T_c$ és $T < T_c$ esetén
 különböző viselkedést várunk ($T < T_c : M \neq 0$).

$\boxed{\Gamma(r, t, \mu) = \frac{\tilde{g}^{\pm}\left(\frac{r}{\xi}, \xi^{y_{\mu}} \cdot \mu\right)}{r^{d-2+\eta}}}$

$\pm : T \begin{matrix} > T_c \\ < T_c \end{matrix}$

A $\Gamma(r, t, \mu)$ valóban csak $\xi(T)$ -n keresztül függ T -tól.

Skálátörvények levezetése:

65/a

$\Gamma \leftrightarrow \chi$ Lapcsolat (Lásd 51/b, fluktuáció-
váltak Lapcsolat)

$$\chi(r, t, H) = \frac{1}{k_B T} \Gamma(r, t, H) \approx \frac{g^\pm\left(\frac{r}{\xi}, \xi^{y_H} H\right)}{r^{d-2+\eta}}, \quad \pm : \begin{matrix} T > T_c \\ T < T_c \end{matrix}$$

$k_B T \approx k_B T_c$
beolvastottak

• $\chi(t, H) = \int \chi(r) d^d r = \int \frac{g^\pm\left(\frac{r}{\xi}, \xi^{y_H} H\right)}{r^{d-2+\eta}} d^d r = \textcircled{*} \tilde{g} - \text{ba.}$

új változó: $\rho = r/\xi$

$\textcircled{*} = \xi^{2-\eta} \int \frac{g^\pm(\rho, \xi^{y_H} H)}{\rho^{d-2+\eta}} d^d \rho = \xi^{2-\eta} \chi_0^\pm(\xi^{y_H} H) =$

$\xrightarrow{\xi \sim |t|^{-\nu}} = |t|^{-\nu(2-\eta)} \chi_0^\pm(|t|^{-\nu y_H} H) = |t|^{-\gamma} \chi_0^\pm(|t|^{-\nu y_H} H) \uparrow_{H=0}$
 $\uparrow \chi \sim |t|^{-\gamma}, \gamma: \text{definiciója}$
 ha $H=0$

$\Rightarrow \boxed{\gamma = \nu(2-\eta)}$ (Fisher)

• $\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \Rightarrow M = \int \chi dH = |t|^{-\gamma + \nu y_H} m_0^\pm(|t|^{-\nu y_H} H)$
 $= |t|^\beta m_0^\pm(|t|^{-\nu y_H} H)$

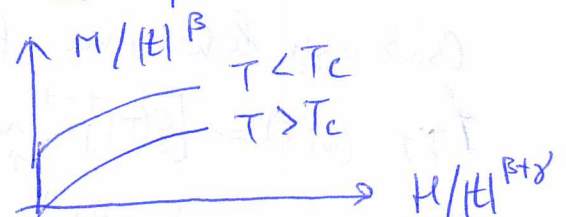
\rightarrow ha $H=0$

avagy $M \sim |t|^\beta \Rightarrow \boxed{\gamma + \beta = \nu y_H}$

\rightarrow ha $H \neq 0$

$\boxed{\frac{M}{|t|^\beta} = m_0^\pm\left(\frac{H}{|t|^{\beta+\gamma}}\right)}$

univerzális
állapotmenet



Könnyebb Eisenbergleg igazolni;
mint az exponenseket mérni.

Gibbs-potencial: 65/6

$$M = - \frac{\partial G(T, H)}{\partial H} \Rightarrow G = - \int M \cdot dH = \textcircled{*}$$

$$\textcircled{*} = \int |t|^\beta \mu_0^\pm (|t|^{-(\beta+\gamma)} \cdot H) dH \Rightarrow$$

$$G(t, H) = |t|^{2\beta+\gamma} \cdot G_0(|t|^{-(\beta+\gamma)} \cdot H)$$

Matvány függvény, a $G(T, H)$ Gibbs-potencial is általában homogén fu.

Fajhő $C = -T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \cong \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = |t|^{2\beta+\gamma-2} C_0 = |t|^{-\alpha} C_0$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha + 2\beta + \gamma = 2} \text{ (Rushbrooke)}$$

δ exponens: $|t| \rightarrow 0$ és $H \neq 0$: M véges

$$\frac{M}{|t|^\beta} = \mu_0^\pm \left(\frac{H}{|t|^{\beta+\gamma}} \right) \Rightarrow \mu_0^\pm(x) \sim \frac{M}{|t|^\beta} \sim \frac{1}{\left(\frac{H}{x}\right)^{\beta+\gamma}} \sim x^{\frac{\beta}{\beta+\gamma}}$$

$$x \Rightarrow |t| = \left(\frac{H}{x}\right)^{\frac{1}{\beta+\gamma}}$$

$$\Rightarrow M(T=T_c, H) \sim |t|^\beta \cdot \mu_0^\pm(x) \sim |t|^\beta \left(\frac{H}{|t|^{\beta+\gamma}}\right)^{\frac{\beta}{\beta+\gamma}} \sim H^{\frac{\beta}{\beta+\gamma}}$$

de $M(T \neq T_c, H) \sim H^{1/\delta} \Rightarrow \boxed{\beta\delta = \beta + \gamma}$ (Widom)

Josephson-skálázás: $H=0$ és $|t| \ll 1$.

$G(T) = V f(\xi(T))$, de ez nem függhet az S távolság-skálától, ha $r \rightarrow r/S$, akkor $G(T) = V f(\xi) = \frac{V}{S^d} f(\xi/S)$.

Csak úgy lehet, ha $f(\xi/S) \sim (\xi/S)^{-d}$ vi: $\frac{V}{S^d} \frac{S^d}{\xi^d} = \frac{V}{\xi^d}$.

Igy $G(T) \sim [\xi(T)]^{-d} \sim |t|^{\nu d} \Rightarrow C_H = -T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \approx \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} \sim |t|^{\nu d - 2} \sim |t|^{-\alpha}$

$\xi \sim |t|^{-\nu} \Rightarrow \boxed{\nu d = 2 - \alpha}$ csak ebben van d !

Kérdés: $\xi(T) \sim |T-T_c|^{-\nu}$ MIÉRT?

66/a

Renormálási csoport transformáció (RG), Wilson, 1971

a) Egydimenziós Ising-lánc (ismét); periódikus hat.felt.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1$$

$$\beta \mathcal{H} = -K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad K = \beta J, \quad h = \beta H$$

$$Z_N = \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1, \sigma_2 = \pm 1, \dots} e^{K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^N \sigma_i} =$$

$$= \sum_{\sigma_1 = \pm 1, \sigma_2 = \pm 1} e^{K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} h (\sigma_1 + \sigma_{N+1})}$$

decimálás:

A páros számú spinekre
összegzünk.



Z_N -ben a σ_2 -öt füstalmozó kézzel:

$$\sum_{\sigma_2 = \pm 1} e^{K \sigma_2 (\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) + \frac{h}{2} (\sigma_2 + \sigma_3)} =$$

$$= e^{\frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_3)} \left[e^{K(\sigma_1 + \sigma_3) + h} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3) - h} \right] =$$

$$= e^{\frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_3)} 2 \cdot \text{ch} \left[K(\sigma_1 + \sigma_3) + h \right]$$

$$\equiv e^{2g_0 + K' \sigma_1 \sigma_3 + \frac{1}{2} h' (\sigma_1 + \sigma_3)} \leftarrow \text{új } \mathcal{H}, \text{ ahol } g_0, K', h' \text{ ismeretlenek.}$$

σ_1	σ_2	
1	1	→
1	-1	→
-1	1	→
-1	-1	→

$$e^h \cdot 2 \text{ch}(2K+h) = e^{2g_0 + K' + h'}$$

$$2 \text{ch } h = e^{2g_0 - K}$$

$$e^{-h} \cdot 2 \text{ch}(-2K+h) = e^{2g_0 + K' - h'}$$

→ 3 egyenlet,
 g_0, K', h'
ismeretlenek.

A megoldás:

(A 1. és 3. egyenletet összeadva és felhatalmálva a 2. egyenletet kapjuk k' .)

66/b

$$k' = \frac{1}{4} \ln \frac{\text{ch}(2k+h) \text{ch}(2k-h)}{(\text{ch } h)^2}$$

$$h' = h + \frac{1}{2} \ln \frac{\text{ch}(2k+h)}{\text{ch}(2k-h)}$$

$$\text{és } g_0 = \frac{1}{8} \ln [16 \text{ch}(2k+h) \text{ch}(2k-h) \text{ch}^2 h]$$

Minden páros számú spinre kösszerezve a Z_N -ben $\frac{N}{2}$ db spin marad, melyek közt a k' , a h' . A $\mathcal{H}(\frac{N}{2}, k', h')$ állapotok száma, mint az eredeti $\mathcal{H}(N, k, h)$ egy konstans (g_0) értéke.

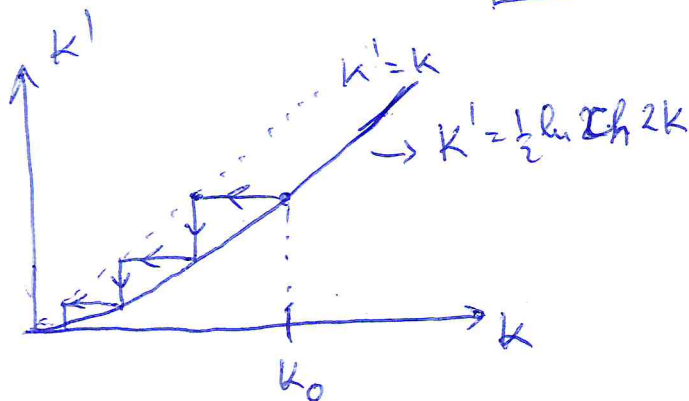
$$Z_N(k, h) = \text{Tr}_{\{\mu_i\}} e^{\frac{N}{2} 2g_0(k, h) + \sum_{i=1}^{N'} \mu_i k_{i+1} + h' \sum_{i=1}^{N'} \mu_i} \equiv Z_{N'}(k', h') e^{Ng_0(k, h)}$$

ahol $N' = \frac{N}{2}$ és $\mu_i = \sigma_{2i}$ a maradék (páros) spin.

A decimálás feltehető. A Gibbs-potenciál

$$-\beta G = \ln Z_N = Ng_0(k, h) + \ln \text{Tr}_{\{\mu_i\}} Z_{\frac{N}{2}}(k', h')$$

Legyen $h=0$! Ekkor $k' = \frac{1}{2} \ln \text{ch } 2k$ → renorm. egyenlet



Véges k_0 -ból indulva az iteráció bevisz a $k=0$ fix pontba.

k^* a fixpont van $k^* = \frac{1}{2} \ln \text{ch } 2k^*$ egyenletnek

$k^* = 0 \Rightarrow T = \infty \rightarrow$ nem \mathcal{L} .

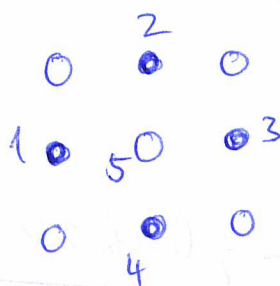
$k^* = \infty \Rightarrow T = 0 \rightarrow$ rendezett

A fenti renorm. egyenlet soha se vezet rendezett állapothoz (zivéve $k_0 = \infty, T=0$)!!

b) 2D Ising-modell

Decimális

Legyen $h=0!$



A 0 spinűket kidecimáljuk, maradnak a 1 spinűk. Ezek is négyzet alakúak.

Z-ben kiintézzük azt a térszót, ami σ_i -öt tartalmazza!

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K \sum \sigma_i (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)} = \sum_{\{\sigma_i\}} 2 \text{ch}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \dots$$

$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4 \rightarrow 2^4 = 16$ különböző konfiguráció!

Ha csak első-normálód kb. venni a figyelembe $\sigma_i - \sigma_j$ spinűk

$Z \rightarrow A + B(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1)$
 alakba keressük, akkor A és B ismeretlenek 16 feltételre egyenlet lenne. Több szabadsági fok kell, azaz be kell venni a másodnormálód és 4-spin kb. -okat is.

$$2 \text{ch}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \equiv e^{g_0 + \frac{1}{2} k_1' (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4) + k_2' (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4) + k_3' \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}$$

\rightarrow első normálód kb.
 \rightarrow 2-nd normálód kb.
 \rightarrow 4-spin kb.

Külön-külön mind a 16 konfigurációra felírva az egyenleteket, kiderül, hogy csak éppen 4 egyenlet független, ami éppen elég g_0, k_1', k_2', k_3' meghatározásához

$$2 \text{ch} 4k = e^{g_0 + 2k_1' + 2k_2' + k_3'}$$

$$2 \text{ch} 2k = e^{g_0 - k_3'}$$

$$2 = e^{g_0 - 2k_2' + k_3'}$$

$$2 = e^{g_0 - 2k_1' + 2k_2' + k_3'}$$

$\leftarrow \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4$

A 4 egyenleket megoldva:

(67/6)

$$g_0 = \ln 2 + \frac{1}{2} \ln \operatorname{ch} 2k + \frac{1}{8} \ln \operatorname{ch} 4k$$

$$k_1' = \frac{1}{4} \ln \operatorname{ch} 4k$$

$$k_2' = \frac{1}{8} \ln \operatorname{ch} 4k$$

$$k_3' = \frac{1}{8} \ln \operatorname{ch} 4k - \frac{1}{2} \ln \operatorname{ch} 2k$$

A decimális magasabb rendű szubsztitúciósok general!

így $Z_N(k) = \sum_{\{\mu_i\}} e^{N g_0 + K_1' \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + K_2' \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + K_3' \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j \mu_k \mu_l}$

↑
4 spin

$$\equiv e^{N g_0} Z_N(k_1', k_2', k_3'), \text{ ahol}$$

$N' = \frac{N}{2}$ a maradék spinek (•) háma.

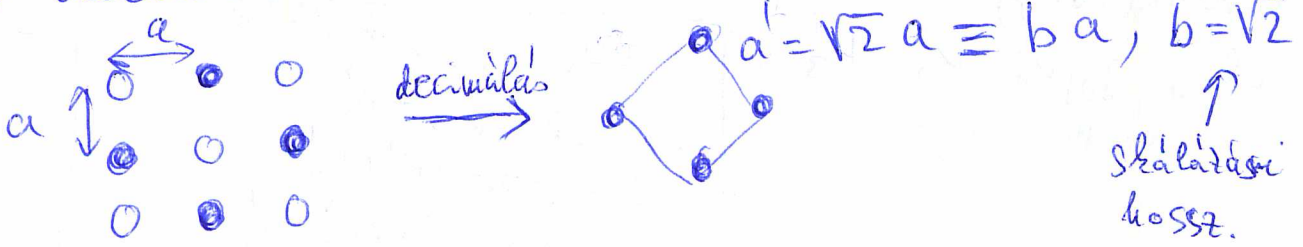
A Gibbs potenciál egy spinre:

$$\frac{G_N(k_1, 0, 0)}{N} = -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N = k_B T \left(-\frac{g_0}{2} + \frac{G_{N'}(k_1', k_2', k_3')}{N} \right)$$

Teljesítsd a problémát általánosan! Lehet a sz-uar k_1, k_2, \dots elv. -ait általában csak végtelen nem zero adott fizikai rendszerre!

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\underline{k}, \{\sigma_i\})}, \text{ ahol } \underline{k} = (k_1, k_2, \dots)$$

A decimálással új rácsot kapunk:



Átskálázzuk a rendszert és a rászálalást 68/a
 felület új rászálalással.

Ezkor az új rendszerben: $\underline{r}' = \frac{1}{b} \underline{r}$

• A korrelációs hossz is átskálázódik:

$\underline{K}' = (K'_1, K'_2, \dots)$: $\xi(\underline{K}') = \frac{1}{b} \xi(\underline{K})$, csöppen a decimálással

• A szabadsági fokok száma is csöppen:

$N' = b^{-d} N$, ahol d : a rendszer dimenziója

• A renormálási operátor:

$$\underline{K}' = \mathcal{R}_b(\underline{K})$$

És egy felpont (nincs inverze):

$$\mathcal{R}_{b_1}(\mathcal{R}_{b_2}(\underline{K})) = \mathcal{R}_{b_1 b_2}(\underline{K})$$

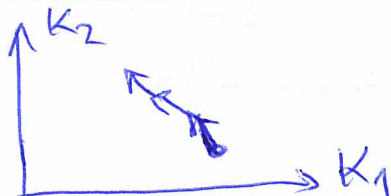
• Fixpont: \mathcal{R}_b -nek lehetnek fixpontjai, \underline{K}^* :

$$\mathcal{R}_b(\underline{K}^*) = \underline{K}^*$$

$$\text{Ezkor } \xi(\underline{K}^*) = \frac{1}{b} \xi(\underline{K}^*)$$

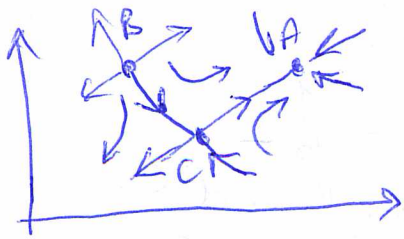
Ezektől két megoldás van $\xi(\underline{K}^*) = 0$ (nem érdekes) és $\xi(\underline{K}^*) = \infty$, ez az érdekes, ezt látjuk T_c körül.

• Renormálási folyamat, \mathcal{R}_b iteratív alkalmazása:
 A \underline{K} -felben az egymást követő RG lépések eredménye.



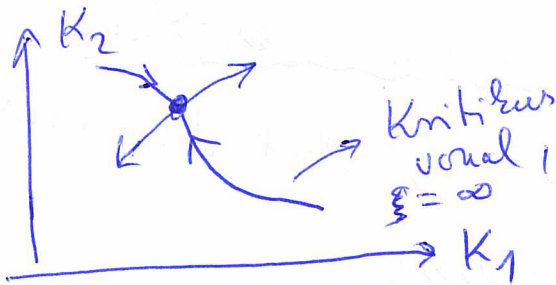
• Több fázisú fixpont lehetséges:

68/6



A: vezető
B: tártik
C: vegyes

• Kritikus vonal (felület):



A kritikus vonalon befutunk a fixpontra, ahol $\xi = \infty$, de az RG - vel ξ csökken ~~ez nagy lehet csak~~, ha a kritikus vonalon $\xi = \infty$ végig.

Több dimenzióban (K-terben) kritikus felület van.

• Szereket a K^* fixpont körül:

$$K'_\alpha = R_b^{(\alpha)}(K) \quad , \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

Legyen $\delta K = K - K^*$ és $\delta K' = K' - K^*$ → $n \times n$ -es mátrix

Ezért $\delta K' = \underline{M} \delta K$, ahol $\underline{M}_{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial R_b^{(\alpha)}}{\partial K_\beta} \right|_{K=K^*}$

M sajátértékei: λ_i , $i = 1, 2, \dots, n$

- releváns változó: $\lambda_i > 1$: elvész a fixpontonál,
- irreleváns változó: $|\lambda_i| < 1$: fixpontonba megy,
- marginalis $\lambda_i = 1$: nem lemegez a kritikus felülettel szempontjából alapvetően. Esetleg log. sting. vezet.

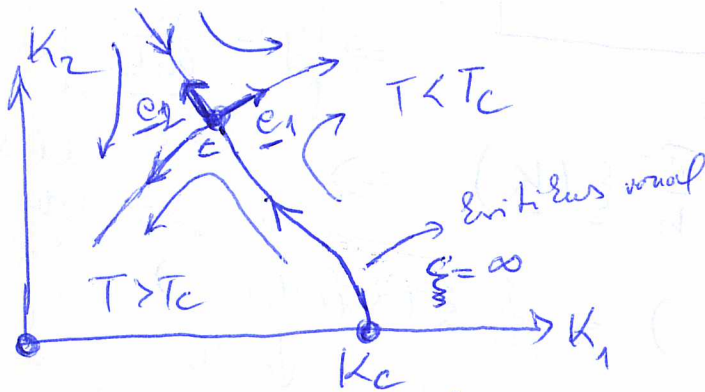
M általában nem szimmetrikus mátrix!

M sajátvektorai: $\underline{e}_1, \underline{e}_2, \dots$

Ezzer $\delta \underline{k} = \sum_i u_i \underline{e}_i$, u_i : releváns, ha $\lambda_i > 1$,
 u_i : irreleváns, ha $|\lambda_i| < 1$.

RG-vel: $\boxed{u_i' = \lambda_i u_i} \Rightarrow$

az irreleváns változó
 zérusba tartanak
 $u_i \xrightarrow{RG} 0$, ha $|\lambda_i| < 1$

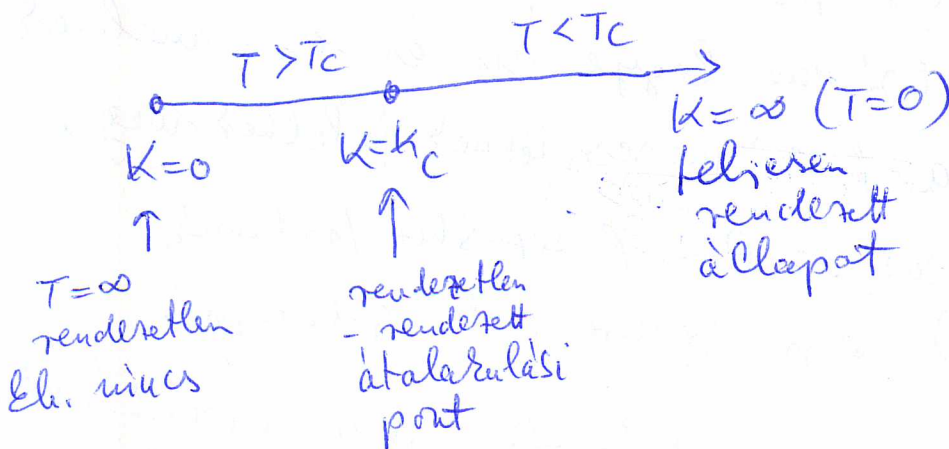


Fix pontban
 $\lambda_1 > 1, |\lambda_2| < 1$

A kritikus vonaltól balra a folyás a $k^* = 0$ ($T = \infty$)
 fixpontba halad, és felel meg a rendszeren állapotnak
 $T > T_c$

A kritikus vonaltól jobbra induló folyás
 a $k^* = \infty$ fixpontba halad ($T = 0$), rendszeri állapot.

Ha később a rendszerben csak k_1 érvényesül és
 van ($k_2 = k_3 = \dots = 0$), akkor az ábrán k_c
 lett a rendszer kritikus pontja.



Ebben az
 esetben

$u_1 \equiv t = \frac{T - T_c}{T_c}$,
 ekkor $u_1 \neq 0$,
 ha $T \neq T_c$ és
 $u_1 = 0, T = T_c$,
 azaz a kritikus
 vonalon.

Mivel R_b csoport (fél):

69/b

$$R_b(R_b(K)) = R_{b^2}(K)$$

$$\Rightarrow \boxed{\lambda_i(b) \cdot \lambda_i(b) = \lambda_i(b^2)}, \quad i=1, 2, \dots, n$$

Ezzel a fv. enelethez a megoldás:

$$\boxed{\lambda_i(b) = b^{y_i}}, \quad \text{ahol } y_i \text{ nem függ } b\text{-től!}$$

$$\Rightarrow \boxed{y_i = \frac{\ln \lambda_i}{\ln b}}$$

o A Szereleciós hozzáf:

$$\xi(K') = \frac{1}{b} \xi(K) \Rightarrow$$

altalánosított
homogén fv.
származékos

legyen u_1 releváns
 u_2 irreleváns
változó és
 $q=0!$

$$\xi(\lambda_1 u_1, \lambda_2 u_2, \dots) = \frac{1}{b} \xi(u_1, u_2, \dots)$$

\downarrow RG
 0 (irr.)

\downarrow RG
 0 (irr.)

es $\xi \sim |t|^{-\nu} = (u_1)^{-\nu}$

$u_1 \equiv t = \frac{T-T_c}{T_c}$ arányos

arányos

$$(\lambda_1 u_1)^{-\nu} = \frac{1}{b} (u_1)^{-\nu} \Rightarrow \boxed{\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_1}}$$

A ν exponenshez a $\lambda_1 > 1$ sajátérték kell meghatározni! Megi: $\lambda_1 = b^{y_1} \Rightarrow y_1 = \frac{\ln \lambda_1}{\ln b} \Rightarrow \nu = \frac{1}{y_1}$

o Gibbs-potenciál: Altaliban két hízai rendszert két releváns változó van, legyen u_1 és u_2 , melyek a $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ és a h mágneses térrel felelnek meg.

A többi irreleváns, az RG-vel zérushoz tartanak.

$g(T, H) \equiv \frac{G(T, H)}{N}$ egy spinre jutó Gibbs-pot.

$N' = \frac{N}{b^d}$ a renormálás után a spinek száma.

\uparrow \uparrow
 K h

A Gibbs-pot. tartalmat g_0 tagot, de
 ezt analitikusan számoltuk, nem hatmit
 a Gibbs-pot. singularis részére, ami:

70/a

$$g_s(K, h) = \frac{-k_B T \ln Z_N(K, h)}{N} = \frac{-k_B T \ln Z_{N'}(K', h')}{N' b^d} =$$

$$= b^{-d} g_s(K', h')$$

Attól, hogy u_1, u_2, \dots változóira

$$g_s(u_1, u_2, \dots) = b^{-d} g_s(u'_1, u'_2, \dots) = b^{-d} g_s(\lambda_1 u_1, \lambda_2 u_2, \dots)$$

$$= b^{-d} g_s(b^{y_1} u_1, b^{y_2} u_2, \dots)$$

Ha $u_1 = t = \frac{T - T_c}{T_c}$ és $u_2 = h$, akkor

$$g_s(t, h, \dots) = b^{-d} g_s(b^{y_t} t, b^{y_h} h, \dots)$$

$$\xi(t, h, \dots) = b \xi(b^{y_t} t, b^{y_h} h, \dots)$$

$\left\{ \begin{array}{l} y_t \rightarrow y_t \\ y_h \rightarrow y_h \end{array} \right.$

Ez az általánosított homogén fv.-ek. Ezt sejtette meg
 Kadanoff (skalárlipolézis). A rendszer skalárinvariancia.
 A skalárlipolézisből levezetjük a skalártörvényeket,
 melyek a kritikus exponensek létfontosságú egyenletek
 (lásd 64.-65. old.).

pl.: g_s -vel legyen $b^{y_t} |t| = 1 \Rightarrow b = |t|^{-1/y_t}$

$$\Rightarrow g_s(t, h, \dots) = |t|^{d/y_t} \cdot g_s\left(\frac{t}{|t|}, |t|^{-y_h/y_t} h, |t|^{-y_3/y_t} u_3, \dots\right)$$

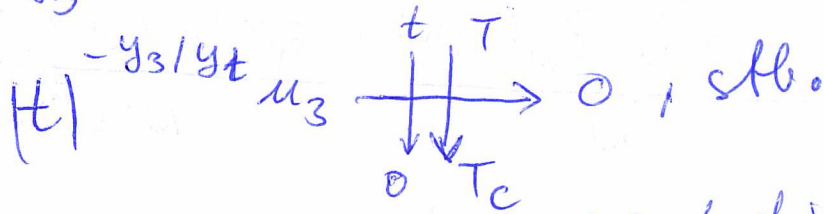
\downarrow ± 1 \downarrow 0 ha $t \rightarrow 0$

u_3, u_4, \dots irreleváns vektorok.

70/b

$\Rightarrow \lambda_3 < 1, \lambda_4 < 1, \dots$ és mivel $y_i = \frac{\ln \lambda_i}{\ln b}$

$\Rightarrow y_3 < 0, y_4 < 0, \dots$ így g_s jobb oldalán



Az irreleváns vektorok RG hatáskörébe nem tartoznak, nem függ. ezen vektoroktól.

Ha ezt rendszeren RG során ugyanabba a fixpontba megy, akkor kritikus exponensei megegyeznek. Ez az universalitás.

Pl: fajló exponensek $h=0$.

$$g_s(t, 0) = |t|^{d/y_t} g_s(\pm 1, 0)$$

$$\Rightarrow C \approx \frac{\partial^2 g}{\partial t^2} \sim |t|^{d/y_t - 2} \sim |t|^{-\alpha}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{y_t} - 2 = -\alpha \Rightarrow \frac{d}{y_t} = 2 - \alpha$$

De $y_t = \frac{1}{\nu} \Rightarrow \boxed{d\nu = 2 - \alpha}$ Ezt már látuk.

$\frac{\ln \lambda_1}{\ln b}$ ν és α is a λ_1 sajátértékétől függ.

Masonlóan zaphaból a többi skálátörvények is.

Pl.: $\beta = \frac{d - y_h}{y_t}$, $\gamma = \frac{-d + 2y_h}{y_t}$, ahol $y_t = \frac{\ln \lambda_t}{\ln b}$, $y_h = \frac{\ln \lambda_h}{\ln b}$
 $\delta = \frac{y_h}{d - y_h}$, $\eta = 2 + d - 2y_h$
 És λ_1, λ_2 a két releváns t, h vektorokhoz tartozó sajátértékei Π -nek.

Térjünk vissza példaként a 2D négyzetláncos vett Ising-modell renorm. egyenleteire (67/6)!

7/10

$$K_1' = \frac{1}{4} \ln ch 4K$$

$$K_2' = \frac{1}{8} \ln ch 4K$$

$$K_3' = \frac{1}{8} \ln ch 4K - \frac{1}{2} \ln ch 2K$$

Mivel RG magasabb rendű eh. -t generál, ezáltal van külső ség. Wilson követve elhanyagol a 4-spin(K_3) típusú eh.-t. Mivel K_1 és K_2 elég kicsi, sorfejtünk K -ban (Ez is látható, hogy ez nem végtelen):

$$K_1' = 2K^2 \text{ és } K_2' = K^2$$

Ha már az eredeti rendszerrel is bevettük volna a K_2 másodrendű eh., akkor az a renormálás után a K_1 elsőrendű eh. -hoz adna járulékot:

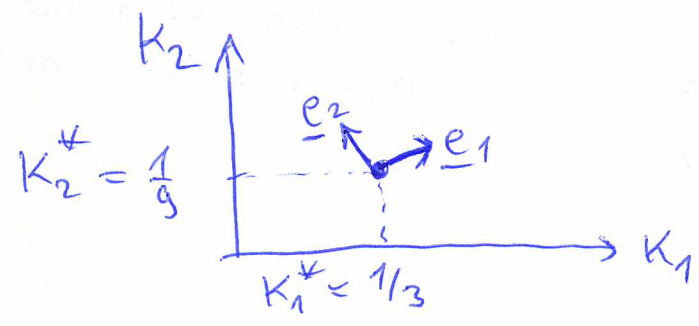
$$K_1' = 2K_1^2 + K_2 \text{ és } K_2' = K_1^2$$

Ez a fixpontja: $(K_1^*, K_2^*) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{9}\right)$.

$$\Rightarrow \underline{M} = \begin{bmatrix} 4K_1 & 1 \\ 2K_1 & 0 \end{bmatrix} \Big|_{\underline{K} = \underline{K}^*} = \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & 1 \\ \frac{2}{3} & 0 \end{bmatrix} \cdot \text{A sajátértékek és sajátvektorai:}$$

rel. $\rightarrow \lambda_1 = \frac{1}{3}(2 + \sqrt{10}) \approx 1.72 \rightarrow \underline{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(2 + \sqrt{10}) \\ 1 \end{bmatrix}$

inv. $\rightarrow \lambda_2 = \frac{1}{3}(2 - \sqrt{10}) \approx -0.387 \rightarrow \underline{e}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(2 - \sqrt{10}) \\ 1 \end{bmatrix}$

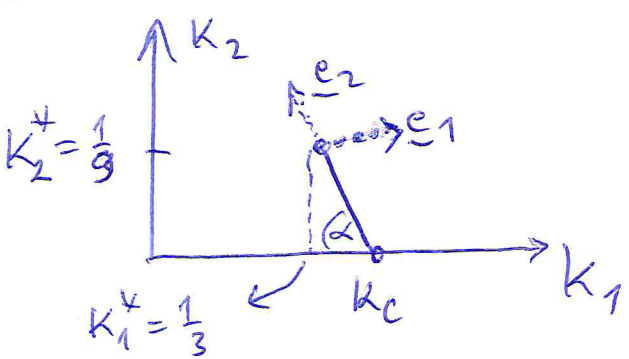


$\underline{e}_1, \underline{e}_2 \neq 0$, mert \underline{M} nem szimmetrikus

A K_c kritikus pont meghatározása:

71/b

Kérdés az igazi fizikai rendszerben $K_2=0$. A K_1 tengelyen meg kell nézni, hogy melyik $K_1=K_c$ pontból induló renormálás fut be a fixpontra.



$\leftarrow e_2$ irányából

$$\tan \alpha = \frac{1}{\frac{1}{2}|2-\sqrt{10}|} = \frac{2}{\sqrt{10}-2}$$

$$(K_c - \frac{1}{3}) \tan \alpha = \frac{1}{3}$$

$$\Rightarrow K_c = \dots = \frac{4+\sqrt{10}}{18} = 0.3979$$

és
$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_1} = \frac{\ln \sqrt{2}}{\ln \frac{1}{3}(2+\sqrt{10})} = 0.6385$$

K_c -nél a fenti meghatározása kizárható, feltételezve, hogy K_c -ből pontosan e_2 irányba megy a folyamat. De ez csak a fixpont közelében igaz. Ennek ellenére nem vagy az elérés. A pontosabb (numerikus) megoldással: $K_c \approx 0.3921$.
 Lásd 71/c ábrát is!

Megj.: Ma van H tér is: $h' = h + K_1 h$
 $\Rightarrow h^* = 0 \Rightarrow \lambda_h = \frac{\partial h'}{\partial h} \Big|_{K=K^*} = 1 + K_1^* = \frac{4}{3}$

$$\Rightarrow \gamma_h = \frac{\ln \lambda_h}{\ln b} = \frac{\ln \frac{4}{3}}{\ln \sqrt{2}} \Rightarrow \beta = \frac{d - \gamma_h}{\gamma_t} = 0.747$$

	Excat	MF	RG
K_c	0.4407	-	0.3979
ν	1	1/2	0.669
α	0	0	0.723
β	1/8	1/2	0.747
δ	7/4	1	-0.7017
δ'	15	3	0.709
γ	1/4	0	2.33

- RG javítását a sok módszer létezik, pl. decimális, cluster, cumulant, Monte-Carlo renormálás, impulzuskeresés renorm,...

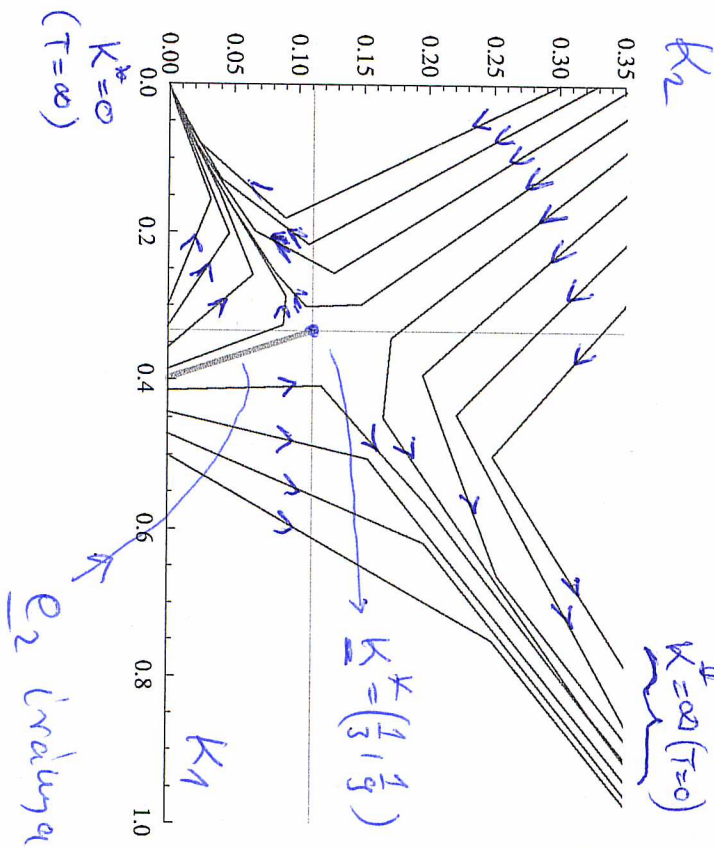
2D négyzetes, |siag-modell

71/c

Decimálás: $K_1^1 = 2K_1^2 + K_2$
 $K_2^1 = K_1^2$

Fixpont: $\underline{K}^* = (K_1^* \ K_2^*) = \left(\frac{1}{3} \ \frac{1}{9}\right)$

$$\underline{M} = \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & 1 \\ \frac{2}{3} & 0 \end{bmatrix}$$



Minden 2. iterációs pontot
 ábrázoljuk csak.
 Tívesel $\lambda_2 < 0$, a rektoru, folyam
 oscillálva.

$$1 < \lambda_1 = \frac{1}{3}(2 + \sqrt{10}) \rightarrow \underline{e}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(2 + \sqrt{10}) \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$1 > \lambda_2 = \frac{1}{3}(2 - \sqrt{10}) \rightarrow \underline{e}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(2 - \sqrt{10}) \\ 1 \end{pmatrix}$$

Neuegensülteri folyamatok

72/a

(Geszt. Tamás előadása alapján)

Kit lehet mondani az egyensültytől távoli folyamatokról a statisztikus fizika alapján?

Termodinamika: — időben nincs változás
— nem folyadék áramok

Egyensülty, de van áram: szupravezetés, a felületen diamágneses, nem villamos áram folyik → Meissner-effektus

Neuegensülteri foly.

- elektromos } áram
- hővezetési } diffúzió
- anyag } →
- belső súrlódás, viskozitás → tenzor-áram

Invertibilis foly. → entropia termelés

pl. (leggyakoribb) Ohm-törvény → Drude-modell
nemeg. foly.: az \underline{E} -tér "szillett" az egyensültyből

$$\vec{j} = e n \vec{v} = e n \cdot \frac{e \vec{E}}{m} \tau = \underbrace{\frac{e^2 n}{m}}_{\sigma} \vec{E} \equiv \sigma \vec{E}$$

τ : ütközési idő

Kvantummechanika + perturbációelmélet alapján (E-tér a perturbáció):

$$\sigma = \frac{1}{4\pi T} \int_0^{\infty} \langle I(0) I(t) \rangle dt$$

egyensülteri áram

Az átlagérték miatt "elfelejt", hogy mennyi mozgott.
 τ idő után "elvérti az emlékezetét".

72/b

$$\sigma \approx \frac{1}{2_{BT}} \langle I(t)^2 \rangle_{eq} e^{-t/\tau} dt = \frac{1}{2_{BT}} \langle I(t)^2 \rangle_{eq} \cdot \tau$$

Fémekben jó, de ionizált gázban nem.
 félvezetőkben

$$\begin{aligned} \langle I^2 \rangle_{eq} &= \left\langle \sum_i e v_i \sum_j e v_j \right\rangle_{eq} = e^2 \left\langle \sum_{ij} v_i v_j \right\rangle_{eq} = e^2 \sum_{ij} \langle v_i v_j \rangle_{eq} = \\ &= e^2 N \langle v^2 \rangle_{eq} = e^2 \frac{2_{BT}}{m} \cdot n \end{aligned}$$

$\delta_{ij} \langle v^2 \rangle$

Maxwell-Boltzmann
 statisztika

$$\Rightarrow \sigma = \frac{1}{2_{BT}} \cdot \frac{e^2 2_{BT}}{m} n \tau = \frac{e^2 n \tau}{m}$$

Kijött a Drude-modell

Általában a Kubo-formula erősebb

$$\sigma = \frac{1}{2_{BT}} \int_0^{\infty} \langle I(t) I(0) \rangle dt$$

memóriaerősség
 memóriáság
 disszipáció

↳ korrelációs-függvény
 (fluktuáció)

FD: fluktuáció-disszipáció-tétel

Konkrétan látnunk erre példát, mágneses susceptibilitás
 (lásd 51 a/b oldal.) \underline{B} -tér \rightarrow \underline{M} \rightarrow $\chi = \frac{\partial M}{\partial B}$

Hogyan lehet mérni a fluktuációt?

tipikusan $\tau \sim 10^{-15}$ sec, gyors felszámoló félvezetőkben
 valós időben nehéz megmérni az $I(t)$ -t.

De $\mathcal{F}\{I(t)\}$ Fourier-transzformált
mérték!

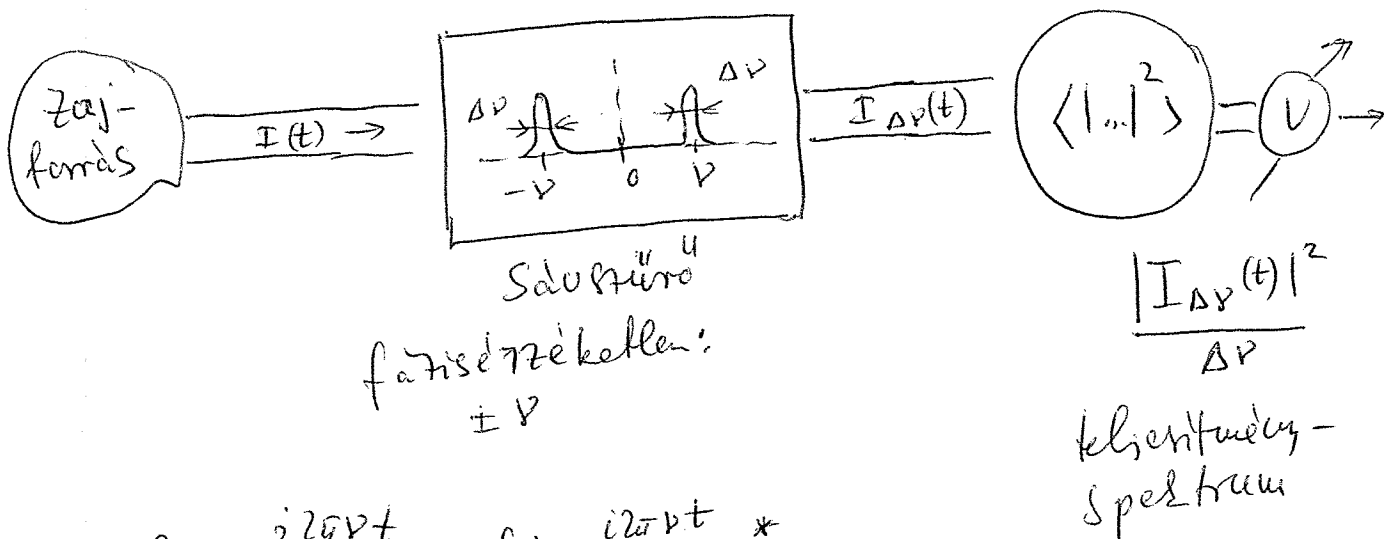
73/a

Nyquist-Johnson-zaj: ellenállás "zaja"

Johnson: métes
Nyquist: elmélet

Mater alap: Wiener-Hincin-tétel

- a zajt Fourier-transzformálni kell
- egy $\Delta\nu$ intervallumban az INTENZITÁST mérjük
→ teljesítmény-spektrum
- a Wiener-Hincin: ez éppen a korrelációs-fü.
Fourier-transzformáltja!



$$I(t) = \int d\nu e^{-i2\pi\nu t} I_\nu = \int d\nu e^{i2\pi\nu t} I_\nu^*$$

↑
 $I(t)$ valós

$$\langle |I_{\Delta\nu}(t)|^2 \rangle = \left(\int_{-\nu-\Delta\nu}^{-\nu} + \int_{\nu}^{\nu+\Delta\nu} \right) d\nu' \left(\int_{-\nu-\Delta\nu}^{-\nu} + \int_{\nu}^{\nu+\Delta\nu} \right) d\nu'' \langle I_{\nu'} I_{\nu''}^* \rangle e^{i2\pi(\nu''-\nu')t}$$

Wiener-Hincin: ugyan ez van a korrelációs-fü.-ben is σ

$$\langle I(t) I(t') \rangle = \int d\nu' \int d\nu'' \langle I_{\nu'} I_{\nu''}^* \rangle e^{i2\pi(-\nu't + \nu''t')} = \nu'(t-t) + (\nu''-\nu')t'$$

Stacionárius zaj:
csak $t-t'$ -tól függ

$$\Rightarrow \langle I_{\nu'} I_{\nu''}^* \rangle = P(\nu') \delta(\nu' - \nu'')$$

1/97

73/6

$$\langle |I_{\Delta\nu}(t)|^2 \rangle \approx [P(\nu) + P(-\nu)] \cdot \Delta\nu$$

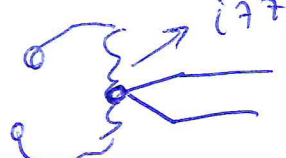
az a teljesítmény-spektrum
 $\equiv S(\nu) = P(\nu) + P(-\nu)$

Az előzőket felhasználva:

$$\langle I(0) I(t) \rangle = \int d\nu P(\nu) e^{i2\pi\nu t} \Rightarrow$$

$$P(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i2\pi\nu t} \langle I(0) I(t) \rangle$$

$$\hookrightarrow S(\nu) = P(\nu) + P(-\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i2\pi\nu t} \langle I(0) I(t) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i2\pi\nu t} \langle I(0) I(t) \rangle$$

mérés  $i2\pi\nu t$
 Fermionen \rightarrow az $|U|^2$ mér.
 mivel fertőltségét merte

Nyquist-formula: $\langle |V_{\Delta\nu}|^2 \rangle = \Delta\nu 4k_B T \cdot R$

A mérési alap: zaj \rightarrow szűrés \rightarrow intenzitás, $||^2$.

ilyen alapvető sor helyen használnak.

p.l. Kvantummechanikai értelemben:

$$\Delta \rightarrow |U|^2 \sim \frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow \text{differenciális mérési hatáskeresztmetszet}$$

Eücler-sturm $e^{-\eta d\Omega}$ \rightarrow térfogat

$\nu \ll \frac{1}{\tau}$ exponenciális \rightarrow $\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i2\pi\nu t} \langle I(0) I(t) \rangle$

$$S(\nu) \approx S(0) = 4 \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle I(0) I(t) \rangle = 4k_B T \sigma = \frac{4k_B T}{R}$$

\hookrightarrow ellentét

$$\frac{\langle |V_{\Delta\nu}|^2 \rangle}{\Delta\nu} = R \frac{\langle |I_{\Delta\nu}|^2 \rangle}{\Delta\nu} = R^2 S(\nu) = \frac{4k_B T \cdot R}{R}$$

Kiterjesztés: w magy + kv.

Nyquist-formula

↓
 klasszikus
 $\langle I(t) I(0) \rangle \approx$
 $\langle I(t) I(0) \rangle =$
 \downarrow valósz. sz.
 $S(\nu) =$
 $4 \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i2\pi\nu t} \langle I(0) I(t) \rangle$
 \downarrow
 teljesítmény-spektrum

Inverzibilis folyamatok:

74/a

Kiderül, hogy ez a termikus transzport-folyamatok korrelációja.

pl.: hővezetés, diffúzió, viskozitás.

Termikus transzport és diffúzió:

$$\vec{J}_q = \lambda \text{ grad } T \quad : \text{ hőátvitel}$$

$$\vec{J}_m = D \text{ grad } c \quad \rightarrow \text{ oldott anyag koncentrációja}$$

↑
tömeg (anyag) áram

Itt nincs perturbáció, mint az elektronos vezetéssel (E-tér volt ott). Itt a szelvényi feltételek miatt

lent a rendszer nemegyensúly.

Magyarul az ún. Erőssépről és a rendszer időfüggéséről írunk.

Kezdeti effektusok (Onsager):

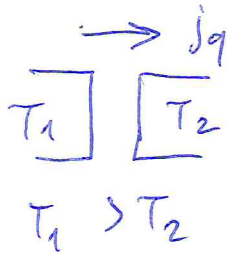
$$\vec{J}_q = \lambda \text{ grad } T + a_{qm} \text{ grad } c$$

$$\vec{J}_m = D \text{ grad } c + a_{mq} \text{ grad } T$$

↑
termodiffúzió (pl. urán elválasztása az urán izotópjainak más az a_{qm} együtthatója, más módok: centrifuga)

el. tér $\underline{E} \Rightarrow$ hőátvitel \vec{J}_q

grad T \Rightarrow \vec{J}_c elektronos áram

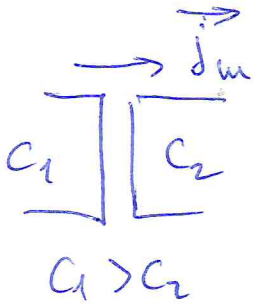
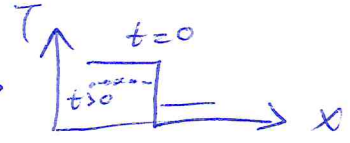
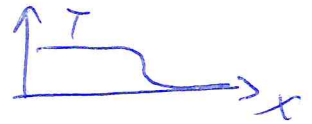


Tömbök belül, gyors kiegyenlítődés, relaxáció, míg a két tömb között lassú az energiaátadás

$$T_1 - T_2 = X_T$$

74/6

Pl. két Cu-tömböt összehúzó, de egyik nem jó: De ha réteget is használunk (papírt) festmény, akkor Cu-n belül gyors kiegyenlítődés.



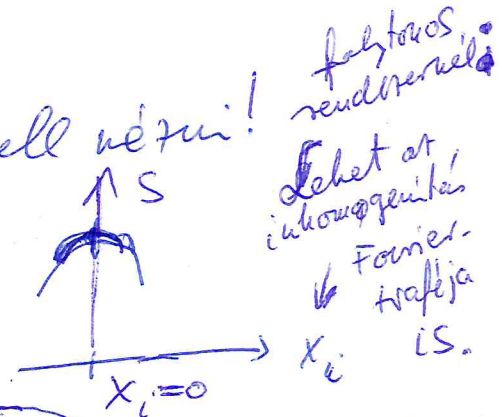
$$C_1 - C_2 = X_C \rightarrow \text{diszkrét rendszám együtt egyensúlyban: } X_C = 0$$

Ousager ötlete

: Az entropiát kell nézni!

$$S = S_{max} - \frac{1}{2} \sum_{ij} g_{ij} X_i X_j$$

↑
eq.
↑
szim. matrix



X_i(t) változók: pl. $\Delta T(x,t)$, $\Delta C(x,t)$
 egyensúly: $X_i = 0$ $\forall i$ -re
 → egyensúlytól való eltérés

Ousager feltétele: kis eltérés az egyensúlytól:
 $X_i = -\sum_k \lambda_{ik} X_k$

- "Kontinuitási egyenlet" →
- "termodinamizálási erő" →

$$F_i = -X_i$$

$$F_i = -\frac{\partial S}{\partial X_i} = \sum_j g_{ij} X_j$$

Ousager feltétele:

$$F_i = \sum_k L_{ik} F_k$$

Ousager-egüthetőség

$$L_{ik} = L_{ki}$$

Allítás (Ousager-reláció)

$$F_i = -X_i = \sum_k \lambda_{ik} X_k = \sum_k \lambda_{ik} (g^{-1})_{kj} F_k = L_{ik}$$

Bitonyitás:

75/a

Ar egyrészt szimil

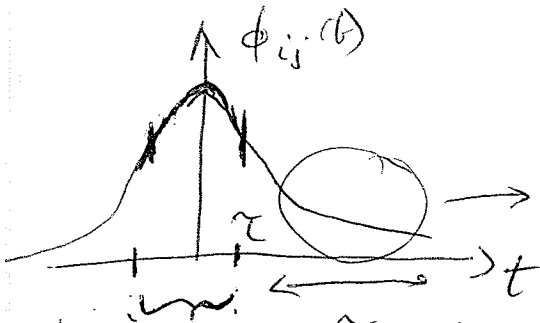
$$P(\{X_i\}) = A \cdot e^{-\frac{S(X)}{Z_B}} = A' e^{-\frac{1}{2Z_B} \sum_{ij} g_{ij} X_i X_j}$$

Gauss-elvadás
 $\sigma^2 = \langle X^2 \rangle$

$\Rightarrow \sigma^2 \Rightarrow \langle X_i X_j \rangle = Z_B (g^{-1})_{ij}$
 Hérés

$$\langle F_k X_i \rangle = \sum_j g_{kj} \langle X_j X_i \rangle = Z_B \sum_j g_{kj} (g^{-1})_{ji} = Z_B \delta_{ki}$$

Teljesítség a $\phi_{ij}(t) = \langle X_i(t) X_j(0) \rangle$ Korrelációs-füv.!
 $\tau_{miller} \lesssim \tau \ll \tau_{max}$



$$\dot{X}_i(t) = -F_i(t) \text{ zöve: az invar. formot}$$

1-2 ütéses $\rightarrow \tau_{miller}$ lokális

τ_{max}

hidrodinamizai transzport lassú.

Termodinamizai határesetben a két időskála elcsúszhat \Rightarrow létezik transzport-egyenlet.

$$\phi_{ij}(\tau) \approx \phi_{ij}(0) = Z_B (g^{-1})_{ij}$$

τ időskála meg alig tér el $\phi_{ij}(0)$ -tól!

derivált: $\dot{\phi}_{ij}(\tau) = ?$ 1-2 ütéses után már a derivált az invar. formo egyenleteiből számolható. Ez az Onsager-féle regressziós hipotézis.

Egyenlet:

75/6

$$\phi_{ij}(\tau) = \langle x_i(t) x_j(0) \rangle \Big|_{t=\tau} = \langle \dot{x}_i(\tau) x_j(0) \rangle =$$

$$= - \langle F_i(\tau) x_j(0) \rangle = - \sum_k L_{ik} \langle F_k(\tau) x_j(0) \rangle \approx - \sum_k L_{ik} \langle F_k(0) x_j(0) \rangle =$$

↑
Oscillator regressziós hipotézis

$\tau \rightarrow 0$
 $\epsilon_B \delta_{kj}$

$$= - L_{ij}$$

Más képpen számolva $\phi_{ij}^{\circ}(\tau)$:

$$\phi_{ij}^{\circ}(\tau) = \int_0^{\tau} \phi_{ij}^{\circ}(t) dt = \int_0^{\tau} \frac{d}{dt} \langle \dot{x}_i(t) x_j(0) \rangle dt = \int_0^{\tau} \frac{d}{dt} \langle \dot{x}_i(0) x_j(-t) \rangle dt$$

időeltolás

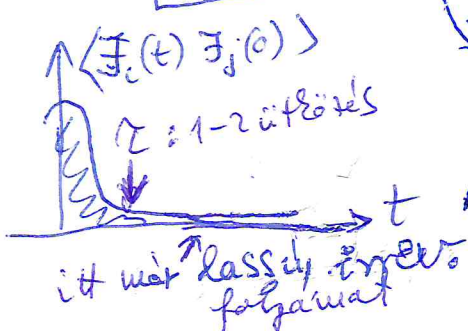
$$= - \int_0^{\tau} \langle \dot{x}_i(0) \dot{x}_j(-t) \rangle dt = - \int_0^{\tau} \langle \dot{x}_i(t) \dot{x}_j(0) \rangle dt$$

$\dot{x}_i(0) \quad \dot{x}_j(0)$
 $-F_i(0) \quad -F_j(0)$

összehasonlítva:

$$L_{ij} = \int_0^{\tau} \langle F_i(t) F_j(0) \rangle dt$$

Ez ennyi a δ correlációk felé a \dot{x}_i sebességre integrálva!



Termo. hat. esetben L_{ik} független τ pontos választásuktól.

Szimmetriarelációk: Időtárhoz invariancia

$$L_{ij} \Rightarrow \langle F_i(t) F_j(0) \rangle = \langle F_i(0) F_j(-t) \rangle = \langle (-F_i(0)) \cdot (-F_j(t)) \rangle =$$

↑
vektorátvitel
 $F_i \rightarrow -F_i$

$$= \langle F_j(t) F_i(0) \rangle \Rightarrow L_{ji}$$

$$\Rightarrow L_{ij} = L_{ji}$$

Mágneses térben \underline{B} irányát is fordítani kell.



$$L_{ij}(\vec{B}) = L_{ji}(-\vec{B})$$

Ha $\underline{B}=0$, a rendszer időtükr. inv. a zéró térf. telebe van szedve az irreversibilitás!

Appendix A

Bose-gaz termodinamikai mérésegei

$T > T_c$ fölött:

(1) $\phi(T, V, \mu) = -pV = -\frac{V}{\lambda_T^3} k_B T g_{5/2}(z)$, $\forall T$ -re

$T > T_c$ -re: $N = \int_0^\infty g(\epsilon) f_-(\epsilon) d\epsilon = A \cdot V \cdot \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1} e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon =$

$x = \beta\epsilon$
 $= A \cdot V \cdot (k_B T)^{3/2} \cdot g_{3/2}(z) \Gamma(\frac{3}{2})$, ahol $A = 2\sqrt{\frac{2m}{h^2}}^{3/2}$

$T = T_c$ -re:
($\mu=0, z=1$) $N = AV (k_B T_c)^{3/2} g_{3/2}(1) \Gamma(\frac{3}{2})$

Így (2) $\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = \frac{g_{3/2}(1)}{g_{3/2}(z)}$ $0 < z < 1$.

Allapotegyenlet: (3) $N = AV (k_B T)^{3/2} \Gamma(\frac{3}{2}) g_{3/2}(z) = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z)$ $T > T_c$

Ézt beírva (1)-be: $pV = N k_B T \cdot \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$ $T > T_c$

Energia: $E = \int_0^\infty \epsilon g(\epsilon) f_-(\epsilon) d\epsilon = A \cdot V \cdot \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{z^{-1} e^{\beta\epsilon} - 1} =$
 $= A \cdot V \cdot (k_B T)^{5/2} \cdot \Gamma(\frac{5}{2}) g_{5/2}(z)$

Felhasználva (3)-at:

$$\frac{E}{N} = k_B T \frac{\Gamma(\frac{5}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2})} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} = \frac{3}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$$

Érdekes módon is kiszámolható a $pV = \frac{2}{3} E$ is (4) alapján.

$$(5) E = \begin{cases} \frac{3}{2} N k_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} = \frac{3}{2} N k_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, & T > T_c \\ \frac{3}{2} N k_B T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2} \cdot \frac{\varphi(5/2)}{\varphi(3/2)}, & T < T_c \end{cases} \leftarrow \text{lásd (44/a) oldalt.}$$

Kémiai potenciál: $T < T_c$ -re $\mu = 0$

$T > T_c$: $z = e^{\beta \mu}$ és (2) alapján számolható μ .

Entropia: Gibbs-Dahlem-relició alapján ($E = TS - pV + \mu N$):

$$S = \frac{E + pV - \mu N}{T}, \quad T > T_c \text{-re}; \quad \mu = k_B T \ln z$$

$$\text{így } S = \frac{5}{3} \frac{E}{T} - N k_B \ln z$$

$$(6) \frac{S}{N k_B} = \begin{cases} \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \ln z, & T > T_c \\ \frac{5}{2} \frac{\varphi(5/2)}{\varphi(3/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, & T < T_c \end{cases} \leftarrow \text{lásd (44/a) oldalt.}$$

C_V kifejezése: $C_V = \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_{V, N}$. Sima részeg levél $\frac{d g_{5/2}(z)}{dT}$ -re.

$$\Gamma(s) \cdot g_s(z) = \int_0^\infty \frac{x^{s-1} dx}{\frac{1}{z} e^{x+\alpha} - 1} \stackrel{z=e^{-\alpha}}{\equiv} \int_0^\infty \frac{x^{s-1} dx}{e^{x+\alpha} - 1} = \int_0^\infty x^{s-1} \frac{e^{-(x+\alpha)}}{1 - e^{-(x+\alpha)}} dx =$$

$$= \int_0^\infty x^{s-1} e^{-(x+\alpha)} \sum_{l=0}^\infty e^{-(x+\alpha)l} dx = \sum_{l=0}^\infty z^{l+1} \int_0^\infty x^{s-1} e^{-(l+1)x} dx = \sum_{l=0}^\infty \frac{z^{l+1}}{(l+1)^s} = \Gamma(s) \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^s}$$

$$\Rightarrow (7) \quad g_{5/2}(z) = z + \frac{z^2}{2^5} + \frac{z^3}{3^5} + \dots$$

(7) - ből számunk látható, hogy

3

$$(8) \quad g_s(z) = z \cdot \frac{d}{dz} g_{s+1}(z)$$

(7) és (8) alapján már hámolként C_V .

De még hűség van $\left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{V,N}$ -re is!

$$(2) \text{ - ből: } \left(\frac{T}{T_c} \right)^{-3/2} = \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \quad / \frac{\partial}{\partial T}$$

$$\Rightarrow -\frac{3}{2} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{-5/2} \cdot \frac{1}{T_c} = \frac{g'_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \cdot \left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{V,N}$$

$$-\frac{3}{2} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{-5/2} \frac{1}{T_c} = \frac{1}{z} \cdot \frac{g'_{1/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \cdot \left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{V,N}$$

(2) - + felhasználva:

$$-\frac{3}{2} T = \frac{1}{z} \cdot \frac{g'_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \cdot \left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{V,N}$$

$$\text{ / egy (8) } \quad \left[\frac{1}{z} \cdot \left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{V,N} = -\frac{3}{2T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right]$$

Végül (5) első alakjából, $T > T_c$ -re ($T_c(V,N)$ rögzített!)

$$C_V = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_{V,N} = \frac{3}{2} N k_B T_c \cdot \left. \frac{\partial}{\partial T} \left[\left(\frac{T}{T_c} \right)^{5/2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \right] \right|_{V,N} =$$

$$= \frac{3}{2} \frac{N k_B T_c}{g_{3/2}(1)} \left[\frac{5}{2} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \frac{1}{T_c} \cdot g_{5/2}(z) + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{5/2} \cdot g'_{5/2}(z) \cdot z' \right] \stackrel{(2),(7)}{=} \uparrow$$

$$= \frac{3}{2} N k_B T_c \left[\frac{5}{2} \frac{1}{T_c} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} + \frac{T}{T_c} \frac{1}{z} \cdot z' \frac{g'_{3/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right] \stackrel{(8)}{=} \uparrow$$

$$= N k_B \left[\frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right], \quad T > T_c$$

$$(g) \frac{C_V(T)}{N k_B} = \begin{cases} \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{g}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} & , T > T_c \\ \frac{15}{4} \frac{g(\frac{z}{T})}{g(\frac{z}{T_c})} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} & , T < T_c, \text{ lásd (44/a) adalt.} \end{cases}$$

4

$C_p(T)$ megoldása ($T > T_c$ -re):

$H(T, p, N) = E + pV$ és $dH = Tds + Vdp + \mu dN$ $\leftarrow pV = \frac{2}{3}E$

$\Rightarrow C_p = T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{p, N} = \frac{\partial H}{\partial T} \Big|_{p, N}$ és $H = E + pV = E + \frac{2}{3}E = \frac{5}{3}E$

így $C_p = \frac{5}{3} \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_{p, N}$ és $E = \frac{3}{2} N k_B T \cdot \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$

jelölés: $h(z) = \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$

(5) másodí. aladjából kell kinyerni, mert ∇ nem rögzítve.

És $\frac{d h(z)}{dz} = \frac{g'_{5/2}(z) g_{3/2}(z) - g_{5/2}(z) g'_{3/2}(z)}{g_{3/2}^2(z)} =$
 $= \frac{\frac{1}{z} g_{3/2}^2(z) - \frac{1}{z} g_{5/2}(z) g_{1/2}(z)}{g_{3/2}^2(z)} = \frac{1}{z} \left(1 - \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right)$

(10) $h'(z) = \frac{1}{z} \left(1 - h(z) \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right)$

És $C_p = \frac{5}{3} \frac{3}{2} N k_B \frac{\partial T h(z)}{\partial T} \Big|_{p, N} = \frac{5}{2} N k_B \left[h(z) + T \cdot h'(z) \cdot \frac{\partial z}{\partial T} \Big|_{p, N} \right]$

$\Rightarrow \frac{C_p}{N k_B} = \frac{5}{2} \left[h(z) + \frac{T}{z} \left(1 - h(z) \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right) \cdot \frac{\partial z}{\partial T} \Big|_{p, N} \right] = (*)$

Szücsig van $\frac{\partial z}{\partial T} \Big|_{p, N}$ kinyújtás a.

(1) alapján $p = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) \Rightarrow g_{5/2}(z) = a T^{-5/2} p \Big|_{\frac{\partial}{\partial T} \Big|_{p, N}}$

$\Rightarrow \frac{1}{z} g_{3/2}(z) \cdot \frac{\partial z}{\partial T} \Big|_{p, N} = \frac{\partial}{\partial T} \left(a T^{-5/2} p \right) = -\frac{5}{2} a T^{-7/2} p = -\frac{5}{2} \frac{a T^{-5/2} p}{T} = \boxed{-\frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{T}}$

$$(11) \quad \left[\frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right]_{P,N} = - \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} = - \frac{5}{2} h(z)$$

5

Est heurva C_p \otimes -gal jelölt egyenletbe:

$$\begin{aligned} \frac{C_p}{Nk_B} &= \frac{5}{2} \left[h(z) - \frac{5}{2} h(z) \left(1 - h(z) \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right) \right] = \\ &= \frac{5}{2} \left[-\frac{3}{2} h(z) + \frac{5}{2} h(z)^2 \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right] = \\ &= \frac{25}{4} \left(\frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right)^2 \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, \text{ ha } T > T_c \end{aligned}$$

$$(12) \quad \frac{C_p(T)}{Nk_B} = \frac{25}{4} \frac{[g_{5/2}(z)]^2 g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^3} - \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)}, \text{ ha } T > T_c$$

$T < T_c$ -re nincs értelmes C_p , mert ha $p = \text{all.} \Rightarrow$
 $T = \text{all.}$ ellenor.

Kompresszibilitás, $K_T = - \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N}$

(4) állapotegyenletből:

$$V = \frac{Nk_B T}{P} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} = \frac{Nk_B T}{P} h(z)$$

$$K_T = - \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_{T,N} = - \frac{Nk_B T}{V} \cdot \frac{\partial \left(\frac{h(z)}{P} \right)}{\partial P} \Big|_{T,N} = - \frac{Nk_B T}{V} \frac{h(z) \frac{\partial z}{\partial P} \Big|_{T,N} - h(z)}{P^2} = \otimes$$

szűrésig van $\frac{\partial z}{\partial P} \Big|_{T,N}$ -re + Ismét $p = a T^{5/2} g_{5/2}(z)$ deriválva
 p -mentes $\Rightarrow 1 = a T^{5/2} g'_{5/2}(z) \cdot \frac{\partial z}{\partial P} \Big|_{T,N} = a T^{5/2} \frac{1}{z} g_{3/2}(z) \frac{\partial z}{\partial P} \Big|_{T,N} =$

$$= P \cdot \frac{g_{3/2}(z)}{g_{5/2}(z)} \cdot \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial P} \Big|_{T,N} \Rightarrow$$

$$\frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial P} \Big|_{T,N} = \frac{h(z)}{P} \quad (13)$$

Est beírva κ_T (*)-gal jelölt alakja: (10) képlet

$$\kappa_T = - \frac{N \epsilon_{BT}}{V} \frac{h'(z) z h(z) - h(z)^2}{p^2} = - \frac{N \epsilon_{BT}}{V} \frac{(1 - h(z) \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)}) h(z) - h(z)^2}{p^2}$$

$$= \frac{N \epsilon_{BT}}{pV} \cdot \frac{h(z)^2 \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)}}{p} = \frac{h(z)}{p} \cdot \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} = \frac{V}{N \epsilon_{BT}} \cdot \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$$

$\underbrace{pV}_{\frac{1}{\beta(z)}}$

$$(14) \quad \kappa_T = \frac{V}{N \epsilon_{BT}} \cdot \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad T > T_c$$

$T < T_c$ -re nincs értelmezve κ_T , mert ha $T = \text{áll} \Rightarrow p = \text{áll}$

κ_S kompresszibilitás (adiabátikus): $\kappa_S = - \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_{S, N}$

Includimus & a $pV^{5/3} = \text{áll}$ adiabata egyenletéből!

Deriválva p. szerint

$$\Rightarrow V^{5/3} + p \frac{5}{3} V^{2/3} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_{S, N} = 0 \Rightarrow V = - \frac{5}{3} p \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_{S, N}$$

$$\Rightarrow \kappa_S = - \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_{S, N} = \frac{3}{5} \frac{1}{p} \quad \forall T\text{-re igaz}$$

p-t (4)-ből kapjuk $T > T_c$ -re. Míg $T < T_c$ -re

$$p = \frac{\epsilon_{BT}}{\lambda_T^3} \varphi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right) \quad \text{és} \quad N = \frac{V}{\lambda_T^3} \psi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right) \leftarrow T = T_c \text{ esetén, és erre}$$

$$\text{alapján} \quad p = \frac{\epsilon_{BTc}}{\lambda_{Tc}^3} \frac{T}{T_c} \frac{\lambda_{Tc}^3}{\lambda_T^3} \varphi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right) = \frac{N \epsilon_{BTc}}{V} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2} \frac{\varphi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right)}{\psi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right)}$$

így

$$(15) \quad \frac{\kappa_S(T)}{\frac{V}{N \epsilon_{BTc}}} = \begin{cases} \frac{3}{5} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{5/2}(z)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-1}, & T > T_c \\ \frac{3}{5} \frac{\varphi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right)}{\psi\left(\frac{\lambda_T}{z}\right)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{-5/2}, & T < T_c \end{cases}$$

$\frac{C_p}{C_v}$ számolás $T > T_c$ -re: $\frac{C_p}{C_v} = \frac{\frac{5}{3} \frac{\partial E}{\partial T} |_{P,N}}{\frac{\partial E}{\partial T} |_{V,N}}$

$PV = \frac{2}{3} E$ alapján

$$\frac{C_p}{C_v} = \frac{\frac{5}{3} \frac{\partial(PV)}{\partial T} |_{P,N}}{\frac{2}{3} \frac{\partial(PV)}{\partial T} |_{V,N}} = \frac{5}{3} \frac{P}{V} \frac{\frac{\partial V}{\partial T} |_P}{\frac{\partial P}{\partial T} |_V} = \frac{5}{3} \frac{P}{V} \frac{-\frac{\frac{\partial P}{\partial T} |_V}{\frac{\partial V}{\partial T} |_V}}{\frac{\partial P}{\partial T} |_V} =$$

$$= -\frac{5}{3} \frac{P}{V} \cdot \frac{\partial V}{\partial P} |_T = \frac{5}{3} P K_T \leftarrow \text{ide beírva (14)-et} \Rightarrow$$

$$\frac{C_p}{C_v} = \frac{5}{3} P \cdot \frac{V}{N \epsilon_B T} \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \stackrel{(4)}{=} \frac{5}{3} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \cdot \frac{g_{1/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$$

1gy

$$\frac{C_p}{C_v} = \frac{5}{3} \frac{g_{5/2}(z) g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^2} \stackrel{(8) \text{ és } (11)}{=} \frac{\frac{\partial z}{\partial T} |_{P,N}}{\frac{\partial z}{\partial T} |_{V,N}} \quad , T > T_c$$

$T < T_c$ -re $\frac{C_p}{C_v}$ nincs értelmezve, mert C_p nincs értelmezve,
 hiszen $P = \text{all.} \Rightarrow T = \text{all.} \quad T < T_c$ -re.

Megj.: Felhasználva (14) és (15) kifejezést K_T és K_S -re
 könnyen látható, hogy teljesül az általános
 termodinamikai reláció.

$$\frac{C_p}{C_v} = \frac{K_T}{K_S}$$

Hő tágulási-együttható: $\alpha = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} |_{P,N} \quad , T > T_c$ -re

C_p számolásánál látható, hogy $C_p = \frac{5}{3} \frac{\partial E}{\partial T} |_{P,N} = \frac{5}{2} \frac{\partial PV}{\partial T} |_{P,N} =$
 $= \frac{5}{2} P \cdot \frac{\partial V}{\partial T} |_{P,N} = \frac{5}{2} P V \cdot \alpha \Rightarrow$ felhasználva (12)-t

$$\alpha = \frac{2}{5} \frac{C_p}{PV} = \frac{2}{5} \frac{N \epsilon_B}{PV} \left(\frac{25}{4} \frac{[g_{5/2}(z)]^2 g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^3} - \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right)$$

(4) $\rightarrow \frac{1}{T} \cdot \frac{g_{3/2}(z)}{g_{5/2}(z)}$

gy

$$(16) \quad \alpha(T) = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z) g_{1/2}(z)}{[g_{3/2}(z)]^2} - \frac{3}{2} \right), \quad T > T_c$$

$T < T_c$ -re nincs értelmezve α , mert c_p nincs értelmezve.

Hangsebesség: $v_{hang} = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{S,N}}$, ahol $\rho = \frac{mN}{V}$
 térfégsűrűség

Éz kapcsolatra hozhat' k_s -el, mi:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial p}{\partial \frac{mN}{V}} \right|_{S,N} &= \frac{1}{mN} \cdot \left. \frac{\partial p}{\partial \frac{1}{V}} \right|_{S,N} = \frac{1}{mN} \left. \frac{\partial p}{\partial V} \right|_{S,N} \cdot \frac{1}{\frac{\partial \frac{1}{V}}{\partial V}} = -\frac{1}{mN} V^2 \left. \frac{\partial p}{\partial V} \right|_{S,N} \\ &= -\frac{1}{mN} V^2 \frac{1}{\left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{S,N}} = -\frac{V^2}{mN} \cdot \frac{1}{-V k_s} = \frac{V}{mN} \frac{1}{k_s} \end{aligned}$$

Felhasználva (15)-t \Rightarrow

$$(17) \quad \frac{v_{hang}(T)}{\sqrt{\frac{2k_B T_c}{m}}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{5}{3} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \frac{T}{T_c}}, & \text{ha } T > T_c \\ \sqrt{\frac{5}{3} \frac{g(\frac{5}{2})}{g(\frac{3}{2})} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2}}, & \text{ha } T < T_c \end{cases}$$

Megmutatható, hogy $\alpha, \frac{c_p}{c_v}, c_p \sim \frac{1}{T-T_c}$, ha $T \rightarrow T_c + 0$

Ezért és $k_T(T)$ is divergál $T=T_c$ -nél.

A fenti termodinamikai mennyiségeket $T > T_c$ -re parametrikus plattal lehet ábrázolni, ahol z a paraméter. Adott z -re (2)-ből számoljuk T/T_c -t és ebből a megfelelő termodinamikai mennyiséget.

APPENDIX B

Geszti előadás alapján

ionizált gáz (plazma), elektrolit:

9

Coulomb - kölcsönhatás \rightarrow átlagított - közelítés:

Debye - Hückel - elmélet.

$e z_b$ töltésű ionok semleges sűrűsége: $\sum_b n_b z_b = 0$

Átlagítás: egy "a" ion egy körülvett Coulomb tereztéren, melyet a többi ion hoz létre

A körülvett potenciál $\bar{\varphi}_a(r)$, benne a "b" ionok

sűrűsége: $\bar{n}_b(r) = n_b^0 e^{-\beta e z_b \bar{\varphi}_a(r)} \approx n_b^0 \left(1 - \frac{e z_b \bar{\varphi}_a(r)}{k_B T} \right)$

Ezért hozzáférhetünk a körülvett töltéshez:

$$\Delta \bar{\varphi}_a = -\frac{e}{\epsilon} \sum_b z_b \bar{n}_b(r) = -\frac{e}{\epsilon} \underbrace{\sum_b z_b n_b^0}_{=0, \text{ semleges}} + \frac{e^2}{\epsilon k_B T} \sum_b n_b^0 z_b^2 \bar{\varphi}_a = \frac{\bar{\varphi}_a}{\Lambda_D^2}$$

$\Rightarrow \bar{\varphi}_a(r) = \frac{e z_a}{4\pi \epsilon r} e^{-r/\Lambda_D}, \quad \Lambda_D = \frac{1}{\sqrt{\frac{e^2}{\epsilon k_B T} \sum_b n_b^0 z_b^2}}$

Értelmezés, ha $\frac{N}{V} \Lambda_D^3 \gg 1$.

Debye-féle körülvett potenciális hossz.

$\bar{\varphi}_a(r) = \frac{e z_a}{4\pi \epsilon} \cdot \frac{e^{-r/\Lambda_D}}{r} \approx \frac{e z_a}{4\pi \epsilon} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\Lambda_D} + \frac{1}{2} \frac{r}{\Lambda_D^2} + \dots \right)$

az ion saját Coulomb-tere \leftarrow

lapos vonzó gödör-potenciál \rightarrow 0, ha $r \rightarrow 0$

Az ion potenciális energiája a saját
leátruyétaló terében :

$$e z_a \cdot \frac{e z_a}{4\pi\epsilon} \frac{-1}{\Lambda_D}$$

$$\frac{\langle U_{\text{coulomb}} \rangle}{V} = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon} \left(\sum_a n_a z_a^2 \right) \left(\underbrace{\frac{e^2}{\epsilon_B T} \sum_b n_b z_b^2}_{1/\Lambda_D} \right) =$$

↑
dupla számolás ellen

$$= - \frac{e^3}{8\pi\epsilon \sqrt{\epsilon_B T}} \left(\sum_b n_b z_b^2 \right)^{3/2} \sim K_1^{3/2} \text{ lineáris helyett.}$$

↑
Exercício

$$G = \mu_0^* N_0 + \langle U_{\text{coulomb}} \rangle + T S_{\text{keverési}}$$

$$\Rightarrow \mu_1 = \frac{\partial G}{\partial N_1} \sim \sqrt{K_1} + \mu_{\text{keverési}}$$

↑
RT ln K₁

APPENDIX C (Genti el "adise alapja")

(11)

Inverzibilitás, master - egyenlet

↓ Pauli 1928

$|i\rangle$ "közelítő" energiasajátállapotok, P_i valószínűséggel betöltve.

$$\hat{H} \Rightarrow H_{ii} = E_i \text{ és } H_{ij} = 0, \text{ ha } i \neq j$$

$i \neq j : |H_{ij}| \ll E_i$ gyenge perturbáció

$$\sum_i P_i = 1$$

Fermi - arányosság:

$$W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ij}|^2 \delta(E_i - E_j)$$

Mivel \hat{H} hermitikus $\Rightarrow H_{ij} = H_{ji}^* \Rightarrow |H_{ij}|^2 = |H_{ji}|^2 \Rightarrow$

$$\Rightarrow W_{ij} = W_{ji}$$

időfüggés szimmetria
"reális egyensúly" energiamegtartó
átmenetek esetére

Eller a master - egyenlet:

$$\dot{P}_i = \sum_j W_{ij} P_j - \sum_j W_{ji} P_i \stackrel{W_{ij}=W_{ji}}{\equiv} \sum_j W_{ij} (P_j - P_i)$$

Levegőt lásd később.

A master - egyenletből belátható, hogy az $S = -k_B \sum_i P_i \ln P_i$

"nem-egyensúlyi" entrópia növekszik

$$\dot{S} = -k_B \sum_i \dot{P}_i \ln P_i + \sum_i P_i \underbrace{\frac{1}{P_i}}_{=1} \dot{P}_i = -k_B \sum_i \sum_j \underbrace{W_{ij}}_{\text{①}} (P_j - P_i) \ln P_i =$$

= 0

$$i \leftrightarrow j \Rightarrow -\epsilon_B \sum_{ij} W_{ji} (P_i - P_j) \ln P_j = +\epsilon_B \sum_{ij} W_{ij} (P_j - P_i) \ln P_i =$$

① = ②

$$\frac{1}{2} \epsilon_B \sum_{ij} W_{ij} (P_j - P_i) (\ln P_j - \ln P_i) \geq 0$$

② = $\frac{1}{2}(\text{①} + \text{②})$

≥ 0 , mert $(x_1 - x_2)(\ln x_1 - \ln x_2) \geq 0$
 $x \ln x$ monoton \uparrow

$\Rightarrow \dot{S} \geq 0$

- = 0, csak ha
- $P_i = P_j, \forall ij$ -re, mikrokanonikus
 - $W_{ij} = 0$, ha $P_i \neq P_j$: nem-ergodikus (ferromágnes, üveg)

A mikrokanonikus mozgásegyenletben időtükrözés szimmetria van. Az inverzibilitás (az időtükrözés sértése) a "nem túl specialis" kezdőfeltételhez következik.

Fontos még a lassú időskálájú mennyiségek kvalifikációja (termo).

A master-egyenlet levezetése:

Neumann-egyenlet a \hat{P} sűrűségmátrixra (lásd 5(a) oldal):

$$\dot{P}_{jk} = -\frac{i}{\hbar} \sum_e (H_{ie} P_{ek} - P_{je} H_{ek})$$

Idézés: $w_{jk} = \frac{E_j - E_k}{\hbar} \equiv \frac{H_{jj} - H_{kk}}{\hbar}$ és $P_{kk} = P_k$

Born-érvényesítés: $|w_{jk}| \gg H_{jk}, j \neq k$

$j \neq k$ (1) $\dot{P}_{jk} = -i w_{jk} P_{jk} - \frac{i}{\hbar} H_{jk} (P_k - P_j)$

$j = k$ (2) $\dot{P}_j = \dot{P}_j = -\frac{i}{\hbar} \sum_{l \neq j} (H_{jl} P_{lj} - P_{jl} H_{lj})$

$\frac{i}{\hbar} \sum_{e \neq jk} (H_{je} P_{ek} - H_{ek} P_{je})$
 kicsi, elhanyagoljuk Born-érvényesítés

(1) megadása S_{jk} -ra adott $P_k(t)$ mellett:

13/a

$$S_{jk}(t) = e^{-i\omega_{jk}t} S_{jk}(0) + \frac{i}{\hbar} H_{jk} \int_0^t dt' e^{-i\omega_{jk}(t-t')} (P_i(t') - P_k(t'))$$

Észt visztainva (2)-be:

$$\dot{P}_j(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{e \neq j} \left(e^{-i\omega_{ej}t} H_{je} S_{ej}(0) - e^{-i\omega_{je}t} H_{ej} S_{je}(0) \right) + \int_0^t dt' \sum_{e \neq j} \frac{|H_{je}|^2}{\hbar^2} \left(e^{i\omega_{ej}(t-t')} + e^{-i\omega_{ej}(t-t')} \right) (P_e(t') - P_j(t'))$$

Első tag: sokféle frekvenciával gyorsan oszcilláló tagok összege; zöldre interferenciák; az összeg gyorsan tart 0-hoz (hacsak $S_{je}(0)$ nem túl "specialis").

Második tag: a gyorsan oszcilláló exponenciálisok miatt zömmel a lassú $P_e(t') \approx P_e(t)$ -t zömmel (Markov-élethez), az integrál így zömmel:

$$\int_0^t dt' e^{i\omega_{ej}(t-t')} + \int_0^t dt' e^{-i\omega_{ej}(t-t')} = \dots = \int_{-t}^t d\tau e^{i\omega_{ej}\tau} \approx$$

$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega_{ej}\tau} = 2\pi \delta(\omega_{ej}) = 2\pi \hbar \delta(E_e - E_j)$$

$$\Rightarrow \dot{P}_j = \sum_e W_{je} (P_e - P_j), \text{ ahol } W_{je} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{je}|^2 \delta(E_j - E_e)$$

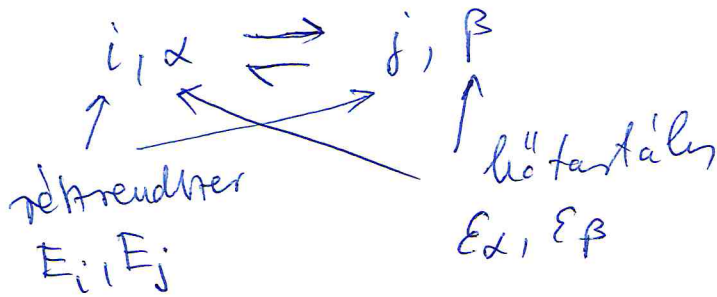
Master-egyenlet

Fermi-szabály

Rételetes egyensúly hőterhelésben lévő rendszerre:

13/b

A réterendszer energiája megváltozhat, ilyenkor a külvilággal a hőterhelés adja vagy veszi fel.



$$E_i + \epsilon_\alpha = E_j + \epsilon_\beta = E$$

időfüggő erőteljes:

$$W_{i\alpha j\beta} = W_{j\beta i\alpha}$$

Ha csak a réterendszer érdekel, akkor $W_{i\alpha j\beta}$ -t a hőterhelésre

- 1.) átlagolni kell a kezdő állapotban,
- 2.) összegezni a vég állapotban,

a teljes energia megmaradása mellett:

$$W_{ij} = \left(\frac{1}{W(E-E_j)} \sum_{\beta} \right) \sum_{\alpha} W_{i\alpha j\beta} \quad \left. \vphantom{W_{ij}} \right\} \Rightarrow \frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{W(E-E_i)}{W(E-E_j)}$$

$$W_{ji} = \left(\frac{1}{W(E-E_i)} \sum_{\alpha} \right) \sum_{\beta} W_{j\beta i\alpha}$$

de $W(E) = e^{S(E)/\epsilon_B}$, S a hőterhelés energiájú mikroállapotok száma.

$$\Rightarrow \frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{e^{\frac{1}{\epsilon_B} S(E-E_i)}}{e^{\frac{1}{\epsilon_B} S(E-E_j)}} = e^{\frac{1}{\epsilon_B T} (E_j - E_i)}$$

$$\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = e^{\frac{E_j - E_i}{\epsilon_B T}}$$

Rételetes egyensúly Monte Carlo módszerrel bonyolított.

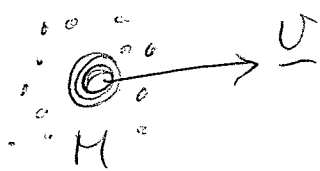
(Mivel nem az entropia nő, hanem a szabadenergia csökken:

$$F = E - TS = \sum (p_i E_i + \epsilon_B T p_i \ln p_i)$$

$$F = \sum p_i (E_i + \epsilon_B T \ln p_i) + \frac{\epsilon_B T}{\epsilon_B T} \sum p_i \frac{1}{p_i} p_i = \epsilon_B T \sum p_i \ln \tilde{p}_i, \text{ ahol } \tilde{p}_i = p_i e^{E_i/\epsilon_B T}$$

$$\Rightarrow \dot{F} = \epsilon_B T \sum_{ij} \tilde{w}_{ij} (\tilde{p}_j - \tilde{p}_i) \ln \tilde{p}_i = -\frac{\epsilon_B T}{2} \sum_{ij} \tilde{w}_{ij} (\tilde{p}_j - \tilde{p}_i) (\ln \tilde{p}_j - \ln \tilde{p}_i) \leq 0$$

Brown-mozgás és diffúzió



nehét mecsere (M tömegű) mozoghat az "élet löldös" közeg atomos közt.

Langevin-egyenlet:

$$M \dot{v} = -\Gamma v + F(x) + f(t)$$

Súrlódás
pl: Stokes-örvény

Erő "erő"
pl: gravitáció

fluktuáció "erő"
a közeg mecsere miatt

Feltételek:

$$6\pi\eta R$$

$$\langle f(t) \rangle = 0 ; \langle f(t) f(t') \rangle = C \delta(t-t') \quad \text{"fehér-zaj"}$$

$$C = 2k_B T \Gamma \quad (\text{Leveselés és 16. old.})$$

Allandó erő "erő" ellenében állandó átlagos sebesség; $\bar{v} = 0$

$$M \bar{v} = 0 = -\Gamma \bar{v} + F \Rightarrow \bar{v} = \mu F, \text{ ahol } \mu = \frac{1}{\Gamma}$$

a mozgás "erő" miatt

D diffúziós-egyenlet:

$$D = k_B T \mu \quad \text{Einstein-reláció}$$

Két leveles:

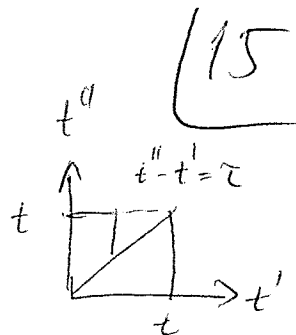
$$a) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \rightarrow n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle_t = 2Dt \quad (1)$$

$$De \quad \langle x^2 \rangle = \left\langle \int_0^t dt' v(t') \int_0^t dt'' v(t'') \right\rangle = \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle v(t') v(t'') \rangle$$

Oscillator - regresszió:

$$\langle v(t') v(t'') \rangle \approx \underbrace{\langle v^2 \rangle}_{\frac{2_B T}{M}} e^{-\frac{\Gamma}{M} |t' - t''|}$$



Igy $\langle X^2 \rangle \approx \frac{2_B T}{M} 2 \int_0^t dt' \int_0^\infty dt'' e^{-\frac{\Gamma}{M} \tau} = \frac{2_B T}{M} 2 \cdot \frac{M}{\Gamma} t =$

$$= 2 \frac{2_B T}{\Gamma} t = 2 2_B T \mu t$$

Összehasonlítva az előző oldalról (1)-el $\langle X^2 \rangle = 2Dt$

$$\Rightarrow \boxed{D = 2_B T \mu}$$

b.) Levegőtér: $F(x) = -\frac{\partial U}{\partial x}$ erőterben

$$f = n \mu F(x) - D \frac{\partial n}{\partial x} = -n \mu \frac{\partial U}{\partial x} - D \frac{\partial n}{\partial x} \quad \text{a'ra van felírva.}$$

Egyensúlyban: $n(x) = n_0 e^{-U(x)/2_B T} \Rightarrow$

$$\Rightarrow f = -n \mu \frac{\partial U}{\partial x} + D \frac{1}{2_B T} \frac{\partial U}{\partial x} n = 0$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{D}{2_B T}$$

↑ "teljes egyensúly"
nemcsak $\text{div} f = 0$, hanem
 $f = 0$ is!

Első alkalommal | Perrin

$$D = 2_B T \mu = 2_B T / \Gamma = 2_B T / (6 \pi \eta R) \rightarrow D \Rightarrow \eta$$

$$U = M g x \quad ; \quad n(x) \rightarrow n$$

$$\langle X^2(t) \rangle \stackrel{\text{①}}{\approx} 2Dt = 2 \frac{2_B T}{6 \pi \eta R} t \quad \text{mivel a } 2_B \text{ "mólek"}$$

$C = 2 \xi_B T \Gamma$ leveretése Langevin-egyenlet megoldása: 16

Leopen $F(x) = 0$ zűlső erőkét nélkül evet.

$$\boxed{\dot{v} = -\gamma v + \xi(t)}, \quad \gamma = \frac{\Gamma}{M} = \frac{1}{M\mu}$$

$\langle \xi(t) \rangle = 0,$ $\leftarrow \xi(t) = \frac{f(t)}{M}$

$\langle \xi(t') \xi(t'') \rangle = \frac{C}{M^2} \delta(t' - t'')$

állandó variálása: $\xi(t) = 0$ -ra $v(t) = v(0) e^{-\gamma t}$

ha $\xi(t) \neq 0 \Rightarrow v(t) = a(t) e^{-\gamma t}, \quad a(0) = v(0)$

$\Rightarrow \dot{v} = \dot{a} e^{-\gamma t} - \gamma a e^{-\gamma t} = -\gamma a e^{-\gamma t} + \xi(t)$ → Langevin-eg. jobb oldalán

$\Rightarrow \dot{a} = e^{\gamma t} \xi(t) \Rightarrow a(t) = v(0) + \int_0^t e^{\gamma t'} \xi(t') dt'$

$\Rightarrow v(t) = v(0) e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \xi(t') dt'$

ha $t \gg \tau^{-1} = \mu/\Gamma$ } $t \gg \tau^{-1}$ -re beáll az egyensúly, $\langle v^2(t) \rangle \rightarrow \xi_B T / M$

$\Rightarrow \langle v^2(t) \rangle_{t \gg \tau^{-1}} \approx e^{-2\gamma t} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{\gamma(t'+t'')} \langle \xi(t') \xi(t'') \rangle =$

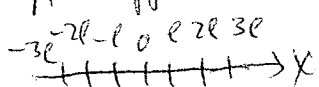
$= \frac{C}{M^2} e^{-2\gamma t} \int_0^t dt' e^{2\gamma t'} = \frac{C}{M^2} e^{-2\gamma t} \frac{e^{2\gamma t} - 1}{2\gamma} \rightarrow \Gamma/M$

$= \frac{C}{2M^2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \xrightarrow[t \gg \tau^{-1}]{} 0, \text{ ha } = \frac{C}{2M\gamma} = \frac{C}{2M\Gamma} = \frac{\xi_B T}{M}$ → egyensúly (MB)

$\Rightarrow \boxed{C = 2 \xi_B T \Gamma}$ dissipáció

fluktáció

Egyfajta fluktáció-dissipáció képlet a $D = \xi_B T \mu$ Einstein-reláció, A diffúzió az átlagos hely növekedés fluktációjához képest.



$\langle x^2 \rangle = \langle (\pm l \pm l \pm l \dots)^2 \rangle = \frac{l^2}{\tau} e^2 = 2Dt \Rightarrow D = \frac{l^2}{2\tau}$

1 dimenzióban.