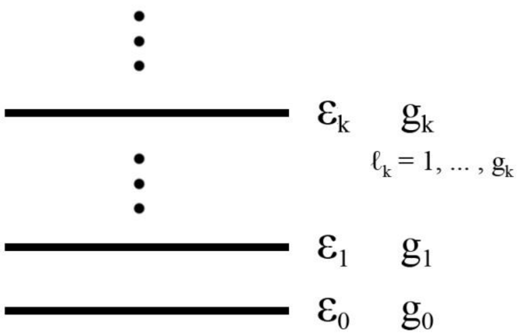
5. óra

N db, független, megkülönböztethető atom állapotösszege

(kanonikus tárgyalásmód)

A rendszer energiaszintjei az 1. ábrán láthatók. Mivel az energiaszintek általában többféleképp is megvalósulhatnak, ezért minden ε_k energiaszinthez tartozik egy g_k multiplicitás. Hogy az adott energiaszinten belül melyik állapotban van épp a részrendszer, azt az ℓ_k index adja meg.



1. ábra

N = 3-ra az állapot összeg a következőképp írható:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{k_1,\ell_1\}} \sum_{\{k_2,\ell_2\}} \sum_{\{k_3,\ell_3\}} e^{-\beta\left(\varepsilon_{k_1}+\varepsilon_{k_2}+\varepsilon_{k_3}\right)} = \sum_{\{k_1,\ell_1\}} \sum_{\{k_2,\ell_2\}} \sum_{\{k_3,\ell_3\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_1}} e^{-\beta\varepsilon_{k_2}} e^{-\beta\varepsilon_{k_3}} =$$

$$= \sum_{\{k_1,\ell_1\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_1}} \sum_{\{k_2,\ell_2\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_2}} \sum_{\{k_3,\ell_3\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_3}} =$$

$$= \sum_{\{k_1,\ell_1\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_1}} \sum_{\{k_2,\ell_2\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_2}}\, \zeta = \zeta \sum_{\{k_1,\ell_1\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_1}} \sum_{\{k_2,\ell_2\}} e^{-\beta\varepsilon_{k_2}} = \zeta^3$$

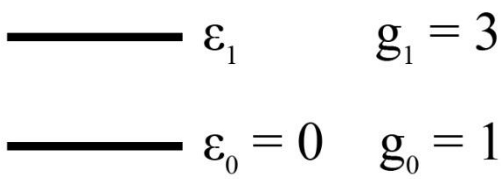
Általánosan itt is azt kapjuk, hogy

$$\mathcal{Z} = \zeta^N,$$

ahol az egyrészecske-állapotösszeg a következőképp számolható:

$$\zeta = \sum_{\{k,\ell\}} e^{-\beta\varepsilon_k} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{g_k} e^{-\beta\varepsilon_k} = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_k} \sum_{\ell=1}^{g_k} 1 = \sum_{k=0}^{\infty} g_k e^{-\beta\varepsilon_k}$$

Nézzünk egy **speciális eset**et, melyben csak **két energiaszint** valósulhat meg a következőképp (2.ábra):



A fentiek alapján az egyrészecske-állapotösszeg:

$$\zeta = \sum_{k=0}^{k=1} g_k e^{-\beta\varepsilon_k} = 1 + 3e^{-\beta\varepsilon_1}$$

Amiből az állapotösszeg: $\mathcal{Z} = \left(1 + 3e^{-\beta\varepsilon_1}\right)^N$

Az állapotösszeggel kiszámolhatjuk a belsőenergiát, a szabadenergiát, a hőkapacitást és az entrópiát is:

$$1.)\ U=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\mathcal{Z}=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\zeta^N=-N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\zeta\underbrace{=}_{\text{beírjuk }\zeta-\text{t}}-N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(1+3e^{-\beta\varepsilon_1}\right)=$$

$$=-N\underbrace{\left(\frac{1}{1+3e^{-\beta\varepsilon_1}}\right)}_{\partial(\text{külső fv.})}\underbrace{\left(-3\varepsilon_1e^{-\beta\varepsilon_1}\right)}_{\partial(\text{belső fv.})}=N\varepsilon_1\frac{3e^{-\beta\varepsilon_1}}{1+3e^{-\beta\varepsilon_1}}\underbrace{=}_{\substack{\text{azonos}\\ \text{átalakítás:}\\ \frac{x}{1+x}=1-\frac{1}{1+x}}}N\varepsilon_1\left(1-\frac{1}{1+3e^{-\beta\varepsilon_1}}\right)$$

$$2.)\ F=-k_BT\ln\mathcal{Z}=-k_BT\ln\zeta^N=-Nk_BT\ln\zeta=-Nk_BT\ln\left(1+3e^{-\beta\varepsilon_1}\right)$$

$$3.)\ C=\frac{\partial U}{\partial T}=\frac{\partial}{\partial T}\left[N\varepsilon_1\left(1-\frac{1}{1+3e^{-\beta\varepsilon_1}}\right)\right]=\underbrace{\frac{\partial}{\partial T}(N\varepsilon_1)}_{0}-N\varepsilon_1\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{1+3e^{-\beta\varepsilon_1}}\right)\underbrace{=}_{\beta=\frac{1}{k_BT}}$$

$$=-N\varepsilon_1\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}\right)=-N\varepsilon_1\left[-\left(\frac{1}{1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}\right)^2\left(-3\frac{1}{k_B}\varepsilon_1e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)\left(-\frac{1}{T^2}\right)\right]=$$

$$=\frac{N\varepsilon_1^2}{k_BT^2}\frac{3\varepsilon_1e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}{\left(1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)^2}$$

$$4.)\ S=-\frac{\partial F}{\partial T}=-\frac{\partial}{\partial T}\left[-Nk_BT\ln\left(1+3e^{-\beta\varepsilon_1}\right)\right]\underbrace{=}_{\beta=\frac{1}{k_BT}}Nk_B\frac{\partial}{\partial T}\left[T\ln\left(1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)\right]=$$

$$\underbrace{=}_{\substack{(fg)'=\\ =f'g+fg'}}Nk_B\left[\underbrace{\ln\left(1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)}_{f'g}+\underbrace{T\left(\frac{1}{1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}\right)\left(-3\frac{1}{k_B}\varepsilon_1e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)\left(-\frac{1}{T^2}\right)}_{fg'}\right]=$$

$$=Nk_B\left[\ln\left(1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)+\frac{\varepsilon_1}{k_BT}\left(\frac{3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}{1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}\right)\right]=$$

$$=Nk_B\left[\ln\left(1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}\right)+\frac{\varepsilon_1}{k_BT}\left(1-\frac{1}{1+3e^{-\frac{1}{k_BT}\varepsilon_1}}\right)\right]$$

1 atomos ideális gáz – klasszikus tárgyalásmód

A Hamilton-függvény (csak kinetikus tag van):

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \underbrace{=}_{N=1} \frac{p^2}{2m}$$

Az állapotösszeg:

$$\mathcal{Z} = \zeta^N \underbrace{=}_{N=1} \zeta = \frac{1}{h^3} \underbrace{\int d^3q}_{V} \int d^3p \, e^{-\beta\frac{p^2}{2m}} = \frac{V}{h^3} \iiint_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \, e^{-\frac{\beta}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)} =$$

$$= \frac{V}{h^3} \iiint_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \, e^{-\frac{\beta}{2m}p_x^2} e^{-\frac{\beta}{2m}p_y^2} e^{-\frac{\beta}{2m}p_z^2} =$$

$$= \frac{V}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{-\frac{\beta}{2m}p_x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \, e^{-\frac{\beta}{2m}p_y^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \, e^{-\frac{\beta}{2m}p_z^2} =$$

$$= \frac{V}{h^3} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-\frac{\beta}{2m}p^2} \right)^3 \underbrace{=}_{\substack{\text{Gauss}-\int: \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}}} \frac{V}{h^3} \left(\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \right)^3 \underbrace{=}_{\beta=\frac{1}{k_B T}} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{\frac{3}{2}} = \frac{V}{\lambda_T^3}$$

Látható, hogy az egyrészecske-állapotösszeg a hőmérséklet $\frac{3}{2}$-ik hatványával arányos:

$$\zeta \sim T^{\frac{3}{2}}.$$

A fenti levezetés végén

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

a termikus hullámhossz. A klasszikus közelítés feltétele, hogy a termikus hullámhossz sokkal kisebb legyen, mint a részecskék átlagos távolsága, azaz:

$$\lambda_T \ll \left(\frac{V}{N} \right)^{\frac{1}{3}}$$

HF: Az imént megkapott állapotösszeggel gyakorlásképp számold ki a fentebbi mennyiségeket (U,F,C,S)!