6. domácí úkol

1) Energie molekulového plynu

$$\hbar\omega \gg \frac{\hbar^2}{2I} \gg \alpha$$

– vibrační + rotační + vazba vibrační rotační

$$E_{n,l} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2I}\, l(l+1) + \alpha \cdot l(l+1)\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

spočítejte energii ideálního plynu, jehož teplota leží v intervalu

– u rotačních je počet degenerací $2l+1$ $\qquad \hbar\omega \gg T \gg \frac{\hbar^2}{2I}$

$$Z = \sum_{n,l} g_l\, e^{-\frac{E_{n,l}}{kT}} = \sum_{n,l} (2l+1)\, e^{-\frac{1}{kT}\left[\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) + \alpha l(l+1)\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]} =$$

$$\approx \left| \begin{array}{l} \text{když } T \gg \frac{\hbar^2}{2I} \gg \alpha \\ \text{tak můžem } \sum_l \to \int_0^\infty dl \\ \text{– není z mojí hlavy} \end{array} \right| = \sum_n e^{-\frac{1}{kT}\left[\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]} \int_0^\infty (2l+1)\, e^{-\frac{1}{kT}\left[\frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) + \alpha l(l+1)\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]} dl$$

$$= \left| \begin{array}{l} l(l+1) = t \\ (2l+1)\,dl = dt \\ 0 \to 0 \\ \infty \to \infty \end{array} \right| = \sum_n e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{kT}\left[\frac{\hbar^2}{2I} \cdot t + \alpha t\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]} dt$$

$$= \sum_n e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \int_0^\infty e^{-t \cdot \frac{1}{kT}\left[\frac{\hbar^2}{2I} + \alpha\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]} dt = \sum_n e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \cdot \frac{-1}{\frac{\hbar^2}{2I} + \alpha\left(n+\frac{1}{2}\right)} \cdot$$

$$\cdot \left[e^{-t \cdot \frac{1}{kT}\left[\frac{\hbar^2}{2I} + \alpha\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]} \right]_0^\infty = \sum_n e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \cdot \frac{-1}{\frac{\hbar^2}{2I} + \alpha\left(n+\frac{1}{2}\right)} \cdot \underbrace{\left(e^{-\infty} - e^{0}\right)}_{-1} =$$

$$= \sum_n \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2I} + \alpha\left(n+\frac{1}{2}\right)}\, e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \approx \frac{kT}{\frac{\hbar^2}{2I} + \frac{\alpha}{2}}\, e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + \frac{kT}{\frac{\hbar^2}{2I} + \frac{3}{2}\alpha}\, e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}$$

bude to rychle konvergovat, tak vezmeme jen první dva členy

$$E = F + TS \qquad F = -kT\ln Z = -kT\ln\left(\frac{1}{\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{\alpha}{2}}e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{3}{2}\alpha}e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}\right)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -\frac{F}{T} + kT\,\frac{1}{\cancel{\frac{1}{\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{\alpha}{2}}}e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + \cancel{\frac{1}{\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{3}{2}\alpha}}e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}}\cdot\left(+\frac{\frac{\hbar\omega}{2kT^2}e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}}{\cancel{\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{\alpha}{2}}} + \frac{\frac{3}{2}\frac{\hbar\omega}{2kT^2}e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}}{\cancel{\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{3\alpha}{2}}}\right) = -\frac{F}{T} + kT\left(\frac{\hbar\omega}{2kT^2}e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + \frac{3\hbar\omega}{2kT^2}e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}\right)$$

$\alpha \approx 3\alpha$

:)

$$= -\frac{F}{T} + \frac{\frac{\hbar\omega}{2T}\left(e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + \frac{3}{2}e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}\right)}{e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}}$$

$$E = \cancel{F} + T\cdot\left(-\cancel{\frac{F}{T}}\right) + \frac{\hbar\omega}{2}\left(e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + \frac{3}{2}e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}\right)\cdot\left(e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}} + e^{-\frac{3\hbar\omega}{2kT}}\right)$$

– to mi ale přijde jako blbost

– napadlo mě ještě v té sumě ~~pak~~ $\sum_n \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2I}+\alpha(n+\frac{1}{2})}e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}(n+\frac{1}{2})}$ zanedbat to $\alpha(n+\frac{1}{2})$ a dostal bych ten sinh cos ukazoval na cviku, ale tím bych vlastně zrušil ten společnej člen tak nevím

6. domácí úkol

2) Hustota stavů

Spočtěte hustotu stavů $\rho(E)$ pro volnou nerel. částici m v 1D

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\rho_d(k) = \frac{gV}{\hbar^d} \frac{1}{2^d} k^{d-1} S_{d-1} dk$$

$$\rho_d(E) = \frac{gV}{(2\pi)^d} \frac{k^{d-1}}{\left|\frac{dE}{dk}\right|} S_{d-1} dE \qquad S_{d-1} = \frac{2 \cdot \pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \Rightarrow S_1 = 2$$

$$\rho_1(E) = |V = L| = \frac{1 \cdot L}{2\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2 k} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{2m}$$

$$\rho_1(E) = \frac{L \cdot m}{\pi \hbar^2 k} = \frac{Lm}{\pi \hbar^2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{1}{\sqrt{E}} =$$

$$= \frac{\sqrt{m} \cdot L}{\sqrt{2}\, \hbar \cdot \pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{E}}$$