4. óra

Legendre-transzformáció:

def: $f(x) \xrightarrow{\mathcal{L}} g(z)$; $\quad g(z) \Rightarrow \begin{cases} g(z) = f(x) - xz \\ z = f'(x) = \frac{df}{dz} \end{cases}$

Egyszerű példa:

$$f(x) = \ln x \quad \Longrightarrow \quad f'(x) = \frac{1}{x} = z$$

$$g(z) = f(x) - xz = \ln x - zx = \ln\frac{1}{z} - z\frac{1}{z} = -\ln z - 1$$

HF1: $f(x) = ax + bx^3$ (a,b konstansok). Írjuk fel $f(x)$ Legendre-transzformáltját! $g(z) =$?

Példa2: A szabadenergia Legendre-transzformáltja:

$$F(T, V, n) \xrightarrow{\mathcal{L}} G(T, p, n)$$

Ideális gázra láttuk, hogy:

$$F(T, V, n) = nRT\left[\frac{f}{2} - \frac{f}{2}\ln\frac{T}{T_0} + \ln\frac{p_0 V}{nRT_0}\right] + nTS_m^0$$

Deriváljuk V szerint:

$$\frac{\partial F}{\partial V} = -nRT\frac{1}{V} = -p \quad \Longrightarrow \quad V = \frac{nRT}{p}$$

(A fenti jelölést használva tehát $z = -p$). Így

$$G(T, p, n) = F + pV,$$

ahol

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V}.$$

V-t beírva:

$$G(T, p, n) = F + pV = nRT\left[\frac{f+2}{2}\left(1 - \ln\frac{T}{T_0}\right) + \ln\frac{p}{p_0}\right] - nTS_m^0$$

HF2: Hasonlóképp belátni $U(S) \xrightarrow{\mathcal{L}} F(T)$ és/vagy $U(V) \xrightarrow{\mathcal{L}} H(p)$ kapcsolatokat.

Kanonikus sokaság – <u>Einstein-modell:</u>

1 db lin.o

szc. energiája: $E = \left(M + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

Állapotösszeg: $\mathcal{Z} = \sum_m e^{-\beta E_m}$

$\boldsymbol{N = 3}$ független oszcillátor esetén:

$$E_m = E_{M_1} + E_{M_2} + E_{M_3} = \hbar\omega\left(M_1 + M_2 + M_3 + \frac{3}{2}\right)$$

$$\mathcal{Z} = \sum_m e^{-\beta E_m} = \sum_{M_1}\sum_{M_2}\sum_{M_3} e^{-\beta\hbar\omega\left(M_1+M_2+M_3+\frac{3}{2}\right)} =$$

$$= \sum_{M_1}\sum_{M_2}\sum_{M_3} e^{-\beta\hbar\omega\frac{3}{2}} e^{-\beta\hbar\omega M_1} e^{-\beta\hbar\omega M_2} e^{-\beta\hbar\omega M_3} =$$

$$= e^{-\beta\hbar\omega\frac{3}{2}} \sum_{M_1} e^{-\beta\hbar\omega M_1} \sum_{M_2} e^{-\beta\hbar\omega M_2} \sum_{M_3} e^{-\beta\hbar\omega M_3} =$$

$$= e^{-\beta\hbar\omega\frac{3}{2}} \sum_{M_1} e^{-\beta\hbar\omega M_1} \sum_{M_2} e^{-\beta\hbar\omega M_2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \cdots =$$

$$= \left(e^{-\beta\hbar\omega\frac{1}{2}}\right)^3 \frac{1}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^3} = \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega\frac{1}{2}}(1 - e^{-\beta\hbar\omega})}\right)^3 =$$

$$= \left(\frac{1}{e^{\beta\frac{\hbar\omega}{2}} - e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}}\right)^3 = \left(\frac{1}{2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\right)^3 = \zeta^3,$$

ahol ζ az egyrészecske-állapotösszeg.

(Megjegyzés: a levezetés során "…" előtt felhasználtuk a mértani sor képletét: $S_n = a_1 \frac{1}{1-q}$, ha $0 < |q| < 1$.)

A fentiek alapján belátható, hogy **N db részecske esetén:** $\boldsymbol{\mathcal{Z} = \zeta^N}$.