

Úlohy řešené na cvičení

Týden 1: 19.2.

- *Pravděpodobnost*
 - pravděpodobnost, podmíněná pravděpodobnost, Bayesův teorém
 - 1. spolehlivost krevního testu
 - náhodná proměnná, hustota pravděpodobnosti, distribuční funkce
 - momenty, centrální momenty
 - generující funkce
 - náhodná procházka

Týden 2: 26.2.

- *diskrétní pravděpodobnostní rozdělení*
 - Bernoulliho, binomické, Poissonovo (jako limita binomického)
- *spojitá pravděpodobnostní rozdělení*
 - normální, exponenciální (a jeho souvislost s Poissonovým), Cauchyho
- *úlohy:*
 1. průměrný počet pokusů nutných k prvnímu úspěšnému v Bernoulliho rozdělení
 2. počet kuřat ze snůšky, kde počet vajec ve snůšce se řídí Poissonovým rozdělením a pravděpodobnost vylíhnutí kuřete je p
 3. Dostávám-li v průměru za jednu hodinu jeden řádný e-mail a 3 spamy, jaká je pravděpodobnost, že dostanu dva nebo více libovolných e-mailů za 1/2 hodiny?

Týden 3: 4.3.

- *metoda sedlového bodu*
 1. Stirlingova formule:

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \left(1 + \frac{1}{12n}\right) + O(n^{-2})$$

- *úlohy:*

1. Uvažujme $N \gg 1$ částic, nacházejících se v k jednočásticových stavech s energiemi $\epsilon_1, \dots, \epsilon_k$. Pravděpodobnost obsazení stavu j nechť je q_j . Najděte rozdělovací funkci $F_N(N_1, \dots, N_k)$, kde N_j je počet částic ve stavu j pro $\sum_j N_j = N$. Najděte její maximum za podmínky $\sum_j N_j \epsilon_j = E$.

Týden 4: 11.3.

Samostudium

Operátor hustoty

1. Operátor hustoty spinu 1/2

Operátory spinu pro částici se spinem 1/2 lze psát jako $\hat{s}_i = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_i$, kde $\hat{\sigma}_i$ jsou reprezentovány Pauliho maticemi.

- Najděte vyjádření operátoru hustoty $\hat{\rho}$ jako funkci vektoru polarizace $\vec{\omega}$
 $\hat{\rho}(\vec{\omega}) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{\omega} \cdot \vec{\sigma})$
- Vyjádřete entropii $S = -k \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho})$ jako funkci $\vec{\omega}$
 $S = -k_B \left(\frac{1+\omega}{2} \log \frac{1+\omega}{2} + \frac{1-\omega}{2} \log \frac{1-\omega}{2} \right)$, $\omega = |\vec{\omega}|$
- Ukažte, že pro $|\vec{\omega}| = 1$ je $S = 0$ a tedy $\hat{\rho}$ odpovídá čistému stavu
- Najděte maximum entropie a odpovídající $\hat{\rho}$
 $S = -k_B \log 2$ pro $\hat{\rho} = \frac{1}{2} \mathbb{1}$

Návod: Uvažte, že $\hat{\rho}$ je hermitovský operátor a Pauliho matice spolu s jednotkovou maticí tvoří bázi hermitovských matic. Vektor polarizace můžeme definovat jako

$$\vec{\omega} = \langle \hat{s} \rangle = \text{Tr}(\hat{s} \hat{\rho}).$$

2. Dvospinový systém Uvažte dvospinový systém v čistém stavu $|\psi\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle$. Jak vypadá operátor hustoty prvního spinu? Jedná se o čistý stav? Proveďte totéž pro $|\varphi\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|++\rangle$.
První případ: $\hat{\rho}_1 = \alpha^2|+\rangle\langle+| + \beta^2|-\rangle\langle-|$, není to čistý stav. $\vec{\omega} = (0, 0, \frac{1}{2}(\alpha^2 - \beta^2))$

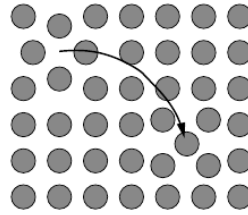
Mikrokanonický soubor

1. Frenkelovy defekty

V iontových krystalech (ZnS, AgCl, AgBr, NaCl, ...) může dojít při konečné teplotě vlivem tepelných vibrací k přemístění menšího atomů z mřížkového bodu do intersticiální polohy. Vzniká tak tzv. Frenkelův defekt.

Uvažujme dokonalý krystal tvořený N atomy. Přemístíme-li n z nich ($1 \ll n \ll N$) do intersticiálních poloh, získáme n Frenkelových defektů. Předpokládejme, že počet dostupných intersticiálních poloh N' je řádově stejný jako počet atomů a že energie potřebná ke vzniku jednoho defektu je ϵ . Pomocí mikrokanonického popisu ukažte, že v rovnovážném stavu při teplotě T (za předpokladu $\epsilon \gg k_B T$) platí

$$\frac{n^2}{(N-n)(N'-n)} = \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right).$$



2. Rozložení rychlostí v ideálním plynu

Na základě mikrokanonického popisu ideálního plynu uzavřeného v nádobě o objemu $V = L^3$

- (a) ukažte, že v termodynamické limitě $N \rightarrow \infty$ je pravděpodobnost, že x -ová (nebo jiná) komponenta rychlosti libovolně vybrané částice má velikost v intervalu $(v_x, v_x + dv_x)$, popsána *Maxwellovým rozdělením*

$$w(v_x)dv_x = K \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2k_B T}\right) dv_x,$$

kde K je vhodná konstanta (určete);

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

- (b) najděte pravděpodobnostní rozdělení pro absolutní hodnotu rychlosti $v = |\mathbf{v}|$ částic plynu;

$$\rho(v) \propto v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

- (c) vypočtěte střední hodnoty $\langle \mathbf{v} \rangle$, $\langle v \rangle$ a $\sqrt{\langle \mathbf{v}^2 \rangle}$.

$$\mathbf{0}, \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}, \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$$

Návod: Mikrokanonický popis ideálního plynu jsme demonstrovali na konci minulého semestru. Pokud se omezíme na objem fázového prostoru odpovídající přesné hodnotě E vnitřní energie plynu, potom pro pravděpodobnost obsazení mikrostavu definovaného hybnostmi \mathbf{p}_i a polohami \mathbf{q}_i jednotlivých částic ($i = 1, \dots, N$) platí

$$w(\{\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i\}) \propto \delta(|\mathbf{p}_1|^2 + |\mathbf{p}_2|^2 + \dots + |\mathbf{p}_N|^2 - 2mE) \quad \text{pro } |\mathbf{q}_i| \leq \frac{L}{2},$$

kde L je délka hrany nádoby a m je hmotnost částice plynu. Odpovídající fázový povrch $\Sigma(E)$ je úměrný povrchu $3N$ -dimenzionální sféry o poloměru $\sqrt{2mE}$. Pravděpodobnost, že například první komponenta hybnosti první částice má velikost v intervalu $(p_x, p_x + dp_x)$, je potom rovna podílu povrchů $(3N-1)$ -dimenzionální sféry o poloměru $\sqrt{2mE - p_x^2}$ a $3N$ -dimenzionální sféry o poloměru $\sqrt{2mE}$. Odůvodněte!

Týden 5: 18.3.

Samostudium

Pro tento týden si prosím nastudujte kapitolu 6.4 ze skript – k dispozici nově přímo na mé domácí stránce. Níže jsou další úlohy, které bychom řešili na cvičení. Kdo má k dispozici, může si projít si řešené úlohy v *Balianovi*, pro tento týden Vol. I, str. 337-346.

Kanonický soubor

1. Ideální plyn v gravitačním poli

Ideální plyn N klasických částic s hmotou m v tepelné rovnováze s okolím je uzavřen v nekonečně dlouhé válcovité nádobě umístěné v homogenním gravitačním poli.

- a) Vypočtete klasickou partiční sumu systému a najděte Helmholtzovu volnou energii v jejích přirozených proměnných.

$$F = -Nk_B T \log \left[\frac{\sigma k_B T e}{Nmg} \left(\frac{2\pi mk_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right], \sigma \text{ je (extenzivní) podstava nádoby.}$$

- b) Vypočtete entropii, vnitřní energii a měrné teplo.

$$S = Nk_B \left\{ \frac{5}{2} + \log \left[\frac{\sigma k_B T e}{Nmg} \left(\frac{2\pi mk_B T}{h^2} \right)^{3/2} \right] \right\}$$

$$\langle H \rangle = \frac{5}{2} Nk_B T, C_\sigma = \frac{5}{2} Nk_B$$

Tato energie je ovšem celková energie vč. potenciální, tepelná vnitřní energie je $U = \frac{3}{2} Nk_B T$ jako obvykle. Viz diskuse u rotujícího válce – $\dots + mgz$ v hamiltoniánu odpovídá vlastně Legendreova transformace mezi souřadnicí z a (k ní sdružené) z -složce gravitační síly, nejdme tedy striktně vzato v kanonickém souboru.

- c) Odvoďte stavovou rovnici, tj. určete explicitní závislost tlaku na objemu, počtu částic a teplotě.

$$p(z) = n(z)k_B T = \frac{mgN}{\sigma} e^{-\frac{mgz}{k_B T}}$$

Výsledky srovnajte s ideálním plynem bez působení vnějšího pole.

Návod: Hamiltonián pro jednu částici je $H = \frac{p^2}{2m} + mgz$. Pro výpočet tlaku je třeba si uvědomit, že $p = p(z)$ a tedy plyn striktně vzato není globálně v rovnováze. Je tedy třeba plyn „rozporcovat“ na tenké vrstvy, v rámci kterých je již možné tlak považovat za konstantní, a stavovou rovnici poté určit z podmínky na chemickou rovnováhu mezi vrstvami, tedy z nezávislosti chemického potenciálu na z .

2. Zatížený polymer

Uvažujte jednodimenzionální vlákno skládající se z $N \gg 1$ monomerních jednotek tvořících řetězovou molekulu. Každý monomer se může nacházet buď ve stavu α , nebo ve stavu β . V prvním z nich má monomerní jednotka délku $l - a$ (berme pro určitost $l, a > 0$) a vnitřní energii E_α , druhému stavu pak odpovídá délka $l + a$ a

energie E_β . Molekula je umístěna v termální lázni, jejíž teplota je T . Jak ukazuje obrázek vlevo, je na vlákně zavěšeno závaží o hmotnosti m .

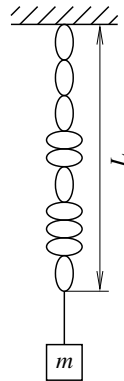
- 1) Najděte délku vlákna L jako funkci teploty T a hmotnosti závaží m .

$$\langle L \rangle = N(l + a) - Na \left[1 + \tanh \left(\frac{\beta Q}{2} \right) \right],$$

kde $Q = E_\alpha - E_\beta + 2mga$ je teplo dodané lázni při prodloužení jednoho monomeru.

- 2) Určete, zda se konstantně zatížené vlákno při zahřátí prodlouží nebo naopak zkrátí.

Záleží na znaménku Q ...



Týden 6: 25.3.

Samostudium

Teorie: kapitola 7 ze skript (teorie fluktuací). Úlohy se nicméně ještě vracejí ke grandkanonickému souboru, výpočtu fluktuací bude věnován příští týden.

Grandkanonický soubor

1. Relativistický plyn

Najděte GK partiční sumu, termickou stavovou rovnici $f(T, p, V, N) = 0$ a kalorickou stavovou rovnici $U = U(T)$ pro ultra-relativistický ideální plyn popsany disperzní relací

$$\epsilon(\vec{p}) = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \approx cp.$$

$$\langle p \rangle V = \langle N \rangle k_B T \quad (p \text{ je zde tlak}), \quad \langle U \rangle = 3 \langle N \rangle k_B T$$

2. Barometrická formule

Uvažte znovu úlohu 1c) z předchozího týdne a pro výpočet tlaku $p = p(z)$ popište

jednotlivé vrstvy vzduchu, které jsou v lokální rovnováze, jako grandkanonické soubory v rovnováze se sousedními vrstvami.

3. Adsorpce

Je-li plyn v termodynamické rovnováze se stěnami nádoby, mohou se některé jeho molekuly na stěny přichytit. Konkrétní podoba vazby je závislá na struktuře stěny, pro daný problém však není podstatná. Důležité ovšem je si uvědomit, že adsorpce je stav rovnováhy mezi dvěma fázemi – plynem a systémem adsorbovaných molekul.

Uvažujme následující konkrétní model: na stěně existuje \mathcal{N} míst, kde se může molekula plynu zachytit, přičemž vazbová energie je $-u$, $u > 0$. Neadsorbované molekuly popíšeme ideálním plynem.

- 1) Spočtete grandkanonickou partiční sumu pro adsorbované molekuly.

$$Z_G = \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} \binom{\mathcal{N}}{n} e^{\beta n u} e^{\alpha n} = \left(1 + e^{\beta u + \alpha}\right)^{\mathcal{N}}$$

- 2) S využitím termodynamických vlastností ideálního plynu určete střední počet $\langle n \rangle$ adsorbovaných molekul jako funkci teploty a tlaku plynu.

Langmuirova adsorpční izoterma:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \frac{\mathcal{N}}{1 + e^{-\beta u} e^{-\beta \mu}} = / \mu(T, p) \text{ pro id. plyn} / \\ &= \frac{\mathcal{N}}{1 + e^{-\beta u} (2\pi m)^{3/2} h^{-3} \beta^{-5/2} p^{-1}} \end{aligned}$$

Návod: Adsorbované molekuly tvoří grandkanonický soubor neinteragujících částic s jednočásticovým hamiltoniánem s jedinou nedegenerovanou energetickou hladinou. Celkový počet částic je ovšem shora omezen počtem adsorpčních míst \mathcal{N} . Při výpočtu GK sumy tedy nesčítáme do nekonečna jako obvykle, naopak je třeba zohlednit kombinatorický faktor odpovídající počtu možností, jak rozmístit n nerozlišitelných částic do \mathcal{N} míst. Ideální plyn neadsorbovaných molekul můžeme také popisovat grandkanonicky (zde lze sčítat přes počet částic až do nekonečna), rovnováha adsorbovaných a neadsorbovaných molekul je potom dána rovností teplot a chemického potenciálu obou systémů. Pro 2) tedy potřebujeme vyjádřit chemický potenciál ideálního plynu jako funkci tlaku a teploty.

Týden 7: 1.4.

Samostudium

Teorie: Kapitola 8 – základy kvantové statistické mechaniky.

Obecný statistický soubor

Uvažujme situaci, kdy chceme popisovat systém, jehož makrostav je zadán středními hodnotami \mathcal{A}_i k komutujících operátorů \hat{A}_i ,

$$\langle \hat{A}_i \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}_i) = \mathcal{A}_i. \quad (1)$$

Omezíme-li se na případy, kdy $\hat{A}_1 = \hat{H}$ a $\mathcal{A}_1 = U$, potom \hat{A}_i odpovídají zachovávaným veličinám a mohou být chápány jako termodynamické proměnné. Odpovídající hustotu pravděpodobnosti na Hilbertově (nebo Fockově) prostoru nalezneme maximalizací entropie

$$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) \quad (2)$$

vůči variaci $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho} + \delta \hat{\rho}$ za podmínek $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ a (1):

$$\delta \left[S + k_B \lambda_0 (1 - \text{Tr}(\hat{\rho})) + k_B \sum_{i=1}^k \lambda_i (\mathcal{A}_i - \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}_i)) \right] = 0. \quad (3)$$

Zde λ_i jsou Langrangeovy multiplikátory odpovídající jednotlivým vazbám.

1. Ukažte, že variace entropie je $\delta S = -k_B [\text{Tr}(\delta \hat{\rho} \log \hat{\rho}) + \text{Tr}(\delta \hat{\rho})]$.
2. Ukažte, že (3) vede na rovnici

$$k_B \text{Tr} \left[\delta \hat{\rho} \left(-\log \hat{\rho} - 1 - \lambda_0 - \sum_i \lambda_i \hat{A}_i \right) \right] = 0 \quad (4)$$

a tedy (λ_0 jsme „schovali“ do Z)

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i}, \quad Z = \text{Tr} \left[e^{-\sum_i \lambda_i \hat{A}_i} \right]. \quad (5)$$

3. Dosazením do (2) ukažte, že (využíváme $\hat{A}_1 = \hat{H}$)

$$-k_B T \log Z = k_B T \lambda_1 U - TS + k_B T \sum_{i=2}^k \lambda_i \mathcal{A}_i. \quad (6)$$

Z tohoto vztahu plyne, že v obecném statistickém souboru je $-k_B T \log Z$ Legendreovou transformací vnitřní energie.¹ Speciálně pro $k = 1$ dostáváme identifikaci $\lambda_1 = \frac{1}{k_B T} = \beta$ kanonický soubor s $-k_B T \log Z = F(T, V, N)$.

4. Ukažte, že podmínky $\langle \hat{H} \rangle = U$ a $\langle \hat{N} \rangle = \mathcal{N}$ vedou na grandkanonický soubor.

¹Konzistentnější je uvažovat $k_B \log Z = S - k_B \sum_i \lambda_i \mathcal{A}_i$ a pracovat s Legendreovými transformacemi entropie –.

5. Najděte statistický soubor generovaný podmínkami $\langle \hat{H} \rangle = U$ a $\langle \hat{V} \rangle = V$. Identifikujte Lagrangeův multiplikátor asociovaný s \hat{V} a příslušný termodynamický potenciál $-k_B T \log Z$.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H} - \gamma \hat{V}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{H} + p\hat{V})}$$

$$-\frac{1}{\beta} \log Z = U - TS + pV = G(T, p = \gamma/\beta = k_B T \gamma, N)$$

Střední hodnoty a fluktuace v obecném statistickém souboru

1. Ukažte, že pro hustotu pravděpodobnosti (5) platí:

$$\langle \hat{A}_i \rangle = -\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \log Z \quad (7)$$

$$\langle (\Delta \hat{A}_i)^2 \rangle = \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i^2} \log Z \quad (8)$$

$$\langle \Delta \hat{A}_i \Delta \hat{A}_j \rangle = \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle - \langle \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_j \rangle = \frac{\partial^2}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \log Z \quad (9)$$

2. Ukažte, že v kanonickém souboru platí

$$\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle = k_B T^2 C_V$$

Návod: Pro vztahování fluktuace energie k tepelné kapacitě je třeba pro derivování vyjádřit $\log Z$ pomocí volné energie, derivaci podle λ_1 převést na derivaci podle T a vzpomenout si na redukce derivace (i když zde stačí jen definice tepelné kapacity).

3. Ukažte, že v grandkanonickém souboru platí (návod analogický předchozí otázce)

$$\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle = \mathcal{N} k_B T \frac{\kappa_T}{v}$$

4. Najděte (doporučuji v tomto pořadí) $\langle (\Delta \hat{V})^2 \rangle$, $\langle \Delta \hat{V} \Delta \hat{H} \rangle$ a $\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle$ ve statistickém souboru z úlohy 5 výše a vyjádřete pomocí C_p , α , κ_T a termodynamických proměnných.

$$\langle (\Delta \hat{V})^2 \rangle = k_B T V \kappa_T$$

$$\langle \Delta \hat{V} \Delta \hat{H} \rangle = k_B T V (T \alpha - p \kappa_T)$$

$$\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle = k_B T (T C_p + p^2 V \kappa_T - 2p T V \alpha)$$

Návod: Jde to samozřejmě počítat hrubou silou, na druhou stranu lze cestu zkrátit využitím vztahů (ověřte)

$$\left(\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial p} \right)_\beta = -\beta \langle \Delta A \Delta V \rangle,$$

$$\left(\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \beta}\right)_p = -\langle \Delta A \Delta H \rangle - p \langle \Delta A \Delta V \rangle,$$

kde za A můžete dosadit postupně V i H .

Týden 8: 8.4.

Samostudium

Teorie: Kapitola 8 – základy kvantové statistické mechaniky (pokračování z minulého týdne)

Paramagnetismus

1. Langevinův model paramagnetu

Předpokládejte, že magnetický moment atomu může nabývat diskrétní hodnoty $g\mu_B m$, kde $m = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$ je magnetické kvantové číslo vyjadřující projekci magnetického momentu do směru magnetického pole \mathbf{H} .

- a) Vypočtěte magnetizaci pevné látky skládající se z n atomů v jednotkovém objemu za předpokladu, že momenty jednotlivých atomů spolu neinteragují a jsou nezávislé.

$$\alpha = \frac{1}{2} \beta g \mu_B H$$

$$\langle M \rangle = N g \mu_B \langle m \rangle = \frac{N g \mu_B}{2} \{ (2J + 1) \cotgh[(2J + 1)\alpha] - \cotgh \alpha \}$$

- b) Vypočtěte magnetickou susceptibilitu χ pro slabé magnetické pole a vysokou teplotu, tedy $g\mu_B J H \ll k_B T$ a srovnajte s Currie-Weissovým zákonem.

$$\langle \chi \rangle = \frac{(g\mu_B)^2}{3} N J(J + 1) \beta + O(\beta^3 H^2)$$

- c) Speciálně vyšetřete případy $J = \frac{1}{2}$ a $J \rightarrow \infty$ (pro $\mu_B \rightarrow 0$ a $g\mu_B J \rightarrow \mu_0$).

$$J = 1/2 : M = \frac{N}{2} g \mu_B \tanh \alpha$$

$$J \rightarrow \infty : M = N \mu_0 \left\{ \cotgh(\beta \mu_0 H) - \frac{1}{\beta H \mu_0} \right\}$$

Kinetickou energii atomů spojenou s vibrací nebo otáčením spinů neuvažujte.
Návod: systém popisujte jako kanonický soubor s interakčním hamiltoniánem

$$\mathcal{H} = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{H},$$

tedy s energií (H je velikost magnetického pole)

$$E = -g\mu_B H \sum_{i=1}^n m_i.$$

Magnetizaci potom získáte například vhodnou derivací partiční sumy a susceptibilitu jako její derivaci podle H .

2. Paramagnetismus klasicky

Uvažujte klasický ideální plyn tvořený částicemi s magnetickým momentem μ . Hustota částic je n a plyn se nachází v magnetickém poli \mathbf{H} . Vypočtete magnetizaci a susceptibilitu plynu a vyšetřete jejich limity/asymptoty pro $T \rightarrow 0$ a $T \rightarrow \infty$. Porovnejte s předchozí úlohou.

$$Z_1^{mg} = \int e^{\beta \mathcal{H}_I} d\vec{\nu} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{\beta \mu H \cos \theta} = \frac{4\pi}{\mu H \beta} \sinh(\beta \mu H)$$

$$\langle M \rangle = N\mu \langle \cos \theta \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \log Z_1^{mg} = N\mu \left\{ \coth(\beta \mu H) - \frac{1}{\beta \mu H} \right\}$$

$$M(\beta \rightarrow \infty) = \mu N, \quad M(\beta \rightarrow 0) = \frac{1}{3} N \mu^2 \beta H$$

Návod: Interakční jednočásticový hamiltoniánem je zde

$$\mathcal{H}_I = -\mu \mathbf{H} \cdot \nu,$$

kde ν je jednotkový vektor vyjadřující orientaci magnetického momentu částice plynu. Magnetický příspěvek k jednočásticové partiční funkci tak získáte integrací přes prostorový úhel.

Týden 9: 15.4.

Samostudium

Teorie: Kapitola 9 – Boseho kondenzace (9.1), Debyeův model tepelné kapacity pevných látek

Kvantová statistika I

1. Dvě částice v harmonickém potenciálu

Uvažujte dvě neinteragující částice, které se mohou nacházet v jednočásticových stavech s energiemi $\epsilon_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$. Uvažujte, že částice jsou

- rozlišitelné
- fermiony se spinem $s = 0$
- bosony se spinem $s = 0$
- fermiony se spinem $s = 1/2$

Pro tyto čtyři případy najděte kanonickou partiční sumu a střední hodnotu energie. Diskutujte asymptoty $T \rightarrow 0$ a $T \rightarrow \infty$. Pokuste se interpretovat rozdíly.

$$U^c < U^a < U^d < U^b$$

Návod: Jednolivé případy se liší tím, zda obě částice mohou nebo nemohou být ve stejném jednočásticovém stavu. V případě nenulového spinu je potom díky stupni volnosti navíc každá energetická hladina dvakrát (pro $s = 1/2$ degenerovaná. Kromě a) považujeme částice za nerozlišitelné.

2. Jednodimenzionální Debyeův model

Jednodimenzionální mříž se skládá z lineárního řetízku s N částicemi ($N \gg 1$), interagujícími s nejbližšími sousedy elastickou silou. V normálních souřadnicích mají vlastní frekvence tohoto systému tvar

$$\omega_k = \omega \sqrt{2(1 - \cos(ka))}, \quad (10)$$

kde $k = \frac{2\pi n}{aN}$ a celá čísla n nabývají hodnot mezi $-N/2$ a $N/2$. Charakteristická frekvence ω je konstanta. Systém je v tepelné rovnováze o teplotě T . Je-li C_V tepelná kapacita systému při konstantním objemu,

- určete C_V v limitě $T \rightarrow \infty$
 $C_V = Nk_B T$
- předpokládejte, že pro $T \rightarrow 0$ platí

$$C_V \rightarrow A\omega^{-\alpha} T^\gamma,$$

kde A je konstanta. Určete exponenty α a γ .

$$\alpha = \gamma = 1$$

Návod: Disperzní relace (10) odpovídá neinteragujícím bosonům – fononům (kvazičástice). Její odvození najdete v Balianovi vol. II od strany 130 dále (k dispozici na www v sekci dodatky). Stačí tedy standardním postupem najít bosonový grandkanonický potenciál nebo ještě lépe rovnou střední hodnotu energie

$$U = \sum_k \epsilon_k \langle n_k \rangle,$$

kde $\langle n_k \rangle = (e^{\beta(\epsilon_k)} - 1)^{-1}$ je střední počet fononů s frekvencí ω_k . Chemický potenciál ve výrazu chybí, protože se počet fononů nezachovává a tedy to není termodynamická proměnná. V důsledku toho ve skutečnosti pracujeme s kanonickým souborem, který je ovšem v tomto případě definovaný na Fockově prostoru. Neboli kanonický soubor je formálně ekvivalentní grandkanonickému s nulovým chemickým potenciálem (srovnejte také s fotonovým plynem). Tepelnou kapacitu můžeme počítat jako derivaci energie podle teploty (zde to projde, žádné „skryté proměnné“ tu nečítají) a je to jen technický problém. Pro vysoké teploty $\beta \rightarrow 0$ stačí rozvinout exponenciálu do prvního řádu, $\hbar\omega_k$ se vykrátí a suma je triviální. Pro nízké teploty lze přejít od sumy k integraci. Pomocí několika substitucí je poté třeba dostat veškeré závislosti na T a ω před integrál a ukázat, že zbývající bezrozměrný integrál konverguje.

Týden 10: 22.4.

Samostudium

Cvičení:

- kapitola 9.3 ze skript – fotonový plyn a záření černého tělesa

Teorie:

- kapitola 10.1 – stavová rovnice ideálního Fermiho plynu
- kapitola 10.2 – Sommerfeldův rozvoj

Týden 11: 29.4.

Samostudium

Teorie:

- kapitola 10.3 – Spin a magnetismus
- kapitola 10.4 – Relativistický Fermiho plyn, bílí trpaslíci

Fermiony

Na cvičení bychom velkou značnou část věnovali Pauliho paramagnetismu (mé ručně psané poznámky ke stažení k sekci dodatky), navíc tedy jen něco málo:

1. Ideální plyn fermionů se spinem 1/2

Spočítejte isothermickou kompresibilitu κ_T v limitě $T \rightarrow 0$.

Návod: Základem je nalézt stavovou rovnici

$$pV = \frac{2}{3}U,$$

jak je provedeno ve skriptech. Jen ve zkratce: hustota stavů pro ideální plyn je

$$D(\epsilon) = \sum_{p,\sigma} \delta(\epsilon - \epsilon(p,\sigma)) = 2 \sum_p \delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m}\right) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2}$$

Vnitřní energii definujeme jako

$$U = \int \epsilon D(\epsilon) \nu^{(-)}(\epsilon) d\epsilon = \frac{3}{2} \int \Gamma(\epsilon) \nu^{(-)}(\epsilon) d\epsilon = -\frac{3}{2}\Omega = \frac{3}{2}pV,$$

kde jsme využili definici $\Gamma(\epsilon)$ a vztah pro $D(\epsilon)$ odvozený výše

$$\Gamma(\epsilon) = \int_0^\epsilon D(\epsilon') d\epsilon' = \text{/id. plyn/} = \frac{2}{3}\epsilon D(\epsilon)$$

a snad známý obecný vztah pro grandkanonický potenciál

$$\Omega = -pV = - \int \Gamma(\epsilon) \nu^{(-)}(\epsilon) d\epsilon. \quad (11)$$

Pro úplnost ještě fermionová rozdělovací funkce:

$$\nu^{(-)} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}}.$$

Kompresibilitu při $T = 0$ nyní získáme velmi rychle nehezským trikem, který je ovšem v pořádku, protože $T = 0$ držíme při všech derivacích konstantní. Všimneme si, že při nulové teplotě platí pro volnou energii

$$F = U - TS = U$$

a tedy

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = -\frac{3}{2}p - \frac{3}{2}V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T.$$

Odtud již algebraicky vyjádříme

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = \frac{3}{5p}.$$

Ještě bychom chtěli vyjádřit tuto kompresibilitu v závislosti na hustotě fermionů n . Ze vztahu (11) s použitím

$$\nu^{(-)}(T=0) = \theta(\epsilon_F - \epsilon)$$

snadno explicitně najdeme

$$p = \frac{16\pi}{15h^3} (2m)^{3/2} \epsilon_F^{5/2},$$

což spolu se vztahem pro hustotu fermionů při nulové teplotě $n = \frac{1}{V} \Gamma(\epsilon_F)$ dává výsledný vztah (až na konstanty...)

$$\kappa_T \propto n^{-5/3}.$$

Tuto závislost skutečně naměříme v některých kovech, neboť při běžných teplotách platí $T_F \gg T$.

Týden 12: 6.5.

Samostudium

Teorie:

- kapitola 11.1 – klastrový a viriálový rozvoj

Viriálový rozvoj

1. Tvrdé koule

Spočítejte první tři viriálové koeficienty reálného plynu tvrdých koulí v objemu Λ . Potenciál párové interakce je tedy

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty & |\mathbf{r}| < R, \\ 0 & |\mathbf{r}| > R. \end{cases} \quad (12)$$

Při výpočtu předpokládejte limitu $|\Lambda| \rightarrow \infty$ při současném $|\partial\Lambda|/|\Lambda| \rightarrow 0$.

Návod: Ručně psané poznámky jsou ke stažení v sekci dodatky. Soubor obsahuje také příslušnou pasáž z knihy Kersona Huanga jako doplnění ke skriptům.

Týden 13: 13.5.

Samostudium

Teorie:

- viz e-mail přednášejícího – až do konce semestru kapitoly 11.2 a 11.3

Vnitřní stupně volnosti

V tomto týdnu se vrátíme k tématu, které jsme přeskočili – vnitřní stupně volnosti, vnitřní partiční suma. V nejjednodušším případě máme na mysli plyn částic s vnitřní strukturou, např. dvouatomových molekul, které mohou vibrovat a rotovat. Dalším příkladem je DÚ4 a orientace magnetického momentu. Základem je jako obvykle rozdělení problému na pohyb těžiště a dynamiku spojenou s vnitřními stupni volnosti. Minimálně pro ideální plyn spolu tyto dvě podmnožiny neinteragují, dostáváme grandkanonickou partiční sumu jako součin Z_G pro ideální plyn a tzv. vnitřní partiční sumy $\zeta(\beta)$, která již závisí na konkrétním charakteru hamiltoniánu. Téma je dobře zpracováno v Balianovi vol. 1, str. 349–382. Můj rukou psaný stručný výtah je k dispozici na www.

1. Vodíková molekula

Uvažujme řídký plyn vodíkových molekul při nízké teplotě. Při dostatečně nízkých teplotách se z vnitřních stupňů volnosti projevují jenom rotační a tedy příspěvek vibračních stupňů volnosti je zanedbatelný. Další zjednodušení plyne z toho, že elektrony jsou mnohem lehčí než protony, tudíž jejich příspěvek k rotační energii je taktéž zanedbatelný. Dále budeme molekulu vodíku považovat za systém dvou protonů v konstantní vzdálenosti od sebe. Protony jsou fermiony se spinem $1/2$, a proto velikost celkového spinu molekuly může být buď $S = 0$ (singlet, para-vodík) nebo $S = 1$ (triplet, ortho-vodík). Vlnová funkce popisující celou molekulu je pak direktním součinem prostorové části (v bázi charakterizované orbitálním impulsmomentem L) a spinové části. Vlnová funkce molekuly vodíku s orbitálním impulsmomentem L a celkovým spinem S má paritu $(-1)^{L+S-1}$. Podmínka antisymetrie vlnové funkce vůči záměně protonů vyžaduje, aby stav s celkovým spinem $S = 0$ měl sudý orbitální impulsmoment L a naopak.

- Spočítejte poměr zastoupení singletního a tripletního stavu. Napište obecný výraz a ten explicitně vyhodnoťte pro nízké a vysoké teploty.
- Spočítejte tepelnou kapacitu jedné molekuly v jednotlivých stavech celkového spinu ($S = 0$ a $S = 1$) a vykreslete jejich grafy v nízkoteplotní oblasti. Rozsah však zvolte dostatečně velký na to, abyste u jedné z křivek uviděli lokální maximum. Na tuto podúlohu můžete potřebovat numericky spočítat patřičné sumy do dostatečně vysokého řádu.
- Vykreslete teplotní závislost tepelné kapacity pro rovnovážnou směs para- a ortho-vodíku.

Týden 14: 20.5.

Fermionové záření černého tělesa

Najděte Stefan-Boltzmannův a Wienův zákon pro záření černého tělesa, pokud toto místo fotonů vyzařuje fermiony se spinem $1/2$ (např. neutrina).

Návod: Hustota stavů/modů je v obou případech stejná, liší se jejich obsazení. Oba zmíněné zákony potom vypadají formálně stejně, liší se jen numerickými faktory. Řešení najdete v tomto článku.