

# Příklady do statistické fyziky a termodynamiky

připravili: Jakub Fišák a další

## 1. Výpočet stavové rovnice plynu

Volná energie plynu je dána vztahem

$$F(V, T) = -\frac{1}{3}C \cdot V \cdot T^4,$$

kde  $C$  je konstanta. Spočítejte stavovou rovnici daného plynu.

**Řešení:** vyjdeme z definičního vztahu pro volnou energii

$$F(V, T) = E - TS,$$

odkud zjistíme

$$dF = -pdV - SdT.$$

jelikož se jedná o úplný diferenciál, musí platit

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -p,$$

a tedy

$$\frac{1}{3}C \cdot T^4 = p,$$

což je hledaná stavová rovnice.

## 2. Gama funkce

Gama funkce je definována integrálem

$$\Gamma(n) := \int_0^{\infty} dt \exp(-t)t^{n-1}.$$

(a) Dokažte vztah

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n),$$

(b) spočítejte  $\Gamma(n)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ,

(c) spočítejte

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right), n \in \mathbb{N}.$$

**Řešení:** Nejprve dokážeme 2a, neboť tento vzorec použijeme i v následujících bodech. Zapišme tedy z definice vztah pro  $\Gamma(n+1)$  a upravme tento výraz pomocí per partes

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dt \exp(-t)t^n = \underbrace{-t^n \exp(-t)}_0^{\infty} + n \int_0^{\infty} dt t^{n-1} \exp(-t) = n\Gamma(n).$$

V části 2b nejprve určíme  $\Gamma(1)$ :

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} dt \exp(-t) = -\exp(-t)\Big|_0^{\infty} = 1.$$

Využijeme nyní vzorce z 2a pro výpočet hodnot gama funkcí pro další přirozená čísla

$$\Gamma(2) = \Gamma(1+1) = 1 \cdot \Gamma(1) = 1,$$

$$\Gamma(3) = 2 \cdot \Gamma(2) = 1 \cdot 2,$$

$$\Gamma(4) = 3 \cdot \Gamma(3) = 1 \cdot 2 \cdot 3 = 6,$$

$$\Gamma(5) = 4 \cdot \Gamma(4) = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 = 24,$$

můžeme tedy určit vzorec pro obecné  $n$ :

$$\Gamma(n+1) = n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = n!.$$

Analogicky spočítáme 2c: nejprve  $\Gamma(1/2)$ :

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} dt \exp(-t)t^{-\frac{1}{2}} = 2 \int_0^{\infty} ds \exp(-s^2) = \sqrt{\pi},$$

kde jsme v posledním integrálu provedli substituci  $t = s^2$ . Nyní budeme počítat hodnoty gama funkce pro další  $n$ :

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi},$$

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \sqrt{\pi} = \frac{3}{4} \sqrt{\pi},$$

$$\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{5}{2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} \sqrt{\pi} = \frac{15}{8} \sqrt{\pi},$$

$$\Gamma\left(\frac{9}{2}\right) = \frac{7}{2} \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} \cdot \frac{7}{2} \sqrt{\pi} = \frac{105}{16} \sqrt{\pi},$$

obecně pro  $n$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{2n-1}{2} \cdot \frac{2n-3}{2} \cdot \dots \cdot \frac{7}{2} \cdot \frac{5}{2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi} = \frac{(n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}.$$

### 3. Stirlingův vzorec

S pomocí Gama funkce spočítejte přibližné vyjádření  $\ln(n!)$  pro velké hodnoty  $n$ .

**Řešení:**

Z předchozího příkladu víme, že  $\Gamma(n+1) = n!$ . Tohoto faktu při výpočtu využijeme. Zapišme tedy Gama funkci a argument vhodně upravme

$$\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} dt \exp(-t)t^n = \int_0^{\infty} dt \exp(-t) \cdot \exp[n \ln(t)] = \int_0^{\infty} dt \exp[n \ln(t) - t].$$

Provedeme substituci  $t = n+x$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dt \exp[n \ln(t) - t] &= \int_{-n}^{\infty} dx \exp[n \ln(n+x) - n - x] \\ &\approx \int_{-n}^{\infty} dx \exp\left[n \ln(n) - n - \frac{x^2}{2n}\right] = \exp[n \ln(n) - n] \int_{-n}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2n}\right). \end{aligned}$$

Jelikož je Gaussova funkce nenulová jen na určitém intervalu, jehož šířka je však mnohem menší než  $n$ , můžeme spodní hranici integrálu poslat do  $-\infty$ . Potom máme Gaussovu funkci, kterou dokážeme integrovat

$$\exp[n \ln(n) - n] \int_{-n}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2n}\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2n}\right) = \sqrt{2\pi n} \exp[n \ln(n) - n].$$

#### 4. Výpočty ve více rozměrech

Spočítejte objem a povrch  $n$ -rozměrné koule.

##### Řešení:

Tuto úlohu lze řešit dvěma způsoby. Buď si poctivě spočítat Jakobián transformace do  $n$ -rozměrných sférických souřadnic, nebo použít trik. Podívejme se nejprve na složitější výpočet: To dopíšu později... Nakonec druhý způsob řešení. Ve 3D případě je koule množina bodů, které splňují rovnici

$$B^3(R) : x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R^2, \quad (1)$$

a hranice tohoto objektu

$$S^2(R) : x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = R^2. \quad (2)$$

Pro dimenzi prostoru rovnu  $d$  tyto vzorce snadno zobecníme:

$$B^d(R) : x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2 \leq R^2, \quad (3)$$

a pro hranici

$$S^{d-1}(R) : x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2 = R^2. \quad (4)$$

V dalším značení nadefinujeme objem ve zobecněném slova smyslu, jelikož jednorozměrném případě se bude jednat o délku úsečky, ve dvou rozměrech plochu kruhu, atp.

$$\text{Vol}(S^1(R)) = 2\pi R, \quad (5)$$

$$\text{Vol}(S^2(R)) = 4\pi R^2. \quad (6)$$

Jelikož má objem jednotky délky umocněnou na danou dimenzi prostoru, můžeme hledaný objem napsat pomocí objemu jednotkové sféry

$$\text{Vol}(S^{d-1}(R)) = R^{d-1} \text{Vol}(S^{d-1}). \quad (7)$$

Objemy jednotkových sfér jsou potom pro  $d = 2$  a  $d = 3$ :

$$\text{Vol}(S^1) = 2\pi, \quad (8)$$

$$\text{Vol}(S^2) = 4\pi. \quad (9)$$

Nyní se nám problém zredukoval na úkol najít objem jednotkové sféry. Předpokládejme prostor  $\mathbb{R}^d$  se souřadnicemi  $x_1, x_2, \dots, x_d$  a necht'  $r$  je radiální souřadnice

$$r^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2. \quad (10)$$

Cesta za výpočtem objemu bude následující: spočítáme integrál

$$I_d = \int_{\mathbb{R}^d} dx_1 dx_2 \dots dx_d \exp(-r^2). \quad (11)$$

První metoda: integrál rozdělíme na  $d$  integrálů, z nichž každý integrujeme samostatně, tedy

$$I_d = \prod_{i=1}^d \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i e^{-x_i^2} = (\sqrt{\pi})^d = \pi^{\frac{d}{2}}. \quad (12)$$

Nyní integrujeme druhou metodou: integrál spočítáme tak, že rozdělíme  $\mathbb{R}^d$  na tenké sférické slupky. Jelikož prostor daný konstantou  $r$  je sféra  $S^{d-1}(r)$ , je objem slupky mezi  $r$  a  $r + dr$  roven objemu  $S^{d-1}(r)$  vynásobený  $dr$ . Potom

$$I_d = \int_0^{\infty} dr \text{Vol}(S^{d-1}(r)) \exp(-r^2) = \text{Vol}(S^{d-1}) \int_0^{\infty} dr r^{d-1} \exp(-r^2) \quad (13)$$

$$= \frac{1}{2} \text{Vol}(S^{d-1}) \int_0^{\infty} dt \exp(-t) t^{\frac{d}{2}-1}, \quad (14)$$

kde jsme využili (7) a v závěrečném kroku jsme provedli substituci  $t = r^2$ . Poslední integrál může být vyjádřen pomocí Gama funkce, tedy

$$I_d = \frac{1}{2} \text{Vol}(S^{d-1}) \Gamma\left(\frac{d}{2}\right). \quad (15)$$

Tento integrál je také roven  $I_d = \pi^{\frac{d}{2}}$ , jak jsme spočítali výše. Potom hledaný objem jednotkové sféry je roven

$$\text{Vol}(S^{d-1}) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}. \quad (16)$$

Snadno pak určíme  $\text{Vol}(B^d)$ :

$$\text{Vol}(B^d) = \int_0^1 dr \text{Vol}(S^{d-1}(r)) = \text{Vol}(S^{d-1}) \int_0^1 dr r^{d-1} = \text{Vol}(S^{d-1}) \frac{r^d}{d} \Big|_0^1 = \frac{\text{Vol}(S^{d-1})}{d}, \quad (17)$$

odtud

$$\text{Vol}(B^d) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{d\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} = \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\frac{d}{2}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} = \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(1 + \frac{d}{2}\right)}. \quad (18)$$

## 5. Obsazení energetických hladin vodíku

Atom vodíku se nachází v hladině  $n = 3$ . Za předpokladu, že obsazení energetických hladin je dáno mikrokanonickým rozdělením spočítejte pravděpodobnost toho, že se atom nachází ve stavech se stejným vedlejším kvantovým číslem  $l$ .

**Řešení:** Nejprve je nutné určit počet možných stavů pro každý kvantový stav popsaný  $l$ . Pro  $n = 3$  jsou možná kvantová čísla  $l = \{0, 1, 2\}$ . Každý stav  $s$  vedlejším kvantovým číslem  $l$  je ještě rozdělen podle magnetických kvantových čísel, a to  $m = \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$ . Každý takový stav je ještě rozdělen podle spinového kvantového čísla  $s = \pm 1/2$ . Nyní spočítáme počet všech možných stavů pro jednotlivé stavy  $s$  daným  $l$ :

- $l = 0$ :  $m = \{0\}$ ,  $s = \{\pm 1/2\}$ , a tedy jsou možné dva stavy,
- $l = 1$ :  $m = \{-1, 0, +1\}$ ,  $s = \{\pm 1/2\}$ , šest možných stavů,
- $l = 2$ :  $m = \{-2, -1, 0, +1, +2\}$ ,  $s = \{\pm 1/2\}$ , deset možných stavů.

Pravděpodobnost spočítáme snadno pomocí vzorce

$$w_i = \frac{\# \text{ stavy s kvantovým číslem } l = i}{\# \text{ všechny možné stavy}},$$

odtud snadno zjistíme, že

$$w_0 = \frac{1}{9}, w_1 = \frac{1}{3}, w_2 = \frac{5}{9}.$$

## 6. Vyjádření entropie

Entropie pro izolovanou soustavu je dána vztahem

$$S = k_B \ln \Omega, \quad (19)$$

kde  $\Omega$  je počet mikrostavů. Pro uzavřenou soustavu

$$S = -k_B \sum_n w_n \ln w_n. \quad (20)$$

Ukažte, že pro izolovanou soustavu vedou oba vzorce ke stejnému výsledku.

Předpokládejte, že je soustava rozdělena na těleso  $A$  a termostat  $A'$ , které dohromady tvoří izolovanou soustavu. Spočítejte entropii a) celé izolované soustavy  $A + A'$  a b) součet entropií soustav  $A$  a  $A'$  a ukažte, že oba postupy vedou ke stejnému výsledku.

**Řešení:** V případě, že soustava je izolovaná, pak podle principu stejné pravděpodobnosti  $w_n = 1/\Omega$ . Tedy

$$S = -k_B \sum_n w_n \ln w_n = -k_B \sum_{n=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega} \ln \left( \frac{1}{\Omega} \right) = k_B \ln \Omega \sum_{n=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega} = k_B \ln \Omega.$$

Soustava je rozdělena na  $A$  (těleso) a  $A'$  (termostat). Energie izolované soustavy je součtem energií těchto dvou soustav, jejichž energie je rovna  $E_0 = E + E' = \text{konst.}$  Spočítejme nyní entropii v jednotlivých případech. V případě a) každému stavu  $n$  soustavy  $A$  přísluší  $\Omega(E_0 - E_n)$  stavů soustavy  $A'$ . Tento výraz můžeme upravit, vezmeme logaritmus z počtu stavů, který rozvineme podle Taylorova vzorce do prvního řádu podle  $E_n$

$$k_B \ln[\Omega(E_0 - E_n)] \approx k_B \ln \Omega(E_0) - \frac{\partial}{\partial E} k_B \ln \Omega(E) E_n = k_B \ln \Omega(E_0) - \frac{\partial S}{\partial E} E_n = k_B \ln \Omega(E_0) - \frac{E_n}{T}, \quad (21)$$

po odlogaritmování a vydělení  $k_B$  v tomto vztahu dostaneme

$$\Omega(E_0 - E_n) \approx \Omega(E_0) \exp \left( -\frac{E_n}{k_B T} \right). \quad (22)$$

Celková entropie izolované soustavy je potom rovna

$$S_0 = k_B \ln \left[ \sum_n \Omega(E_0) \exp \left( -\frac{E_n}{k_B T} \right) \right] = k_B \ln \Omega(E_0) + k_B \ln \sum_n \exp \left( -\frac{E_n}{k_B T} \right) = k_B \ln \Omega(E_0) + k_B \ln Z. \quad (23)$$

V případě b) je nutné sečíst entropii v obou podsoustavách

$$\begin{aligned} S_0 = S + S' &= -k_B \sum_n w_n \ln w_n + k_B \ln \Omega(E_0 - E) = \\ &= -k_B \sum_n \frac{1}{Z} \exp \left( -\frac{E_n}{k_B T} \right) \left( -\ln Z - \frac{E_n}{k_B T} \right) + k_B \ln \Omega(E_0) - \frac{\partial k_B \ln \Omega(E_0)}{\partial E_0} E = \\ &= k_B \ln Z + \frac{1}{T} \sum_n \frac{1}{Z} \exp \left( -\frac{E_n}{k_B T} \right) E_n + k_B \ln \Omega(E_0) - \frac{E}{T} = k_B \ln Z + \frac{E}{T} + k_B \ln \Omega(E_0) - \frac{E}{T} = \\ &= k_B \ln \Omega(E_0) + k_B \ln Z. \quad (24) \end{aligned}$$

V obou případech je entropie zadána stejným výrazem.

## 7. Entropie

Ukažte, že entropie získaná pomocí

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V$$

může být přepsána jako  $S = -k \sum_n w_n \ln w_n$ .

**Řešení:** Z kanonického rozdělení  $F = -kT \ln Z$  a  $Z = \sum_n \exp(-E_n/kT)$ . Proto

$$\begin{aligned} S &= \left( \frac{\partial (kT \ln Z)}{\partial T} \right)_V = k \ln Z + \frac{kT}{Z} \left( \frac{\partial Z}{\partial T} \right)_V = k \ln Z + \frac{1}{TZ} \sum_n E_n \exp(-E_n/kT) = \\ &= k \ln Z + \frac{1}{T} \sum_n (-kT \ln w_n - kT \ln Z) w_n = -k \sum_n w_n \ln w_n. \end{aligned}$$

## 8. Tepelná kapacita

Ukažte, že  $c_V$  je dána fluktuací energie, tj.

$$c_V = \frac{1}{k_B T^2} \langle \Delta E^2 \rangle.$$

**Řešení:** Střední energie soustavy je rovna

$$E = \sum_n w_n E_n,$$

pro  $V = \text{konst.}$  se  $E_n$  nemění, potom můžeme pro tepelnou kapacitu psát

$$c_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \sum_n E_n \left( \frac{\partial w_n}{\partial T} \right)_V.$$

Pravděpodobnost obsazení daného stavu je rovna

$$w_n = \exp\left(\frac{F - E_n}{k_B T}\right),$$

odkud snadno získáme derivaci podle teploty

$$\left( \frac{\partial w_n}{\partial T} \right)_V = \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F - E_n}{k_B T} \right)_V \exp\left(\frac{F - E_n}{k_B T}\right) = \frac{T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V - F + E_n}{k_B T^2} \exp\left(\frac{F - E_n}{k_B T}\right).$$

Nyní využijeme znalostí z termodynamiky, odkud známe definici volné energie

$$F = E - TS, \quad dF = -pdV - SdT,$$

potom

$$\left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -S,$$

a

$$E = F + TS,$$

což dosadíme do vztahu pro derivaci  $w_n$  podle teploty

$$\left( \frac{\partial w_n}{\partial T} \right)_V = \frac{E_n - E}{k_B T^2} \exp\left(\frac{F - E_n}{k_B T}\right) = \frac{E_n - E}{k_B T^2} w_n.$$

Tepelná kapacita je potom ve tvaru

$$c_V = \sum_n E_n w_n \frac{E_n - E}{k_B T^2} = \frac{1}{k_B T^2} \left( \sum_n E_n^2 w_n - E \sum_n E_n w_n \right) = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - E^2),$$

odtud dostáváme hledaný vztah

$$c_V = \frac{1}{k_B T^2} \langle \Delta E^2 \rangle.$$

## 9. Zastoupení molekul dusíku v různých stavech

Jádro atomu dusíku  ${}^7\text{N}_{14}$  má jaderný spin  $I = 1$ . Předpokládejme, že dvojatomová molekula  $\text{N}_2$  může pro klasické teploty konat pouze rotační pohyb, ale ne vibrační pohyb. Navíc zanedbejme pohyb elektronů. Najděte relativní množství „orto“ a „para“ molekul v plynu složeném právě z molekul dusíku. („Orto“ – symetrický spinový stav, „Para“ – antisymetrický spinový stav). Co se stane s relativním množstvím molekul v těchto stavech, je-li teplota plynu  $T$  snížena limitně k absolutní nule?

**Řešení:** Jádro  ${}^7\text{N}_{14}$  má bosonový spin  $I = 1$ , výsledná vlnová funkce systémů jader musí být symetrická. Pro dusík v orto-stavu musí být rotační kvantové číslo  $J$  liché číslo, aby byla celková vlnová funkce symetrická. Pro para-stav musí být  $J$  zase sudé číslo. Rotační energie dusíkové molekuly jsou ve tvaru

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2H} J(J+1), \quad J \in \mathbb{N}_0,$$

kde  $H$  je moment hybnosti. Spočítáme nyní poměr populací jednotlivých stavů

$$\frac{\# \text{populace para-dusíku}}{\# \text{populace orto-dusíku}} = \frac{\sum_{\text{liché } J} (2J+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} J(J+1)\right]}{\sum_{\text{sudé } J} (2J+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} J(J+1)\right]} \cdot \frac{I+1}{I},$$

kde  $I$  je spin dusíkového jádra. Pokud

$$\frac{\hbar^2}{Hk_B T} \ll 1,$$

mohou být sumy aproximovány integrály, postupně máme

$$\begin{aligned} \sum_{\text{sudé } J} (2J+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} J(J+1)\right] &= \\ \sum_{m=0}^{\infty} (4m+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} 2m(2m+1)\right] &\approx \int_0^{\infty} dm (4m+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} 2m(2m+1)\right] = \\ &= \int_0^{\infty} dx \exp\left[-\frac{\hbar^2}{Hk_B T} x\right] = \frac{Hk_B T}{\hbar^2}. \quad (25) \end{aligned}$$

Druhý integrál spočítáme podobně:

$$\begin{aligned} \sum_{\text{liché } J} (2J+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} J(J+1)\right] &= \\ \sum_{m=0}^{\infty} (4m+3) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} (2m+1)(2m+2)\right] &= \int_0^{\infty} dm (4m+3) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} (2m+1)(2m+2)\right] = \\ &= \exp\left(\frac{-\hbar^2}{Hk_B T}\right) \int_0^{\infty} dm (4m+3) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{Hk_B T} (2m^2+3m)\right] = \\ &= \exp\left(\frac{-\hbar^2}{Hk_B T}\right) \int_0^{\infty} dy \exp\left[-\frac{\hbar^2}{Hk_B T} y\right] = \frac{Hk_B T}{\hbar^2} \exp\left(\frac{-\hbar^2}{Hk_B T}\right). \quad (26) \end{aligned}$$

po dosažení dostaneme

$$\frac{\text{\#populace para-dusíku}}{\text{\#populace orto-dusíku}} = \frac{I+1}{I} \exp\left(\frac{\hbar^2}{Hk_B T}\right) \approx \frac{I+1}{I},$$

jelikož  $I = 1$  je hledaný poměr roven

$$\frac{\text{\#populace para-dusíku}}{\text{\#populace orto-dusíku}} = \frac{2}{1}. \quad (27)$$

Pro výpočet poměru atomů, kdy  $T \rightarrow 0$  využijeme faktu, že

$$\frac{\hbar^2}{Hk_B T} \gg 1,$$

potom exponenciála rychle konverguje k nule, vezmeme proto jen první člen z každé sumy

$$\begin{aligned} \sum_{\text{sudé } J} (2J+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} J(J+1)\right] &= \sum_{m=0}^{\infty} (4m+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} 2m(2m+1)\right] \approx 1, \\ \sum_{\text{liché } J} (2J+1) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} J(J+1)\right] &= \sum_{m=0}^{\infty} (4m+3) \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2Hk_B T} (2m+1)(2m+2)\right] \approx 3 \exp\left(-\frac{\hbar^2}{Hk_B T}\right). \end{aligned}$$

Poměr jednotlivých molekul se potom změní na

$$\frac{\text{\#populace para-dusíku}}{\text{\#populace orto-dusíku}} = \frac{I+1}{3I} \exp\left(\frac{\hbar^2}{Hk_B T}\right) \rightarrow \infty,$$

všechny molekuly dusíku jsou při teplotě blížící se absolutní nule v para-stavu.

## 10. Wienův posunovací zákon

Odvoďte Wienův posunovací zákon z Planckova vyzařovacího zákona.

**Řešení:** Planckův vyzařovací zákon je ve tvaru

$$B(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}. \quad (28)$$

Wienův zákon je vyjadřován pomocí vlnových délek, proto (28) nejprve převedeme do vlnových délek pomocí vztahu

$$B(\nu, T)d\nu = \underbrace{B(\lambda(\nu), T)}_{B(\lambda, T)} \left| \frac{\partial\nu(\lambda)}{\partial\lambda} \right| d\lambda,$$

po převedení do vlnových délek dostaneme

$$B(\lambda, T) = \frac{8\pi ch}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T \lambda}\right) - 1}. \quad (29)$$

Máme hledanou funkci a stačí již jen najít její maximum. Po zderivování podle vlnové délky dostaneme

$$-5 + \frac{hc}{k_B T \lambda} \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{hc}{k_B T \lambda}\right)} = 0.$$

Označíme

$$x_{\max} = \frac{hc}{k_B T \lambda_{\max}},$$

kde index „max“ označuje bod, ve kterém funkce nabývá svého maxima. Tento bod je dán řešením rovnice

$$\frac{x_{\max}}{1 - \exp(-x_{\max})} = 5.$$

Odtud dostaneme pro maximální frekvenci

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}, \quad (30)$$

kde

$$b = \frac{hc}{k_B x_{\max}}.$$

## 11. Stefanův-Boltzmanův zákon

Odvoďte Stefanův-Boltzmanův zákon pro množství energie vyzařené jednotkou plochy za jednotku času.

**Řešení:** Vydjeme z definice intenzity

$$\delta E = I(\nu, \delta) d\Omega \cdot dS \cdot dt \quad (31)$$

Intenzita je tedy z definice energie, která dopadne na plošku  $dS$  z úhlu  $d\Omega$  za čas  $dt$  v intervalu frekvencí  $d\nu$ . Za čas  $dt$  dopadne na plochu záření z objemu

$$dV = dS \cdot \cos \delta \cdot c \cdot dt.$$

Potom platí

$$B(\nu, \delta) d\Omega \cdot dS \cdot dt = c \varepsilon(\nu) \cos(\delta) \cdot \frac{d\Omega}{4\pi} d\nu \cdot dS \cdot dt,$$

odtud zřejmě platí

$$B(\nu, \delta) = \frac{c}{4\pi} \varepsilon(\nu) \cos \delta.$$



Funkci  $B(\nu, \delta)$  nyní zintegrujeme přes prostorové úhly

$$B(\nu) = \iint_{\Omega^+} d\Omega \frac{c}{4\pi} \varepsilon(\nu) \cos \delta = \frac{c}{4\pi} \varepsilon(\nu) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\delta \sin(\delta) \cos(\delta)}_{2\pi \cdot \frac{1}{2}} = \frac{c}{4} \varepsilon(\nu).$$

potom ze znalosti hustoty energie

$$B(\nu) = \frac{c}{4} \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} = \frac{2\pi\nu^3}{c^2} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1},$$

po integraci přes všechny frekvence dostaneme

$$B = \sigma T^4. \quad (32)$$

## 12. Rayleighův-Jeansův zákon

Odvoďte Rayleighův-Jeansův zákon pomocí ekvipartičního teorému.

**Řešení:** Rayleighův-Jeansův zákon popisuje elektromagnetické záření v uzavřené dutině. Podle Ekvipartičního teorému se jedná o soustavu oscilátorů s energií

$$E_{\nu} = 2 \cdot \frac{1}{2} k_B T = k_B T.$$

Energie soustavy oscilátorů je rovna součtu energií jednotlivých oscilátorů. Od sumace můžeme přejít známým postupem k integraci, z řešení částice v krabici víme, že

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i},$$

potom počet těchto stavů v intervalech  $\Delta n_i$  je roven

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \underbrace{L_x \cdot L_y \cdot L_z}_V \frac{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z}{(2\pi)^3}.$$

Potom pro celkovou energii všech částic můžeme psát

$$E = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \approx 2 \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} V E_{\mathbf{k}} = V \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dk' \frac{k'^2}{(2\pi)^3} 2k_B T = V \int_0^{\infty} dk 2k_B T \frac{k^2}{(2\pi)^3} 4\pi,$$

v integrálu provedeme substituci  $k = 2\pi\nu/c$ , dostaneme

$$E \approx V \int_0^{\infty} d\nu 2k_B T \cdot 4\pi \frac{\nu^2}{c^3}, \quad (33)$$

odtud máme

$$\varepsilon_{\nu} \approx \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T. \quad (34)$$

## 13. Země pod vlivem Slunce

Předpokládejme ideální Slunce a Zemi – oboje absolutně černá tělesa v prázdném a plochém prostoru. Teplota Slunce je rovna  $T_S = 6000 \text{ K}$ . Teplotní přenos mezi oceány a atmosférou předpokládejme na Zemi efektivní do té míry, že je teplota povrchu stejná na každém místě. Poloměr Země je  $R_Z = 6 \cdot 10^8 \text{ cm}$  a vzdálenost Země-Slunce je  $d = 1.5 \cdot 10^{11} \text{ m}$ .

(a) Spočítejte teplotu Země.

- (b) Určete sílu, kterou záření od Slunce působí na Zemi.
- (c) Srovnejte výsledky s těmi pro meziplanetárními chondrity sférického tvaru. Chondrit je výborně vodivý a lze jej s dostatečnou přesností brát jako černé těleso. Poloměr je  $d = 0.1 \text{ cm}$  a pohybuje se po kruhové trajektorii kolem Slunce s poloměrem stejným, jako vzdálenost Země-Slunce, a to  $d$ .

**Řešení:**

- (a) Celkový tok záření vycházející ze Slunce je roven

$$F = 4\pi R_s^2 \sigma T_\odot^4,$$

tok záření na jednotku plochy ve vzdálenosti  $d$  (Země) je roven

$$\frac{F}{S} = \frac{4\pi R_s^2 \sigma T_\odot^4}{4\pi d^2},$$

na povrch Země tedy dopadá

$$F_\oplus = \frac{R_s^2 \sigma T_\odot^4}{d^2} \pi R_\oplus^2.$$

Jelikož je Země v termodynamické rovnováze, musí také stejný tok vyzářit jako absolutně černé těleso

$$F_\oplus = 4\pi R_\oplus^4 \sigma T_\oplus^4,$$

odtud

$$\frac{R_s^2 \sigma T_\odot^4}{d^2} \pi R_\oplus^2 = 4\pi R_\oplus^4 \sigma T_\oplus^4,$$

$$T_\oplus = \sqrt{\frac{R_\odot}{2d}} T_\odot = 290 \text{ K.} \quad (35)$$

- (b) Úhel, pod kterým dopadá sluneční záření na zemi je vzhledem k velikosti Země a její vzdálenosti od Slunce konstantní. Proto můžeme sílu spočítat přímo ze vzorce

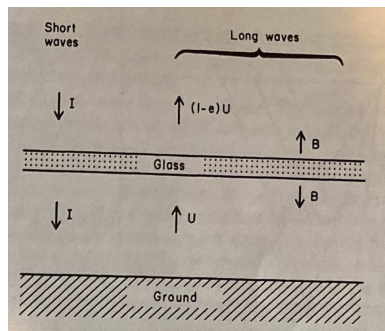
$$\mathcal{F} = \frac{F_\oplus}{c} = \frac{\frac{R_s^2 \sigma T_\odot^4}{d^2} \pi R_\oplus^2}{c} = 6 \times 10^8 \text{ N.}$$

- (c) Můžeme použít stejné vzorce odvozené výše

$$T = 290 \text{ K, } \mathcal{F} = 1.7 \times 10^{-11} \text{ N.}$$

**14. Skleníkový jev**

Uvažujte skleník vytvořený umístěním horizontální skleněné desky v určité výšce nad zemí. Sklo je průhledné pro záření s vlnovými délkami menšími než  $4 \mu\text{m}$ , ale absorbuje část  $\varepsilon$  záření na delších vlnových délkách. Předpokládejte tok slunečního záření  $I$  směrem dolů. Předpokládejte, že jak země, tak sklo vyzařuje podle Stefanova-Boltzmannova zákona. Určete změnu teploty země v důsledku přítomnosti skla.



**Řešení:** Země se ohřívá na teplotu  $T_g$  a emituje dlouhovlnné záření s tokem směrem nahoru

$$U = \sigma T_g^4.$$

Část tohoto toku je absorbována sklen a odražena zpět. Rovnováha nastane, pokud se toky směrem nahoru a dolů vyrovnají, tedy

$$I = (1 - \varepsilon)U + B = U - B,$$

kde  $B$  je tok emitovaný sklem. Z rovnice je  $B = \varepsilon U / 2$  a

$$\sigma T_g^4 = U = \frac{I}{1 - \frac{\varepsilon}{2}}, \quad T_g = \left( \frac{I}{\sigma (1 - \frac{\varepsilon}{2})} \right)^{1/4}$$

Proto  $T_g$  je vyšší až o 19 % (pro  $\varepsilon = 1$ ) než by byla bez přítomnosti skla (pro  $\varepsilon = 0$ ).

### 15. Harmonický oscilátor

Spočítejte vlastní vektory pro lineární harmonický oscilátor v souřadnicové reprezentaci.

**Řešení:** Pro výpočet využijeme kreačních a anihilačních operátorů. Víme, že  $\hat{a}|0\rangle = 0|0\rangle$ . Spočítejme souřadnicovou reprezentaci tohoto vektoru

$$\langle q|\hat{a}|0\rangle = \langle q|0|0\rangle.$$

Jelikož známe vyjádření anihilačního operátoru pomocí  $\hat{x}$  a  $\hat{p}_x$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p}),$$

ve kterém se vyskytují bezrozměrné operátory

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{p} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}_x,$$

dosadíme do předchozího vzorce. Dostaneme

$$\langle q|\hat{a}|0\rangle = \left\langle q \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p}) \right| 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle q|\hat{q}|0\rangle + i\langle q|\hat{p}|0\rangle),$$

operátor může zapůsobit na stav vlevo, potom

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle q|\hat{q}|0\rangle + i\langle q|\hat{p}|0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}q\langle q|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{d}{dq}\langle q|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}qh_0(q) + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{d}{dq}h_0(q) = 0.$$

Dostáváme tedy rovnici pro zjištění vlastní funkce stavu  $|0\rangle$

$$qh_0(q) + \frac{d}{dq}h_0(q) = 0. \quad (36)$$

Řešením rovnice je

$$h_0(x) = C \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).$$

Konstantu  $C$  spočítáme z podmínky normovanosti vlastních vektorů. Musí platit

$$\int dx [h_0(x)]^2 = 1.$$

Potom

$$C^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}. \quad (37)$$

Výsledná vlastní funkce je ve tvaru

$$h_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right). \quad (38)$$

Pro výpočet souřadnicové reprezentace stavů s nenulovým  $n$  využijeme vlastnosti kreačního operátoru  $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ . Pro  $n = 1$  dostaneme

$$\langle q | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle = \langle q | 0 \rangle,$$

potom

$$\left\langle q \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{q} - i\hat{p}) \right| 1 \right\rangle = \langle q | 0 \rangle.$$

Upravíme levou stranu

$$\frac{1}{\sqrt{2}} q \langle q | 0 \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dq} \langle q | 0 \rangle = \langle q | 1 \rangle,$$

odtud

$$h_1(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( q h_0(q) + \frac{d}{dq} h_0(q) \right), \quad (39)$$

pro vlastní funkci  $h_n(q)$  pak můžeme napsat rekurzivní vztah

$$h_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ q h_{n-1}(q) + \frac{d}{dq} h_{n-1}(q) \right]. \quad (40)$$

## 16. Soustava harmonických oscilátorů

Spočítejte termodynamické vlastnosti systému  $N$  rozlišitelných klasických harmonických oscilátorů s frekvencí  $\omega$ .

**Řešení:** Energie soustavy harmonických oscilátorů je rovna

$$E = \sum_{n=1}^N \left( \frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_n^2 \right). \quad (41)$$

Spočítáme nejprve statistickou sumu

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{h^N} \int_{\mathbb{R}^{2N}} d^N q \cdot d^N p \cdot \exp \left[ - \sum_{n=1}^N \left( \frac{p_n^2}{2mk_B T} + \frac{m\omega^2 q_n^2}{2k_B T} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{h^N} \int_{\mathbb{R}^{2N}} d^N p \cdot d^N q \cdot \prod_{n=1}^N \exp \left( \frac{p_n^2}{2mk_B T} + \frac{m\omega^2 q_n^2}{2k_B T} \right) = \\ &= \frac{1}{h^N} \prod_{n=1}^N \int_{\mathbb{R}} dp_n \cdot dq_n \cdot \exp \left( \frac{p_n^2}{2mk_B T} + \frac{m\omega^2 q_n^2}{2k_B T} \right) = \\ &= \frac{1}{h^N} \left[ \int_0^\infty dp \cdot \exp \left( \frac{p^2}{2mk_B T} \right) \right]^N \left[ \int_0^\infty dq \exp \left( \frac{m\omega^2 q^2}{2k_B T} \right) \right]^N = \\ &= \frac{1}{h^N} \left( \sqrt{2mk_B T \pi \cdot \frac{2\pi k_B T}{m\omega^2}} \right)^N = \left( \frac{2\pi k_B T}{h\omega} \right)^N = \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^N. \quad (42) \end{aligned}$$

Volnou energii spočítáme snadno ze vztahu

$$F = -k_B T \ln(Z) = -k_B T \ln \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^N = -N k_B T \ln \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega} \right). \quad (43)$$

Pro výpočet tlaku a entropie využijeme vlastností volné energie

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = 0, \quad (44)$$

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = Nk_B \left[ \ln \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega} \right) + 1 \right]. \quad (45)$$

Energie systému je

$$E = F + TS = Nk_B T.$$

### 17. Rozložení hustoty v atmosféře

Spočítejte rozložení hustoty ve sloupci plynu o základně  $A$  pod vlivem homogenního gravitačního pole. Předpokládejte, že plyn je tvořen nerozlišitelnými částicemi, každá s hmotností  $m$ .

**Řešení:** Opět začneme výpočtem statistické sumy. Tu pro soustavu nerozlišitelných částic zapíšeme ve tvaru

$$Z = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^{3N} \times \Omega} d^{3N}p \cdot d^{3N}q \cdot \exp \left[ - \sum_n \left( \frac{\mathbf{p}_n^2}{2mk_B T} + \frac{mg\mathbf{q}}{k_B T} \right) \right],$$

kde  $\Omega = \{[x, y, z]; x \in [-L, L], y \in [-L, L], z \in [0, \infty), L \in \mathbb{R}^+\}$ . Spočítáme statistickou sumu pro jednu částici

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left[ \int_{\mathbb{R}} dp \cdot \exp \left( - \frac{\mathbf{p}^2}{2mk_B T} \right) \int_{\Omega} dq \cdot \exp \left( - \frac{mg\mathbf{q}}{k_B T} \right) \right],$$

první integrál je z přeškálované Gaussovky, proto je roven

$$\int_{\mathbb{R}} dp \cdot \exp \left( - \frac{\mathbf{p}^2}{2mk_B T} \right) = \sqrt{(2\pi mk_B T)^3}.$$

Druhý integrál

$$\int_{\Omega} dq \cdot \exp \left( - \frac{mg\mathbf{q}}{k_B T} \right) = \underbrace{\int_{-L}^L dx \int_{-L}^L dy}_{A} \underbrace{\int_0^{\infty} dz \exp \left( - \frac{mgz}{k_B T} \right)}_{\frac{k_B T}{mg}} = A \frac{k_B T}{mg}.$$

Potom

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}} A \frac{k_B T}{mg}. \quad (46)$$

Hustota pravděpodobnosti, že se částice vyskytuje ve fázovém objemu  $d^3p \cdot d^3q$  je dána vztahem

$$dw_n = \frac{1}{Z} \frac{d^3p \cdot d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left( - \frac{\mathbf{p}^2}{2mk_B T} \right) \exp \left( - \frac{mg\mathbf{q}}{k_B T} \right) = \frac{mg}{(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}} A k_B T} \exp \left( - \frac{\mathbf{p}^2}{2mk_B T} \right) \exp \left( - \frac{mg\mathbf{q}}{k_B T} \right) d^3p \cdot d^3q.$$

Budeme se zajímat jen o pravděpodobnost nalezení částice v dané poloze  $\mathbf{q}$ , proto  $w_n$  zintegrujeme přes prostor hybností

$$\int_{\mathbf{p}} dw_n = \underbrace{\frac{mg}{A k_B T} \exp \left( - \frac{mgq_3}{k_B T} \right)}_{\mathcal{P}} \cdot d^3q,$$

kde  $\mathcal{P}$  označuje hustotu pravděpodobnosti výskytu dané částice v elementu  $d^3q$ . Koncentraci pak získáme

$$n = \frac{Nmg}{A k_B T} \exp \left( - \frac{mgq_3}{k_B T} \right). \quad (47)$$

Hustota je rovna

$$\rho(z) = \rho(0) \cdot \exp \left( - \frac{mgz}{k_B T} \right). \quad (48)$$

## 18. Tepelná kapacita plynu I

Uvažme plyn s dvouatomovými molekulami. Spočítejte tepelnou kapacitu daného plynu připadající na jednu molekulu. Počítejte pouze s vibračním pohybem molekul, kdy je energie dána vztahem

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (49)$$

Spočítejte nejprve statistickou sumu, ze které určíte volnou energii a z volné energie již lze určit hledanou tepelnou kapacitu. Výslednou tepelnou kapacitu můžete napsat v aproximaci nízkých a vysokých teplot.

**Řešení:** Spočítáme statistickou sumu (partiční funkci)

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)}{k_B T}\right] = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T} n\right). \quad (50)$$

Nekonečná řada je řadou geometrickou, u které dokážeme zjistit součet. Potom můžeme statistickou sumu napsat ve tvaru

$$Z = \frac{\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)} = \frac{2}{2 \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right]} = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}. \quad (51)$$

Pomocí statistické sumy lze snadno najít volnou energii

$$F = -k_B T \ln(Z) = k_B T \ln \left[ 2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right].$$

Z výpočetního hlediska se jeví nejvýhodnější postup nejprve spočítat vnitřní energii pomocí vzorce

$$E = F + TS = F - T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V.$$

Po dosazení a derivaci vyjde

$$E = k_B T \ln \left[ 2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right] - k_B T \ln \left[ 2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right] + \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{coth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) = \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{coth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right).$$

Z energie již snadno spočítáme hledanou tepelnou kapacitu

$$c_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\hbar\omega}{2T} \right)^2 \frac{1}{k_B \sinh^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}. \quad (52)$$

Na závěr určíme tepelnou kapacitu pro vysoké a pro nízké teploty:

- **aproximace nízkých teplot:** v rovnici pro tepelnou kapacitu funkci sinh rozepíšeme pomocí exponenciál

$$c_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \frac{1}{k_B \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right]^2}.$$

První exponenciála nabývá výrazně větších hodnot než druhá exponenciála, proto můžeme tepelnou kapacitu napsat ve tvaru

$$c_V \approx \frac{1}{k_B} \left( \frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right). \quad (53)$$

- **aproximace vysokých teplot:** v tomto případě nabývá sinh velmi malých hodnot, proto provedeme rozvoj podle Taylorova vzorce do prvního řádu, potom

$$c_V \approx \left( \frac{\hbar\omega}{T} \right)^2 \frac{1}{k_B \left( \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2} = k_B. \quad (54)$$

## 19. Tepelná kapacita plynu II

Uvažme plyn s dvouatomovými molekulami. Spočítejte molární tepelnou kapacitu daného plynu. Počítejte pouze s rotačním pohybem molekul, kdy je energie dána vztahem

$$E_{j,m} = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I}, \quad (55)$$

kde  $I$  je moment setrvačnosti molekuly. Jelikož nelze statistickou sumu spočítat analyticky, vyjádřete ji v aproximaci vysokých a nízkých teplot.

**Řešení:** Zapíšeme opět statistickou sumu, která je ve tvaru

$$Z = \sum_j g_j \exp\left(-\frac{E_j}{k_B T}\right), \quad (56)$$

kde  $g_j$  značí degeneraci dané energetické hladiny. Po dosazení (55) dostaneme

$$Z = \sum_{j=0}^{\infty} (2j+1) \exp\left(-\frac{\hbar^2 j(j+1)}{2Ik_B T}\right). \quad (57)$$

Tuto sumu neumíme analyticky spočítat, proto partiční funkci vyjádříme pro dva případy: limitu vysokých a nízkých teplot.

- **limita vysokých teplot:** v tomto případě platí

$$\frac{\hbar^2}{2Ik_B T} \ll 1,$$

proto (57) je vlastně levá Riemannova suma. Potom můžeme psát

$$\sum_{j=0}^{\infty} (2j+1) \exp\left(-\frac{\hbar^2 j(j+1)}{2Ik_B T}\right) \approx \int_0^{\infty} dj (2j+1) \exp\left(-\frac{\hbar^2 j(j+1)}{2Ik_B T}\right) = \int_0^{\infty} dz \exp\left(-\frac{\hbar^2 z}{2Ik_B T}\right) = \frac{2Ik_B T}{\hbar^2}.$$

Odtud určíme volnou energii

$$F = -k_B T \ln\left(\frac{2Ik_B T}{\hbar^2}\right),$$

vnitřní energie

$$E = k_B T,$$

a nakonec hledaná tepelná kapacita

$$c_V = k_B. \quad (58)$$

- **limita nízkých teplot:** pro nízké teploty je

$$\frac{\hbar^2}{2Ik_B T} \gg 1,$$

exponenciála rychle konverguje k nule, a my proto můžeme vybrat ze sumy jen omezené množství sčítanců. Vezměme dva, potom je statistická suma rovna

$$\sum_{j=0}^{\infty} (2j+1) \exp\left(-\frac{\hbar^2 j(j+1)}{2Ik_B T}\right) \approx 1 + 3 \exp\left(-\frac{\hbar^2}{Ik_B T}\right).$$

Úplně stejným postupem jako v předchozích příkladech určíme volnou energii, vnitřní energii a nakonec tepelnou kapacitu. Vnitřní energie je rovna

$$E = \frac{3\hbar^2}{I} \frac{1}{3 + \exp\left(\frac{\hbar^2}{Ik_B T}\right)},$$

a nakonec hledaná tepelná kapacita

$$c_V = \frac{3\hbar^4}{k_B T^2 I^2} \frac{1}{\left[3 \exp\left(-\frac{\hbar^2}{2k_B T I}\right) + \exp\left(\frac{\hbar^2}{2k_B T I}\right)\right]^2}. \quad (59)$$

## 20. Ověření jednotek

Ukažte, že tlak a hustota energie mají stejnou jednotku.

**Řešení:** ověříme jednotky z definičních vztahů:

$$[p] = \frac{[F]}{[S]} = \frac{\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2}}{\text{m}^2} = \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2},$$

$$[e] = \frac{[E]}{[V]} = \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}}{\text{m}^3} = \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}.$$

## 21. Relativistické částice

Spočítejte hustotu stavů pro relativistické částice a najděte limitní vztahy pro klasické a ultra relativistické částice.

**Řešení:** Pro hustotu stavů platí vztah

$$\rho(E) = \frac{gV}{\pi^d} \frac{1}{2^d} \text{Vol}(S^{d-1}) \frac{[k(E)]^{d-1}}{\left| \frac{dE}{dk} \right|}, \quad (60)$$

kde  $g$  je degenerace energiových hladin,  $d$  dimenze prostoru a  $\text{Vol}(S^{d-1})$  povrch  $d-1$  rozměrné sféry. V našem případě máme  $d = 3$ . Disperzní závislost  $E(k)$  je dána vztahem

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2},$$

odtud

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}}{\hbar c}.$$

Do (60) dosadíme příslušné veličiny, dostaneme

$$\rho(E) = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{c^3} E \sqrt{E^2 - m^2 c^4}. \quad (61)$$

- Klasická limita – Energie je v tomto případě rovna:

$$E_{\text{kl.}} \approx E - mc^2 = \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2} - mc^2 = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 c^2}} - mc^2 \approx mc^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 c^2} \right) - mc^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (62)$$

- Ultrarelativistická limita – v tomto případě platí  $E \gg mc^2$ , potom můžeme v odmocnině zanedbat druhý člen

$$\rho(E) = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{c^3} E^2.$$

## 22. Odvození Maxwellova-Boltzmanova zákona

Ukažte, že v klasickém případě je možné z grandkanonického rozdělení jedné částice odvodit Maxwellův-Boltzmanův zákon rozložení rychlostí.

**Řešení:** Pro počet stavů bosonu v intervalu energií  $(E, E + dE)$  platí

$$dN = \frac{\rho(E)dE}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1}.$$

Jelikož v klasickém případě je

$$\exp\left(-\frac{E-\mu}{k_B T}\right) \ll 1,$$



můžeme jedničku ve jmenovateli zanedbat. Potom po dosazení za  $\rho(E)$  dostaneme

$$dN = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2m^3 E} \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) dE.$$

Výraz transformujeme ze souřadnic energie do souřadnic rychlostí

$$dE = \frac{\partial E}{\partial v} dv = mv,$$

protože uvažujeme klasický vzorec pro kinetickou energii  $E = 0.5 \cdot mv^2$

$$dw = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2m^3} \sqrt{\frac{m}{2}} \exp\left(\frac{0.5mv^2 - \mu}{k_B T}\right) m dv = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} m^3 v^2 \exp\left(-\frac{v^2}{2mk_B T}\right) \exp\left(-\frac{\mu}{k_B T}\right) dv.$$

Pro výpočet  $\mu$  vyjdeme ze vztahu pro jednu částici

$$1 = N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{3}{2}}\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\frac{1}{2}}}{\exp\left(x - \frac{\mu}{k_B T}\right) + 1}.$$

V integrálu nabývá exponenciála výrazně větších hodnot než jedna, proto číslo jedna zanedbáme, dostaneme

$$\int_0^{\infty} dx x^{\frac{1}{2}} \exp\left(-x + \frac{\mu}{k_B T}\right) \approx \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) \int_0^{\infty} dx x^{\frac{1}{2}} \exp(-x) = \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right).$$

Dosadíme do předchozího vzorce

$$\frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) = (2\pi mk_B T)^{-\frac{3}{2}}.$$

Odkud obdržíme

$$dw = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right) v^2 \exp\left(-\frac{v^2}{2k_B T}\right) dv. \quad (63)$$

### 23. Odvození Planckova zákona

Ukažte, že je možné z grandkanonického rozdělení pro částice s  $\mu = 0$  odvodit Planckův zákon.

Řešení: Pro počet bosonů v energiovém pásu platí vztah

$$dN = \frac{\rho(E) dE}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) - 1}.$$

Pro fotony platí  $\mu = 0$ , a energie je rovna  $E = h\nu$ . Přejdeme analogicky jako v předchozím příkladu k proměnným frekvence. Pro hustotu energie vyjde vztah

$$EdN = \frac{8\pi v^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}. \quad (64)$$

### 24. Bosonový a Fermionový integrál

Dokažte rovnost

$$I_f(m) = \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^{m-1}}{\exp(x) + 1} = (1 - 2^{1-m}) \zeta(m) \cdot \Gamma(m), \quad (65)$$

a

$$I_b(m) = \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^{m-1}}{\exp(x) - 1} = \zeta(m) \cdot \Gamma(m), \quad (66)$$

kde  $\zeta(m)$  je Riemannova funkce

$$\zeta(m) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m}.$$

**Řešení:** Integrál  $I_f(m)$  upravíme na tvar

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^{m-1}}{\exp(x)+1} = \int_0^{\infty} dx x^{m-1} \exp(-x) \frac{1}{1+\exp(-x)},$$

zlomek v integrálu nyní můžeme rozvinout podle vzorce

$$\frac{1}{1 \pm x} = 1 \mp x + x^2 \mp \dots, \quad (67)$$

potom dostaneme

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dx x^{m-1} \exp(-x) \frac{1}{1+\exp(-x)} &= \int_0^{\infty} dx x^{m-1} \exp(-x) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \exp(-kx) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dx (-1)^k \exp[-(1+k)x] x^{m-1}, \end{aligned}$$

v sumě položíme  $k' = k + 1$ , z integrálu vyjmemme členy nezávislé na proměnné  $x$  a následně provedeme substituci  $y = kx$

$$\sum_{k'=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dx (-1)^{k'} \exp[-(1+k')] x^{m-1} = \sum_{k'=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dx (-1)^{k'-1} \exp(-k'x) x^{m-1} = \sum_{k'=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k'-1}}{k'^m} \int_0^{\infty} dy \exp(-y) y^{m-1}.$$

Jelikož je argument integrálu nezávislý na sčítacím indexu  $k'$ , můžeme sumu upravit samostatně. Jedná se o nekonečnou řadu, ve které je podíl s lichým číslem kladný a podíl se sudým číslem záporný

$$\sum_{k'=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k'-1}}{(k')^m} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l-1)^m} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l)^m}.$$

Takto napsanou sumu můžeme upravit následujícím způsobem

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l-1)^m} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l)^m} &= \\ \frac{1}{1^m} + \frac{1}{3^m} + \frac{1}{5^m} + \dots + \frac{1}{(2l-1)^m} + \dots - \frac{1}{2^m} - \frac{1}{4^m} - \frac{1}{6^m} - \dots - \frac{1}{(2l)^m} - \dots &= \\ \frac{1}{1^m} + \frac{1}{2^m} + \frac{1}{3^m} + \frac{1}{4^m} + \dots + \frac{1}{k^m} - 2 \left( \frac{1}{2^m} + \frac{1}{4^m} + \dots + \frac{1}{(2l)^m} + \dots \right) &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m} - 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l)^m} = \\ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m} - 2^{1-m} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^m} &= (1 - 2^{1-m}) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m}. \quad (68) \end{aligned}$$

Upravená funkce potom vypadá takto

$$\sum_{k'=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k'-1}}{k'^m} \int_0^{\infty} dy \exp(-y) y^{m-1} = (1 - 2^{1-m}) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m} \int_0^{\infty} dy \exp(-y) y^{m-1} = (1 - 2^{1-m}) \zeta(m) \Gamma(m). \quad (69)$$

Druhá rovnost se dokáže analogickým způsobem – provede se rozvoj s pomocí vzorce (67)

$$I_b(m) = \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^{m-1}}{\exp(x) - 1} =$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dx x^{m-1} \exp[-x(1+k)] = \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dx x^{m-1} \exp(-xk) =$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^m} \int_0^{\infty} dy y^{m-1} \exp(-y) = \zeta(m)\Gamma(m). \quad (70)$$

## 25. Vlastnosti funkcí

Definujme funkce

$$B_n(y) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{\exp(x-y) - 1}, \quad (71)$$

a

$$F_n(y) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{\exp(x-y) + 1}. \quad (72)$$

Pro tyto funkce dokažte

$$\frac{dB_{n+1}(y)}{dy} = B_n(y),$$

a

$$\frac{dF_{n+1}(y)}{dy} = F_n(y).$$

**Řešení:** Nejprve spočítáme

$$\frac{dB_{n+1}(y)}{dy} = \frac{d}{dy} \left[ \frac{1}{\Gamma(n+1)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^n}{\exp(x-y) - 1} \right] = \frac{1}{\Gamma(n+1)} \int_0^{\infty} dx x^n \frac{d}{dy} \frac{1}{\exp(x-y) - 1}.$$

V této fázi využijeme znalosti derivace funkce v argumentu integrálu. Jelikož

$$\frac{d}{dy} \frac{1}{\exp(x-y) - 1} = -\frac{d}{dx} \frac{1}{\exp(x-y) - 1},$$

můžeme výraz na pravé straně dosadit do integrálu, ve kterém pomocí metody per partes dostaneme

$$-\frac{1}{\Gamma(n+1)} \int_0^{\infty} dx x^n \frac{d}{dx} \frac{1}{\exp(x-y) - 1} = \frac{1}{\Gamma(n+1)} \left\{ \underbrace{\left[ -\frac{x^n}{\exp(x-y) - 1} \right]_0^{\infty}}_0 + \int_0^{\infty} dx \frac{n \cdot x^{n-1}}{\exp(x-y) - 1} \right\}.$$

Dále víme, že  $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$ . Potom dostaneme

$$\frac{dB_{n+1}(y)}{dy} \frac{d}{dy} = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{\exp(x-y) - 1} = B_n(y). \quad (73)$$

Vztah pro fermiony lze dokázat analogicky.

## 26. Bose-Einsteinova kondenzace ve 2D?

Ukažte, že pro dimenzi prostoru  $d = 2$  nedochází ke vzniku Boseho-Einsteinova kondenzátu.

**Řešení:** Nejprve spočítáme hustotu stavů ve 2D:

$$\rho(E) = \frac{2\pi gSm}{(2\pi\hbar)^2}.$$

Termodynamický potenciál je roven

$$\Omega = - \int_0^{\infty} dE \left[ \int_0^{\infty} dE' \rho(E') \right] \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) - 1},$$

kde

$$\int_0^{\infty} dE' \rho(E') = \frac{2\pi gSmE}{(2\pi\hbar)^2}.$$

Potom je  $\Omega$  rovno

$$\Omega = \frac{2\pi gSm}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^{\infty} dE \frac{E}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) - 1}.$$

Počet částic je ve 2D případě roven (uvažme  $\mu \rightarrow 0$ )

$$N = \int_0^{\infty} dE \frac{\rho(E)}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) - 1} = \frac{2\pi gSmS}{(2\pi\hbar)^2} k_B T \int_0^{\infty} dx \frac{1}{\exp(x) - 1} = \frac{2\pi gSmS}{(2\pi\hbar)^2} k_B T \zeta(1) \Gamma(1).$$

Jelikož  $\zeta(1) \rightarrow \infty$ , do stavu s  $E = 0$  lze umístit libovolný počet částic.

## 27. Plyn s elektron-pozitronovými páry

Při teplotách  $k_B T \approx m_e c^2$  dochází k tvorbě párů elektron-pozitron. Najděte rovnovážný počet  $e^-$  a  $e^+$ .

**Řešení:** vyjďeme z rovnice

$$\sum_i \gamma_i \mu_i = 0, \quad (74)$$

jelikož při dané reakci vznikne jeden elektron a jeden pozitron, bude jejich celkové množství stejné. Proto

$$\mu_- + \mu_+ = 0 = 2\mu,$$

chemický potenciál v obou dvou případech je tedy roven nule. Jelikož víme, že pro extrémně relativistické fermiony platí

$$dN_E = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{c^3} \frac{E^2 dE}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1},$$

potom pro počet částic platí

$$N_E = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{c^3} \int dE \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1} = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(k_B T)^3}{c^3} \Gamma(3) F_3\left(\frac{\mu}{k_B T}\right).$$

V našem případě, kdy  $\mu = 0$  dostaneme pro funkci

$$F_3\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) = (1 - 2^{-2}) \zeta(3) = \frac{3}{4} \cdot \zeta(3).$$

Počet částic snadno dostaneme

$$N_+ = N_- = \frac{3\pi gV}{4(\pi\hbar)^3} \frac{(k_B T)^3}{c^3} \zeta(3).$$

Pro  $g = 2$  dostaneme

$$N_+ = N_- = \frac{3V}{2\pi^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 \zeta(3). \quad (75)$$

## 28. Počet částic bosonového plynu

Ze vztahu

$$\Omega = -k_B T \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}} B_{\frac{5}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right), \quad (76)$$

platného pro nerelativistický ideální bosonový plyn spočítejte počet částic  $N$ .

**Řešení:** Počet částic je dán vztahem

$$N = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V},$$

kam dosadíme vztah (76), potom dostaneme

$$N = -k_B T \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}} \frac{\partial}{\partial \mu} B_{\frac{5}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right).$$

Z předchozího příkladu víme, že

$$\frac{dB_{n+1}(y)}{dy} = B_n(y),$$

odkud

$$\frac{dB_{n+1} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)}{d\mu} = \frac{1}{k_B T} B_n \left( \frac{\mu}{k_B T} \right).$$

Počet částic nám pak vyjde

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}} B_{\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right). \quad (77)$$

## 29. Rovnice adiabaty

Nalezněte rovnici adiabaty pro ideální fotonový plyn v proměnných  $p$  a  $V$ .

**Řešení:** Volná energie pro fotonový plyn je rovna

$$F = -\frac{4}{3c} \sigma T^4 V,$$

víme, že platí následující rovnosti

$$\left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = -p, \quad \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -S.$$

Entropie je potom rovna

$$S = \frac{16}{3} \sigma T^3 V,$$

za teplotu dosadíme vztah spočítaný pomocí první uvedené derivace

$$T = \sqrt[4]{\frac{3cp}{4\sigma}},$$

po dosazení do rovnice pro adiabatu

$$S = \frac{4^{\frac{5}{4}}}{3^{\frac{3}{4}}} c^{\frac{3}{4}} p^{\frac{3}{4}} \sigma^{\frac{1}{4}} V = \text{konst.}$$

Všechny konstantní členy můžeme zahrnout do konstanty, dostaneme závislost  $p^{\frac{3}{4}} V = \text{konst.}$ , který ještě upravíme do standardního tvaru

$$pV^{\frac{4}{3}} = \text{konst.} \quad (78)$$

### 30. Degenerace fermionového plynu

Přepište podmínku degenerace fermionového plynu  $k_B T \ll \varepsilon_F$  jako vztah mezi vlnovou délkou de Broglieho vlny tepelného pohybu a Fermiho vlnové délky.

**Řešení:** Nejprve do vzorce pro  $\lambda_T$  dosadíme zadanou podmínku

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \gg \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m\varepsilon_F}}.$$

Fermiho vlnovou délku můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\lambda_F = \frac{2\pi\hbar}{p_F} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m\varepsilon}} = \sqrt{\frac{4\pi^2\hbar}{2m\varepsilon}},$$

Potom můžeme nerovnost napsat

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \gg \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m\varepsilon_F}} \approx \lambda_F.$$

Potom hledanou podmínkou je

$$\lambda_T \gg \lambda_F. \quad (79)$$

### 31. Tepelná kapacita plynu III

Spočítejte  $c_V$  nerelativistického fermionového plynu a ověřte platnost klasické limity pro  $c_V/N$ .

**Řešení:** Při výpočtu využijeme znalost vnitřní energie fermionového plynu v klasickém případě

$$E = \frac{3}{2} \frac{gV}{\lambda_T^3} k_B T F_{\frac{5}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right), \quad (80)$$

a vztah pro počet částic

$$N = \frac{gV}{\lambda_T^3} F_{\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right), \quad (81)$$

kde

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (82)$$

Energii rozšíříme pomocí výrazu udávající počet částic  $N/N(T, \mu)$ , dostaneme

$$E = \frac{3}{2} N k_B T \frac{F_{\frac{5}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)}{F_{\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)},$$

Zavedeme značení

$$F_n \left( \frac{\mu}{k_B T} \right) = F_n.$$

Tepelnou kapacitu spočítáme podle známého vzorce

$$c_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{3}{2} N k_B \frac{F_{\frac{5}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}} + \frac{3}{2} N k_B T \frac{\frac{\partial F_{\frac{5}{2}}}{\partial T} F_{\frac{3}{2}} - F_{\frac{5}{2}} \frac{\partial F_{\frac{3}{2}}}{\partial T}}{\left( F_{\frac{3}{2}} \right)^2},$$

derivace funkce  $F_n$  podle  $T$  vypadá následovně

$$\left( \frac{\partial F_n}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right) F_n' = \left[ \left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} \frac{1}{k_B T} - \frac{\mu}{k_B T^2} \right] F_{n-1}.$$

Dosadíme do vztahu pro  $c_V$  a obdržíme

$$c_V = \frac{3}{2}Nk_B \frac{F_{\frac{5}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}} + \frac{3}{2}N \left[ \left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} - \frac{\mu}{T} \right] \left[ 1 - \frac{F_{\frac{5}{2}}F_{\frac{1}{2}}}{\left(F_{\frac{3}{2}}\right)^2} \right].$$

Pro další výpočet využijeme faktu, že celkový počet částic nezávisí na teplotě, tedy

$$\left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{3}{2}F_{\frac{3}{2}} + \left[ \frac{1}{k_B} \left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} - \frac{\mu}{k_B T} \right] F_{\frac{1}{2}} = 0.$$

Odtud vyjádříme partiální derivaci chemického potenciálu podle teploty

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{\mu}{T} - \frac{3}{2}k_B \frac{F_{\frac{3}{2}}}{F_{\frac{1}{2}}}. \quad (83)$$

Po dosazení do  $c_V$  dostaneme

$$c_V = \frac{3}{2}N \left[ 1 - \frac{F_{\frac{5}{2}}F_{\frac{1}{2}}}{\left(F_{\frac{3}{2}}\right)^2} \right] \left( -\frac{3}{2}k_B \frac{F_{\frac{3}{2}}}{F_{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{3}{2}Nk_B \frac{F_{\frac{5}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}} = \frac{3}{2}Nk_B \left\{ \frac{F_{\frac{5}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}} - \frac{3}{2}N \frac{F_{\frac{3}{2}}}{F_{\frac{1}{2}}} \left[ 1 - \frac{F_{\frac{5}{2}}F_{\frac{1}{2}}}{\left(F_{\frac{3}{2}}\right)^2} \right] \right\}.$$

V kladickém případě můžeme funkci  $F_n$  aproximovat

$$F_n \approx \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right), \quad (84)$$

potom jsou všechny podíly funkcí  $F$  rovny jedné a dostaneme známý vztah pro tepelnou kapacitu

$$c_V \approx \frac{3}{2}Nk_B. \quad (85)$$

*Jiný způsob řešení:* Nejprve pomocí termodynamiky spočítáme, čemu je rovno  $c_{V,N}$ . Víme, že

$$c_{V,\mu} = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,\mu},$$

entropii zavedeme jako  $S = S(N(\mu, V, T), V, T)$ , potom

$$T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,\mu} = T \left( \frac{\partial S(N(\mu, V, T), V, T)}{\partial T} \right)_{V,\mu} = T \left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_{V,\mu} \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{V,\mu} + T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N}.$$

Využijeme Maxwellovy relace plynoucí ze vztahu pro volnou energii

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

odkud

$$\left( \frac{\partial S}{\partial N} \right)_{V,T} = - \left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V}.$$

Za předpokladu, že při konstantním objemu se počet částic nemění, tj.

$$dN = \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} + \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu,V} = 0,$$

dostaneme vztah

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} = - \left( \frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,V} \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu,V}.$$

Počítané parciální derivace dosadíme do výrazu pro  $c_{V,\mu}$

$$c_{V,\mu} = T \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V}^{-1} \left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2 + T \underbrace{\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N}}_{c_{V,N}}.$$

Pro tepelnou kapacitu potom dostaneme vztah

$$c_{V,N} = c_{V,\mu} - T \frac{\left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu,V}^2}{\left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V}}. \quad (86)$$

V tomto kroku skončíme s termodynamikou a využijeme výsledků statistické fyziky. Stačí „jen“ dosadit příslušné veličiny pro klasický fermionový plyn, pro nerelativistický fermionový plyn. Termodynamický potenciál takového systému částic je roven

$$\Omega = -\frac{gV}{\lambda_T^3} k_B T F_{\frac{5}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right). \quad (87)$$

Z (87) zjistíme entropii plynu

$$S = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu} = \frac{-gV k_B}{\lambda_T^3} \left( \frac{5}{2} F_{\frac{5}{2}} - \frac{\mu}{k_B T} F_{\frac{3}{2}} \right).$$

Z entropie pak snadno zjistíme tepelnou kapacitu  $c_{V,\mu}$

$$c_{V,\mu} = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,\mu} = -\frac{gV k_B}{\lambda_T^3} \left( \frac{15}{4} F_{\frac{5}{2}} - 3 \frac{\mu}{k_B T} F_{\frac{3}{2}} + \frac{\mu^2}{k_B^2 T^2} F_{\frac{1}{2}} \right).$$

Z (81) spočítáme parciální derivaci

$$\left( \frac{\partial N}{\partial T} \right)_{V,\mu} = \frac{gV}{\lambda_T^3} \left( \frac{3}{2T} F_{\frac{3}{2}} - \frac{\mu}{k_B T^2} F_{\frac{1}{2}} \right).$$

A na závěr

$$\left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{V,T} = \frac{gV}{\lambda_T^3} \frac{1}{k_B T} F_{\frac{1}{2}}.$$

Všechno dosadíme zpět do (86), obdržíme

$$c_{V,N} = \frac{gV k_B}{\lambda_T^3} \left[ \left( \frac{15}{4} F_{\frac{5}{2}} - 3 \frac{\mu}{k_B T} F_{\frac{3}{2}} + \frac{\mu^2}{k_B^2 T^2} F_{\frac{1}{2}} \right) - T^2 \left( \frac{9}{4T^2} \frac{F_{\frac{3}{2}}^2}{F_{\frac{1}{2}}} - \frac{3\mu}{k_B T^3} F_{\frac{3}{2}} + \frac{\mu^2}{k_B^2 T^4} F_{\frac{1}{2}} \right) \right],$$

Celý výraz podělíme  $k_B N$ , na pravé straně dosadíme (81)

$$\frac{c_{V,N}}{k_B N} = \frac{15}{4} \frac{F_{\frac{5}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}} - 3 \frac{\mu}{k_B T} + \frac{\mu^2}{k_B^2 T^2} \frac{F_{\frac{1}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}} - \frac{9}{4} \frac{F_{\frac{3}{2}}}{F_{\frac{1}{2}}} + \frac{3\mu}{k_B T} - \frac{\mu^2}{k_B^2 T^2} \frac{F_{\frac{1}{2}}}{F_{\frac{3}{2}}}.$$

V kladickém případě můžeme opět funkci  $F_n$  aproximovat výrazem (84), potom

$$\frac{c_{V,N}}{k_B N} = \frac{15}{4} - 3 \frac{\mu}{k_B T} + \frac{\mu^2}{k_B^2 T^2} - \frac{9}{4} + 3 \frac{\mu}{k_B T} - \frac{\mu^2}{k_B^2 T^2}.$$

Dostáváme se do nejlepší části výpočtu, jediný nenulový člen bude  $3/2$ , ostatní zmizí, potom máme výsledek

$$\frac{c_{V,N}}{k_B N} = \frac{3}{2}, \quad (88)$$

což je stejný výsledek, jako v předchozím případě.



### 32. Klasická limita

Ověřte platnost klasické limity

$$E = \frac{3}{2}Nk_B T,$$

**Řešení:** Využijeme opět vztahů (80) a (81). Zde vyjádříme přibližně funkci  $F_n$  jako (84). Potom pro energii plynu dostaneme

$$E = \frac{3}{2} \frac{gV}{\lambda_T^3} k_B T F_{\frac{5}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right) \approx \frac{3}{2} \frac{gV}{\lambda_T^3} k_B T F_{\frac{5}{2}} \exp \left( \frac{\mu}{k_B T} \right),$$

analogicky můžeme upravit počet částic

$$N \approx \frac{gV}{\lambda_T^3} \exp \left( \frac{\mu}{k_B T} \right).$$

Spočítáme  $E \cdot N/N$ ,

$$E = \frac{3}{2} k_B T N. \quad (89)$$

### 33. Relativistický plně degenerovaný fermionový plyn

Spočítejte:

- hustotu stavů,
- Fermiho energii, Fermiho hybnost,
- počet částic,
- vnitřní energii,
- termodynamický potenciál,
- stavovou rovnici

pro relativistický (v případě 33f ultrarelativistický) plně degenerovaný fermionový plyn. Počet částic, vnitřní energii a termodynamický potenciál vyjádřete jako funkci Fermiho energie.

**Řešení:** Jelikož je fermionový plyn plně degenerovaný, jde teplota  $T \rightarrow 0$ . Potom výraz

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} \frac{1}{\exp \left( \frac{E-\mu}{k_B T} \right) + 1} = \begin{cases} 1 & E < \mu \\ \frac{1}{2} & E = \mu \\ 0 & E > \mu. \end{cases}$$

- (a) Hustotu stavů určíme ze vzorce

$$n(\mathbf{p})d\mathbf{p} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} g d\mathbf{p},$$

potom

$$n(p)dp = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} p^2 dp.$$

- (b) Vzhledem k tomu, že plně degenerovaný fermionový plyn obsazuje hladiny pouze do stavu s Fermiho hybností  $p_F$ , dostaneme po integraci tohoto výrazu

$$N = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \frac{p_F^3}{3}.$$

Odtud Fermiho hybnost je

$$p_F = (3\pi^2)^{\frac{1}{3}} \left( \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \hbar.$$

Fermiho energie

$$\varepsilon_F = \sqrt{p_F^2 c^2 + m_0^2 c^4}.$$

(c) Vyjádříme hustotu stavů v závislosti na energii. Dostaneme

$$n(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{V}{\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - m^2c^4}}{c^3} \varepsilon d\varepsilon.$$

Provedeme substituci  $\varepsilon \rightarrow mc^2t$  a dostaneme

$$n(t)dt = \frac{V (mc^2)^3}{\pi^2\hbar^3 c^3} \sqrt{t^2 - 1} dt.$$

Počet částic pak dostaneme integrací přes  $t$  od 1 do  $\varepsilon_F/mc^2$  (před substitucí od  $mc^2$  do  $\varepsilon_F$ ) a vynásobením faktorem s exponenciálou, který je však pro teplotu roven limitě viz výše.

$$N = \frac{V (mc^2)^3}{\pi^2\hbar^3 c^3} \int_1^{\frac{\varepsilon_F}{mc^2}} dt \sqrt{t^2 - 1},$$

jehož řešením je

$$N = \frac{V}{3\pi^2\hbar^3 c^3} (\varepsilon_F^2 - m^2c^4)^{\frac{3}{2}}.$$

(d) Vnitřní energie je dána vztahem

$$U = \int_{mc^2}^{\infty} dNE = \frac{V}{\pi^2\hbar^3} \int_{mc^2}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - m^2c^4}}{c^3} = \frac{V (mc^2)^4}{\pi^2\hbar^3} \int_1^{\frac{\varepsilon_F}{mc^2}} dt (t^2 - 1)^{\frac{1}{2}} t^2.$$

Integrál lze vyřešit pomocí substituce  $t = \cosh(x)$  a následných úprav přes vzorce pro hyperbolické funkce zjistíme, že

$$\frac{V (mc^2)^4}{8\pi^2\hbar^3} \int_1^{\frac{\varepsilon_F}{mc^2}} dt (t^2 - 1)^{\frac{1}{2}} t^2 = \frac{V (mc^2)^4}{8\pi^2\hbar^3} t (t^2 - 1) \sqrt{t^2 - 1} - \ln \left( t + \sqrt{t^2 - 1} \right) \Big|_{t=1}^{t=\frac{\varepsilon_F}{mc^2}}.$$

Výsledek tedy dostaneme ve tvaru

$$U = \frac{V (mc^2)^4}{8\pi^2\hbar^3} \left[ \frac{\varepsilon_F}{mc^2} \left( 2 \frac{\varepsilon_F^2}{(mc^2)^2} - 1 \right) \sqrt{\frac{\varepsilon_F^2}{(mc^2)^2} - 1} - \ln \left( \frac{\varepsilon_F}{mc^2} + \sqrt{\frac{\varepsilon_F^2}{(mc^2)^2} - 1} \right) \right].$$

(e) Termodynamický potenciál  $\Omega$  analogicky jako předchozí případ. Počítáme integrál

$$\Omega = -\frac{V (mc^2)^4}{3\pi^2\hbar^3} \int_1^{\frac{\varepsilon_F}{mc^2}} dt (t^2 - 1)^{\frac{3}{2}}.$$

Integrujeme stejně jako v předchozí části a dostaneme

$$\Omega = -\frac{V (mc^2)^4}{8\pi^2\hbar^3} \left[ \frac{\varepsilon_F}{mc^2} \left( \frac{2}{3} \frac{\varepsilon_F^2}{(mc^2)^2} - 1 \right) \sqrt{\frac{\varepsilon_F^2}{(mc^2)^2} - 1} + \ln \left( \frac{\varepsilon_F}{mc^2} + \sqrt{\frac{\varepsilon_F^2}{(mc^2)^2} - 1} \right) \right].$$

(f) Nejprve přepíšeme výše odvozené výrazy pro případ ultrarelativistického plynu. Počet částic

$$N = \frac{V (mc^2)^3}{3\pi^2\hbar^3} \left( \frac{\varepsilon_F}{mc^2} \right)^3,$$

termodynamický potenciál

$$\Omega = -\frac{V (mc^2)^4}{12\pi^2\hbar^3} \left( \frac{\varepsilon_F}{mc^2} \right)^4,$$

a vnitřní energie

$$U = \frac{V (mc^2)^4}{4\pi^2 \hbar^3} \left( \frac{\epsilon_F}{mc^2} \right)^4.$$

Jelikož platí  $\Omega = -PV$ , zjistíme, že

$$P = \frac{(mc^2)^4}{12\pi^2 \hbar^3} \left( \frac{\epsilon_F}{mc^2} \right)^4,$$

tento výraz vyjádříme pomocí počtu částic

$$P = \frac{3^{\frac{1}{3}}}{4} \left( \frac{N}{V} \right)^{\frac{4}{3}} \pi^{\frac{2}{3}} \hbar.$$

Odtud vyplývá, že  $P \propto \rho^{\frac{4}{3}}$ .

### 34. Fluktuace

Spočítejte fluktuaci počtu částic pro případ grandkanonického rozdělení ( $\Delta N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$ ). Aplikujte na případ nerelativistického fermionového a bosonového plynu.

**Řešení:** Vyjdeme z definice  $\langle N \rangle$ , tento výraz pak upravíme

$$\langle N \rangle = \sum_{n,N} N w_{n,N} = \sum_{n,N} N \frac{\exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right)}{\Xi}$$

Využijme nyní faktu, že derivace exponenciály podle chemického potenciálu je rovna

$$\frac{\partial \exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right)}{\partial \mu} = \frac{N}{k_B T} \exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right).$$

Potom

$$\sum_{n,N} N \frac{\exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right)}{\Xi} = \frac{k_B T}{\Xi} \sum_{n,N} \frac{\partial}{\partial \mu} \exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right),$$

derivaci můžeme přesunout před sumu,

$$\frac{k_B T}{\Xi} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n,N} \exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right) = \frac{k_B T}{\Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mu}.$$

Analogicky budeme postupovat pro  $\langle N^2 \rangle$

$$\langle N^2 \rangle = \sum_{n,N} N^2 w_{n,N} = \sum_{n,N} N^2 \frac{\exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right)}{\Xi}.$$

Potom

$$\sum_{n,N} N^2 \frac{\exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right)}{\Xi} = \frac{k_B T}{\Xi} \sum_{n,N} N \frac{\partial}{\partial \mu} \exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right),$$

derivaci můžeme přesunout před sumu, v sumě výraz navíc rozšíříme  $\Xi$

$$\frac{k_B T}{\Xi} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n,N} N \exp\left(-\frac{E_{n,N} - \mu N}{k_B T}\right) \frac{\Xi}{\Xi} = \frac{k_B T}{\Xi} \frac{\partial}{\partial \mu} (\langle N \rangle \Xi) = \frac{k_B T}{\Xi} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \Xi + \frac{k_B T}{\Xi} \langle N \rangle \frac{\partial \Xi}{\partial \mu}.$$

Jelikož máme vyjádřený výraz pro  $\langle N \rangle$ , můžeme tento vzorec přepsat jako

$$k_B T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} + \frac{k_B T}{\Xi} \langle N \rangle \frac{\partial \Xi}{\partial \mu} = k_B T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} + \langle N \rangle^2.$$

Odtud snadno zjistíme, že

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = k_B T \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}.$$

Nyní aplikujeme případ bosonů: střední počet částic je roven

$$\langle N \rangle = \frac{gV}{\lambda_T^3} B_{\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right),$$

potom

$$(\Delta N)^2 = \frac{gV}{\lambda_T^3} B_{\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right).$$

Také můžeme napsat

$$\frac{(\Delta N)^2}{N^2} = \frac{1}{N} \frac{B_{\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)}{B_{\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)}.$$

Pro fermiony platí stejné vzorce až na znaménko, tj. nejsou popsány funkcí  $B$ , ale  $F$ . Napíšeme proto rovnou výsledek

$$\frac{(\Delta N)^2}{N^2} = \frac{1}{N} \frac{F_{\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)}{F_{\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{k_B T} \right)}.$$

### 35. Viriálový teorém

Odvoďte viriálový teorém pomocí klasické mechaniky.

**Řešení:** V případě pohybů v centrálním silovém poli můžeme odvodit jeden důležitý teorém – o viriálu. Uvažme veličinu

$$G = \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i,$$

kde sčítáme přes všechny částice daného systému. Totální derivace této veličiny je rovna

$$\frac{dG}{dt} = \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \mathbf{p}_i + \sum_i \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \mathbf{r}_i. \quad (90)$$

První člen na pravé straně můžeme upravit

$$\sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \mathbf{p}_i = \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i = \sum_i m_i v_i^2 = 2T.$$

Druhý člen upravíme jako

$$\sum_i \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \mathbf{r}_i = \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i.$$

Rovnice (90) se poté změní na tvar

$$\frac{d}{dt} \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i = 2T + \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i. \quad (91)$$

Spočítáme střední hodnotu z dané rovnice, a to tak, že obě strany integrujeme v mezích od 0 do  $\tau$  a vydělíme  $\tau$

$$\frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \frac{dG}{dt} \equiv \frac{d\langle G \rangle}{dt} = 2\langle T \rangle + \left\langle \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \right\rangle.$$

Levou stranu můžeme případně napsat ve tvaru

$$\frac{1}{\tau} [G(\tau) - G(0)] = 2\langle T \rangle + \left\langle \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \right\rangle. \quad (92)$$

Pokud je pohyb periodický, nebo máme-li prostorově omezený systém (takže i funkce  $G$  je shora omezená), můžeme v tomto případě pro velká  $\tau$  položit levou stranu rovnu nule, potom dostáváme

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \right\rangle. \quad (93)$$

Člen na pravé straně můžeme ještě rozepsat. Síla působící na jednu částici je dána vzájemnou interakcí částic a vnějšími silami – tlakem

$$-\frac{1}{2} \left\langle \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \right\rangle = -\frac{1}{2} \left( - \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \Pi \right\rangle - P \left\langle \oint_S d\mathbf{A} \cdot \mathbf{r} \right\rangle \right).$$

*Odbočka: Eulerova věta o homogenních funkcích*

Mějme homogenní funkci  $N$  proměnných stupně  $k$ , tzn. platí

$$f(tx_1, tx_2, \dots, tx_N) = t^k f(x_1, x_2, \dots, x_N).$$

Eulerova věta říká, že součet současnů parciálních derivací homogenní funkce s odpovídajícími proměnnými je roven dané funkci násobené stupněm homogenity

$$\sum_{n=1}^N x_n \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial x_n} = k f(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (94)$$

*Konec odbočky.*

Nechť je potenciální energie  $\Pi$  homogenní funkcí souřadnic stupně  $n$ . Potom máme

$$-\frac{1}{2} \left( - \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \nabla \Pi \right\rangle - P \left\langle \oint_S d\mathbf{A} \cdot \mathbf{r} \right\rangle \right) = \frac{1}{2} (n \langle \Pi \rangle - 3PV).$$

Tento výsledek dosadíme za pravou stranu rovnice (93), viriálový teorém pak dostaneme ve tvaru

$$2 \langle T \rangle - n \langle \Pi \rangle - 3PV = 0. \quad (95)$$

### 36. Aplikace viriálového teorému

Odvoďte stavovou rovnici ideálního plynu pomocí viriálového teorému.

**Řešení:** Střední hodnota kinetické energie je podle ekvipartičního teorému rovna

$$\langle T \rangle = \frac{3}{2} k_B T.$$

Nyní je otázkou, jak vyjádřit člen na pravé straně rovnice (93). Z definice ideálního plynu je zřejmé, že vzájemná interakce částic plynu je velmi vzácná oproti interakci částic se stěnami nádoby. Tyto síly vždy hrají roli při interakci částic plynu se stěnami nádoby a vyskytují se právě v celé ploše stěn. Potom sumaci můžeme nahradit integrálem přes plochu stěn nádoby. Diferenciál síly můžeme napsat ve tvaru

$$d\mathbf{F}_i = -P n d\mathbf{A},$$

nebo

$$\frac{1}{2} \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i = -\frac{P}{2} \int d\mathbf{A} \cdot \mathbf{r},$$

kde  $P$  je tlak vyvolaný tokem částic,  $\mathbf{n}$  normálový vektor a  $d\mathbf{A}$  element plochy stěny nádoby. Pomocí Gaussovy věty můžeme integrál přepsat ve tvaru

$$\int d\mathbf{A} \cdot \mathbf{r} = \int dV \nabla \cdot \mathbf{r} = 3V.$$

Výraz pro kinetickou energii a pro potenciál dosadíme zpět do (93)

$$\frac{3}{2} N k_B T = \frac{3}{2} PV, \quad (96)$$

odkud již snadno obdržíme

$$N k_B T = PV, \quad (97)$$

což je hledaná stavová rovnice ideálního plynu. Stejný výsledek dostaneme z (95).

### 37. Aplikace viriálového teoremu II

Systém obsahuje  $N$  velmi slabě interagujících částic a jeho teplota je dostatečně velká nato, abychom mohli použít k popisu klasickou statistiku. Každá částice má hmotnost  $m$  a osciluje v daném směru kolem své rovnovážné polohy. Spočítejte tepelnou kapacitu systému za teploty  $T$  v následujících případech

- (a) Vratná síla je přímo úměrná vychýlení  $x$  z rovnovážné polohy.
- (b) Vratná síla je úměrná  $x^3$ .

Úlohy můžete počítat bez explicitního vyjádření příslušných integrálů. určete pomocí viriálového teoremu stavovou rovnici plynu.

**Řešení:** V obou případech využijeme vzorec (95), avšak bez plošných sil, tj.  $P = 0$ . Potom pro jednotlivé případy napíšeme řešení.

- (a) Síla je úměrná  $r$ . Potenciál je proto úměrný  $\Pi \propto r^2$ . Jedná se tedy o homogenní funkci druhého řádu. Viriálový teorem můžeme zapsat ve tvaru

$$2 \langle T \rangle - 2 \langle \Pi \rangle = 0,$$

proto

$$\langle T \rangle = \langle \Pi \rangle.$$

Tento výsledek dosadíme do rovnice pro zákon zachování energie  $U = \langle T \rangle + \langle \Pi \rangle$

$$U = 2 \langle T \rangle = 3Nk_B T,$$

odkud

$$U = 3Nk_B T.$$

- (b) V tomto případě  $\Pi \propto r^4$ , máme tedy

$$2 \langle T \rangle - 4 \langle \Pi \rangle = 0,$$

odkud dostaneme

$$U = \frac{9}{4} Nk_B T.$$

### 38. Kmity krystalové mříže

Spočítejte tepelnou kapacitu krystalové mříže pro

- (a) Debyeův model,
- (b) Einsteinův model

krystalu.

**Řešení:** Potřebujeme spočítat vnitřní energii kmitů, která je zřejmě rovna

$$u = \frac{1}{V} \frac{\sum_i E_i \exp(-\beta E_i)}{\sum_i \exp(-\beta E_i)}. \quad (98)$$

Uvažme  $N$ -iontový harmonický krystal, což lze uvažovat jako  $3N$  nezávislých oscilátorů. Příspěvek k celkové energii příslušného normálního módu s kruhovou frekvencí  $\omega_s(\mathbf{k})$  může mít pouze diskrétní množinu hodnot

$$E_n = \left( n_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_s(\mathbf{k}), \quad (99)$$

kde  $n_{\mathbf{k}s} \in 0, 1, 2, \dots$ . Celková energie je rovna je součet energií individuálních kmitových módů

$$E = \sum_{\mathbf{k}s} \left( n_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_s(\mathbf{k}).$$

Definujeme funkci  $f$  ve tvaru

$$f = \frac{1}{V} \ln \left( \sum_i \exp(-\beta E_i) \right).$$

Snadno si ověříme, že platí

$$u = -\frac{\partial f}{\partial \beta}.$$

Dosadíme nyní za  $E_n$ , dostaneme

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{V} \ln \left\{ \sum_{n_{\mathbf{k}_s}} \exp \left[ -\beta \sum_{\mathbf{k}_s} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \left( n_{\mathbf{k}_s} + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} = \frac{1}{V} \ln \left\{ \prod_{\mathbf{k}_s} \sum_{n_{\mathbf{k}_s}} \exp \left[ -\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \left( n_{\mathbf{k}_s} + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{V} \ln \left\{ \prod_{\mathbf{k}_s} \frac{\exp \left[ -\frac{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})}{2} \right]}{1 - \exp \left[ -\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \right]} \right\} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \left\{ \left[ -\frac{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})}{2} \right] - \ln [1 - \exp(-\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k}))] \right\}. \end{aligned}$$

Vnitřní energii pak určíme podle vzorce uvedeného výše, tedy

$$u = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \left[ -\frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{2} - \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k}) \exp(-\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k}))}{1 - \exp(-\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k}))} \right] = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})) - 1} \right].$$

Poslední výraz můžeme přepsat jako

$$u = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \left( n_{\mathbf{k}_s} + \frac{1}{2} \right), \quad (100)$$

kde zřejmě platí

$$n_{\mathbf{k}_s} = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})) - 1}.$$

Srováme-li tuto rovnici s (99), můžeme odvodit, že  $n_{\mathbf{k}_s}$  představuje excitační číslo normálního módu  $\mathbf{k}_s$  při teplotě  $T$ . Klasická energie krystalové mříže pak musí být zobecněna na tvar

$$u = u^{\text{eq}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \frac{1}{2} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{\exp(\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})) - 1}.$$

Tepelná kapacita je potom rovna

$$c_V = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{\exp(\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})) - 1}. \quad (101)$$

(a) Při Debyeově aproximaci předpokládáme, že

$$\omega_s(\mathbf{k}) = c_s(\mathbf{k}^0)k.$$

Sumu v (101) můžeme nahradit integrálem (může být přes první Brillouinovu zónu)

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{\exp(\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})) - 1}.$$

Tento integrál nahradíme integrálem přes sféru s poloměrem  $k_D$  zvolený tak, aby obsahoval přesně  $N$  vlnových povolených vektorů, kde  $N$  je počet iontů v krystalu. Objem  $k$ -prostoru připadající na jeden vlnový vektor je  $(2\pi)^3/V$ , což vyžaduje objem  $k$ -prostoru  $(2\pi)^3 N/V$  pro vyplnění objemu  $4\pi k_D^3/3$ , takže  $k_D$  je spočítáno rovnicí

$$n = \frac{k_D^3}{6\pi^2}.$$

Dosadíme předpokládané podmínky

$$c_V = \sum_s \frac{\partial}{\partial T} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c_s k}{\exp(\beta \hbar c_s k) - 1} = \sum_s \frac{\partial}{\partial T} \int_0^{2\pi} d\Omega \int_0^{k_D} \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c_s k^3}{\exp(\beta \hbar c_s k) - 1}$$

provedeme substituci

$$x = \frac{\hbar c_s k}{k_B T},$$

dostaneme

$$\sum_s \frac{\partial}{\partial T} \int_0^{2\pi} d\Omega \int_0^{k_D} \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c_s k^3}{\exp(\beta \hbar c_s k) - 1} = \frac{1}{8\pi^3} \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \sum_s \int d\Omega \frac{1}{c_s^3(\Omega)} \int_0^{\frac{\hbar c_s k_D}{k_B T}} dx \frac{x^4 \exp(x)}{(\exp(x) - 1)^2}.$$

Označme nyní

$$\frac{1}{c^3} = \frac{1}{4\pi} \sum_s \int d\Omega \frac{1}{c_s^3} \quad (102)$$

a pro  $k_D$  navíc platí

$$\omega_D = k_D c,$$

pro Debyeovu teplotu  $\Theta_D$

$$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D = \hbar c k_D.$$

Po dosazení nakonec dostaneme

$$c_V = 9nk_B \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} dx \frac{x^4 \exp(x)}{(\exp(x) - 1)^2}. \quad (103)$$

Máme tedy vzorec, který závisí na parametru  $\Theta_D$ . Debyeovu teplotu určíme pomocí nízkoteplotní limity. Tepelná kapacita za nízkých teplot je rovna

$$c_V = \frac{2\pi^2}{5} k_B \left( \frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3,$$

kam dosadíme vzorec pro Debyeovu teplotu

$$k_B \Theta_D = \hbar c k_D = \hbar c \sqrt{6\pi^2 n},$$

po dosazení do výrazu pro tepelnou kapacitu za  $\hbar c/k_B$

$$c_V = \frac{12\pi^4}{5} nk_B \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3.$$

(b) Einsteinův model je vhodnější pro optickou větev a předpokládá, že

$$\omega_s(\mathbf{k}) = \omega_E.$$

Tepelnou kapacitu určíme opět z (101), kam dosadíme patřičnou disperzní relaci

$$c_V = \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{V} \hbar \omega_E N \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}\right) - 1} = nk_B \left( \frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}\right)}{\left[ \exp\left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}\right) - 1 \right]^2}.$$

### 39. Volná částice I

Spočítejte střední hodnotu souřadnice pro případ jednorozměrného pohybu volné částice uzavřené v oblasti  $x \in [0, L]$ , operátor hustoty v souřadnicové reprezentaci je ve tvaru

$$\rho(x, x', \beta) = \frac{1}{L} \exp\left(-\frac{\pi(x-x')^2}{\lambda_T^2}\right). \quad (104)$$

**Řešení:** střední hodnotu spočítáme ze vzorce

$$\langle \hat{x} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{x}).$$



Stopu můžeme přepsat

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{x}) = \int_0^L dx' \langle x' | \hat{\rho}\hat{x} | x' \rangle = \int_0^L dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle x' | \hat{\rho} | x \rangle \langle x | \hat{x} | x' \rangle,$$

První maticový prvek v integrálu je operátor hustoty, druhý maticový prvek je

$$\langle x | \hat{x} | x' \rangle = x \langle x | x' \rangle = x \delta(x - x').$$

Potom dostaneme

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^L dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{L} \exp\left(-\frac{\pi(x-x')^2}{\lambda_T^2}\right) x \delta(x-x') = \frac{1}{L} \int_0^L dx' x' = \frac{L}{2}.$$

#### 40. Volná částice II

Spočítejte maticové elementy operátoru hustoty volné částice v impulsové reprezentaci.

**Řešení:** Operátor hustoty je dán

$$\hat{\rho} = \frac{\exp(-\beta\hat{H})}{\text{Tr}(-\beta\hat{H})}. \quad (105)$$

Spočítejme proto nejprve partiční sumu. Hamiltonián volné částice je zřejmě roven  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$ :

$$Z(T, V, 1) = \text{Tr} \exp(-\beta\hat{H}) = \sum_{\mathbf{p}} \langle \phi_{\mathbf{p}} | \exp(-\beta\hat{H}) | \phi_{\mathbf{p}} \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \exp\left(-\frac{\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right).$$

Jelikož vlastní hodnoty  $\mathbf{p}$  leží velmi blízko sebe ve velkém objemu, můžeme přejít od sumace k integraci

$$Z(T, V, 1) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \exp\left(-\frac{\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right) = \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{V}{\lambda^3}.$$

Nyní můžeme napsat maticové elementy operátoru hustoty ve tvaru

$$\langle \phi_{\mathbf{p}'} | \hat{\rho} | \phi_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{\lambda^3}{V} \exp\left(\frac{-\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}.$$

#### 41. Volná částice III

Spočítejte střední hodnotu Hamiltoniánu volné částice přímým výpočtem v impulsové reprezentaci jako

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathcal{H}}). \quad (106)$$

**Řešení:** Stopu si rozepíšeme jako

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathcal{H}}) = \sum_{\mathbf{p}} \langle \mathbf{p} | \hat{\rho}\hat{\mathcal{H}} | \mathbf{p} \rangle = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \langle \mathbf{p} | \hat{\rho} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{\mathcal{H}} | \mathbf{p} \rangle = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left[ \frac{\lambda^3}{V} \exp\left(\frac{-\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \right] \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \right).$$

Opět přejdeme od sumace k integraci a integrál přepíšeme do sférických souřadnic

$$\frac{1}{2m} \frac{\lambda^3}{V} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p}^2 \exp\left(\frac{-\beta\mathbf{p}^2}{2m}\right) = \frac{1}{2m} \lambda^3 \frac{2\hbar^2}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dk k^4 \exp\left(\frac{-\beta p^2}{2m}\right).$$

Provedeme klasickou substituci a dostaneme

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2 \lambda^3}{m} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{5}{2}} \int_0^{\infty} dx x^{\frac{3}{2}} \exp(-x).$$

Snadno zjistíme, že

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{3}{2} k_B T.$$

#### 42. Volná částice IV

Spočítejte střední hodnotu hamiltoniánu volné částice ze znalosti partiční funkce (v rámci kvantové fyziky),

$$Z = \frac{V}{\lambda_T^3}. \quad (107)$$

**Řešení:** Střední hodnota Hamiltoniánu je rovna

$$\langle H \rangle = \frac{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}) \hat{H}]}{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H})]} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln [\text{Tr} (\exp(-\beta \hat{H}))] = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z),$$

nyň můžeme dosadit za  $Z$

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) = 3 \frac{\partial}{\partial \beta} \lambda_T = 3 \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} (\ln \beta) = \frac{3}{2} \frac{1}{\beta} = \frac{3}{2} k_B T.$$

#### 43. Dva fermiony

Spočítejte elementy maticové reprezentace operátoru hustoty a partiční funkci pro dva neinteragující fermiony.

**Řešení:** Vlnová funkce popisující tento systém musí být antisymetrická vzhledem k záměně částic, proto máme

$$|p_1, p_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|p_1, p_2\rangle - |p_2, p_1\rangle).$$

Operátor hustoty pak spočítáme podle (105), tedy

$$\begin{aligned} \langle p'_1, p'_2 | \hat{\rho} | p_1, p_2 \rangle &= \frac{1}{2Z} (\langle p'_1, p'_2 | - \langle p'_2, p'_1 |) \exp\left(-\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2}{2mk_B T}\right) (|p_1, p_2\rangle - |p_2, p_1\rangle) \\ &= \frac{1}{2Z} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) (\langle p'_1, p'_2 | p_1, p_2\rangle - \langle p'_1, p'_2 | p_2, p_1\rangle - \langle p'_2, p'_1 | p_1, p_2\rangle + \langle p'_2, p'_1 | p_2, p_1\rangle) \\ &= \frac{1}{2Z} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) [\delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_2) - \delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_2) \delta(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_1) - \\ &\quad \delta(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_2) + \delta(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_2) \delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1)] \\ &= \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) [\delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_2) - \delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_2) \delta(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_1)]. \end{aligned}$$

Nyní ještě spočítáme partiční funkci, která je ve tvaru

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H})] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} (\langle p_1, p_2 | - \langle p_2, p_1 |) \exp\left(-\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2}{2mk_B T}\right) (|p_1, p_2\rangle - |p_2, p_1\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) (2 - 2 \langle p_1, p_2 | p_2, p_1 \rangle) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) [2 - 2\delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2mk_B T}\right) \end{aligned}$$

Opět můžeme přejít od sumace k integraci, dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{V^2}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \exp\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2mk_B T}\right) - \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \exp\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2mk_B T}\right) \\ = \frac{1}{2} \frac{V^2}{(2\pi\hbar)^6} (2\pi mk_B T)^3 - \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}, \quad (108) \end{aligned}$$

což můžeme přepsat pomocí

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}},$$

obdržíme

$$Z = \frac{1}{2} \frac{V^2}{\lambda^6} \left( 1 - \frac{1}{2^{\frac{3}{2}}} \frac{\lambda^3}{V} \right).$$

#### 44. Bílý trpaslík

Uvažujte hvězdu složenou z elektronově degenerované látky.

- Je-li  $N$  počet nukleonů, jaký je počet elektronů? (hvězda je složena z  $^{12}\text{C}$  a  $^{16}\text{O}$ .)
- Spočítejte energii připadající na jeden elektron za předpokladu, že plyn je
  - relativistický,
  - nerelativistický.
- Spočítejte energii připadající na jeden nukleon.
- Najděte minimum energie jako funkce poloměru hvězdy, ukažte, že v extrémně relativistickém případě nastane minimum pro  $R \rightarrow 0$ .
- Nalezněte limitní hmotnost pro extrémně relativistický případ, pro kterou je celková energie nulová.

#### Řešení:

- Uhlík má šest elektronů a dvanáct nukleonů. Kyslík osm elektronů a šestnáct nukleonů. Počet elektronů je tedy v obou případech poloviční vzhledem k počtu nukleonů.
- Pro případ nerelativistického plynu máme (viz příklad 33)

$$E = \frac{p_F^5}{10m_e\pi^2\hbar^3}, \quad N = \frac{Vp_F^3}{3\pi^2\hbar^3}.$$

potom podílem těchto dvou hodnot dostaneme

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{10m_e} \left( \frac{N}{V} 3\pi^2\hbar^3 \right),$$

dosadíme objem koule a dostaneme

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{10m_e} \left( \frac{9}{4}\pi\hbar^3 \right)^{\frac{2}{3}} \frac{N_e^{\frac{2}{3}}}{R^2}.$$

Pro ultrarelativistický případ máme

$$E = \frac{V(mc^2)^4}{4\pi^2\hbar^3} \left( \frac{\epsilon_F}{mc^2} \right)^4.$$

$$N = \frac{V(mc^2)^3}{3\pi^2\hbar^3} \left( \frac{\epsilon_F}{mc^2} \right)^3.$$

Energii připadající na jednu částici zjistíme stejně jako v předchozím případě

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{4}m_e c^2 = \frac{3}{4}m_e c^2 \left( \frac{N_e}{V} 3\pi^2 \frac{\hbar^3}{(m_e c^2)^3} \right)^{\frac{1}{3}} = \frac{3}{4}m_e c^2 \left( \frac{9}{4}\pi \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar}{m_e c^2} \frac{N_e^{\frac{1}{3}}}{R}.$$

- Gravitační potenciální energie je rovna

$$E_G = -\frac{Gm^2}{R}.$$

Hmotnost je rovna

$$m = Nu,$$

potom máme

$$\frac{E_G}{N} = -\frac{GNu^2}{R}.$$

(d) Celková energie je rovna součtu kinetické a potenciální energie.

$$\frac{E}{N_e} = \frac{E_k}{N_e} + \frac{E_G}{N_e} = \frac{3}{10m_e} \left( \frac{9}{4} \pi \hbar^3 \right)^{\frac{2}{3}} \frac{N_e^{\frac{2}{3}}}{R^2} - \frac{4GN_e u^2}{R}.$$

extrém najdeme zřejmě pokud derivace energie podle poloměru je rovna nule

$$\frac{dE}{dR} = 0 = \frac{3}{5m_e} \left( \frac{9}{4} \pi \hbar^3 \right)^{\frac{2}{3}} \frac{N_e^{\frac{2}{3}}}{R^3} - \frac{4GN_e u^2}{R^2},$$

odkud

$$R = \frac{3\hbar^2}{20m_e G u^2} \left( \frac{9}{4} \pi \right)^{\frac{2}{3}} N_e^{-\frac{1}{3}},$$

je zřejmé, že

$$R \sim N^{-\frac{1}{3}}.$$

V extrémně relativistickém případě je energie rovna

$$\frac{E}{N_e} = \frac{E_k}{N_e} + \frac{E_G}{N_e} = \frac{3}{4} m_e c^2 = \frac{3}{4} m_e c^2 \left( \frac{N_e}{V} 3\pi^2 \frac{\hbar^3}{(m_e c^2)^3} \right)^{\frac{1}{3}} - \frac{4GN_e u^2}{R}.$$

Nyní je zřejmé, že derivace energie podle poloměru je úměrná  $R^{-2}$  a minimum energie nastává pro  $R \rightarrow 0$ , kdy  $E \rightarrow -\infty$ .

(e) Pokud  $N_e > N_{Cr}$  a  $E = 0$ , dostaneme ze vztahu uvedeného výše

$$N_{cr} = \left( \frac{3hc}{16G} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{3}{2} \sqrt{\pi} \frac{1}{u^3},$$

a kritická hmotnost

$$m_{cr} = 2N_{cr}u = \left( \frac{3hc}{16G} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{3\sqrt{\pi}}{u^2}.$$

#### 45. Hledání rovnice pro chemický potenciál

Najděte rovnici pro chemický potenciál v případě látky v symetrickém gravitačním poli. Předpokládejte, že

$$\mu + ku\varphi = \mu' + mc^2 + ku\varphi = \text{konst.},$$

kde  $k$  je počet nukleonů na jeden elektron a  $u$  je hmotnost nukleonu. Rovnici zdůvodněte. Zanedbejte vliv tlaku nedegenerované látky a hmotnosti elektronů.

**Řešení:** Ze zadání víme, že

$$\varphi = \frac{\text{konst.}}{ku} - \frac{\mu}{ku},$$

příp.

$$\varphi = \frac{\text{konst.}}{ku} - \frac{\mu'}{ku} - \frac{mc^2}{ku}.$$

Rovnice je pro sféricky symetrický případ ve tvaru

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = 4\pi G \rho.$$

Za  $\varphi$  dosadíme předchozí rovnici ze ZZE. Jediná veličina závislá na poloměru je chemický potenciál. Po dosazení a vynásobení  $ku$  dostaneme

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu}{\partial r} \right) = -4\pi G k^2 u^2 n.$$

Stejnou rovnici dostaneme po dosazení rovnice s  $\mu'$ .

46. **Rovnice pro chemický potenciál v integrálním tvaru**

Zintegrujte rovnici pro chemický potenciál za předpokladu, že

$$\left. \frac{d\mu}{dr} \right|_{r=0} = 0,$$

kde  $R$  je poloměr hvězdy. Výsledek vyjádřete pomocí celkové hmotnosti hvězdy.

**Řešení:** vyjdeme ze spočítané rovnice z předchozího příkladu, kterou vynásobíme  $r^2$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu}{\partial r} \right) = -4\pi Gk^2 u^2 nr^2.$$

Zintegrujeme

$$\int_0^R dr \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu}{\partial r} \right) = - \int_0^R dr 4\pi Gk^2 u^2 nr^2.$$

Levá strana je úplná derivace (v tomto případě skutečně ano) a dostaneme

$$\int_0^R dr \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu}{\partial r} \right) = r^2 \left. \frac{\partial \mu}{\partial r} \right|_{r=R} - r^2 \left. \frac{\partial \mu}{\partial r} \right|_{r=0} = r^2 \left. \frac{\partial \mu}{\partial r} \right|_{r=R}.$$

Pravá strana

$$- \int_0^R dr 4\pi Gk^2 u^2 nr^2 = -4\pi Gku \int_0^R dr kunr^2 = -4\pi GkunM.$$

Dostáváme potom

$$r^2 \left. \frac{\partial \mu}{\partial r} \right|_{r=R} = -4\pi GkunM.$$

47. **Přeskálování rovnice pro chemický potenciál**

Přepište rovnici pro chemický potenciál do bezrozměrných proměnných

$$\xi = \frac{r}{R}, \mu(r) = \frac{1}{\sqrt{\lambda R}} f(\xi),$$

kde

$$\lambda = \frac{4k^2}{3\pi} \frac{6u^2}{(\hbar c)^3},$$

a určete okrajové podmínky.

**Řešení:** Koncentrace je rovna

$$n = \frac{\mu^3}{(\hbar c)^3 3\pi^2},$$

Dosadíme

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu}{\partial r} \right) = - \frac{4\pi Gk^2 u^2 \mu^3}{(\hbar c)^3 3\pi^3} = -\lambda \mu^3,$$

po jednoduchých úpravách

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) = -f^3.$$

48. **Rovnice kontinuity**

Odvoďte rovnici kontinuity z Boltzmanovy kinetické rovnice. Předpokládejte, že síla nezávisí na hybnosti.

**Řešení:** BKR je ve tvaru

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll.}}$$

Rovnici nyní zintegrujeme přes hybnosti

$$m \int_{\Gamma} d\mathbf{p} \frac{\partial f}{\partial t} + m \int_{\Gamma} d\mathbf{p} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \int_{\Gamma} d\mathbf{p} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = m \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Gamma} d\mathbf{p} f + m \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int_{\Gamma} d\mathbf{p} \mathbf{v} f + m \mathbf{F} \int_{\Gamma} d\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{p}} f.$$

Třetí člen upravíme pomocí Stokesova teorému

$$\int_{\Gamma} d\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{p}} f = \int_{\partial\Gamma} d\mathbf{S}_{\mathbf{p}} f = 0,$$

za předpokladu, že  $f$  konverguje k nule dostatečně rychle, tj. rychleji než  $p^2$ . Dále víme, že

$$f(\mathbf{r}, t) = m \cdot n(\mathbf{r}, t) = m \int_{\Gamma} d\mathbf{p} \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Střední rychlost je definována vztahem

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{v} \rangle = \frac{\int_{\Gamma} d\mathbf{p} \mathbf{v} f}{\int_{\Gamma} d\mathbf{p} f} = \frac{\int_{\Gamma} d\mathbf{p} \mathbf{v} f}{(2\pi\hbar)^3 m n(\mathbf{r}, t)}.$$

Dosadíme do spočítané rovnice a dostaneme

$$m \frac{\partial n}{\partial t} + m \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (n \mathbf{u}) = 0.$$

Nebo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0.$$

#### 49. Tok tepla

Pomocí Boltzmanovy kinetické rovnice spočítejte tok tepla v přítomnosti konstantního gradientu teploty

$$\alpha = -\frac{dT}{dy}, T = T_0 - \alpha y. \quad (109)$$

**Řešení:** musí platit hydrostatická rovnováha

$$p = n_0 k_B T_0 = n k_B (T_0 - \alpha y),$$

odtud

$$n = n_0 \frac{T_0}{T_0 - \alpha y}.$$

BKR

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}},$$

kde předpokládáme stacionární stav. První člen na levé straně je proto roven nule. Dále předpokládáme  $\mathbf{F} = \mathbf{0}$  a

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{f - f_0}{\tau},$$

kde  $f_0$  je rovnovážná rozdělovací funkce, kterou předpokládáme ve tvaru

$$f_0 = n \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) = n_0 \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{T_0}{(T_0 - \alpha y)^{\frac{5}{2}}} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B (T_0 - \alpha y)}\right).$$

BKR se zjednoduší na

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f = \frac{f - f_0}{\tau},$$

kde předpokládáme, že gradient z funkce  $f$  je přibližně roven gradientu z  $f_0$ . Potom pro  $f$  dostaneme

$$f = f_0 - \tau \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_0 = f_0 - \tau v_y \frac{\partial f_0}{\partial y}.$$

Dosadíme do výrazu pro distribuční funkci

$$f = f_0 + \alpha \tau v_y \frac{T_0}{2(T_0 - \alpha y)^{\frac{7}{2}}} \left[ \frac{p^2}{m k_B (T_0 - \alpha y)} - 5 \right] n_0 \left( \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{p^2}{2m k_B (T_0 - \alpha y)}\right).$$

Nyní se můžeme zaměřit na výpočet samotného toku tepla. Ten je roven

$$q_y = \int \frac{d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} \frac{p^2}{2m} v_y f.$$

Integrace  $f_0$  je nulová, jelikož je  $f_0$  sudá funkce. Vezměme nyní lineární přiblížení  $T_0 - \alpha y \approx T_0$ , potom je tok tepla roven

$$q_y = \frac{\alpha \tau}{2T_0} \frac{1}{2m} n_0 \left( \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \int \frac{d^3 p}{(2\pi \hbar)^3} p^2 v_y \left( \frac{p^2}{m k_B T_0} - 5 \right) \exp\left(-\frac{p^2}{2m k_B T_0}\right).$$

Zavedeme sférické souřadnice, jejichž severní pól leží ve směru osy  $y$ , tj.  $v_y = v \cos(\theta)$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m^2} \frac{1}{(2\pi \hbar)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dp \left( \frac{p^2}{m k_B T_0} - 5 \right) p^6 \cos^2 \theta \sin \theta \exp\left(-\frac{p^2}{2m k_B T_0}\right) \\ &= \frac{1}{m^2} \frac{1}{(2\pi \hbar)^3} \cdot 2\pi \cdot \left[ -\frac{1}{3} \cos^3 \theta \right]_0^\pi \cdot \left[ \frac{1}{m k_B T_0} \frac{1}{2} (2m k_B T_0)^{\frac{9}{2}} \int_0^\infty dt t^{\frac{7}{2}} \exp(-t) - \frac{5}{2} (2m k_B T_0)^{\frac{7}{2}} \int_0^\infty dt t^{\frac{5}{2}} \exp(-t) \right] \\ &= \frac{5}{2} \alpha \frac{n_0 k_B^2 T_0 \beta}{m}. \end{aligned}$$

Pro tok tepla nakonec vyplývá, že

$$q = -\kappa \frac{dT}{dr} = \kappa \alpha,$$

kde

$$\kappa = \frac{5}{2} \frac{n_0 k_B^2 T_0 \beta}{m}.$$