NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE
UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK
Faglig kontakt under eksamen:
Prof. Asle Sudbø
Tlf: 93403

EKSAMEN I FAG 74315 - STATISTISK MEKANIKK
Fredag 19. desember, 1997
kl. 0900-1400
Tillatte hjelpemidler: Godkjent lommekalkulator
Rottmann: Mathematische Formelsammlung
Rottmann: Matematisk Formelsamling
Barnett & Cronin: Mathematical Formulae

Oppgave 1

Et sett av N ikke-vekselvirkende ladede partikler som beveger seg i én dimensjon med ladning q og masse m i et elektrisk felt $\mathcal{E}$, har en Hamilton-funksjon gitt ved

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + q\mathcal{E}|x_i| \right] = \sum_{i=1}^{N} H_i$$

hvor q og $\mathcal{E}$ er positive konstanter som antas kjente, og (x_i, p_i) er partikkel nummer i sin posisjon og impuls. Systemets utstrekning er slik at $-L < x_i < L$.

a) Beregn systemets kanoniske partisjonsfunksjon Z

$$Z = \frac{1}{h^N N!} \prod_{i=1}^{N} \left[\int_{-L}^{L} dx_i \int_{-\infty}^{\infty} dp_i \; e^{-\beta H_i} \right] = e^{-\beta F}$$

hvor $\beta = 1/k_B T$, h er Planck's konstant, k_B er Boltzmann's konstant, T er temperaturen, og F er systemets frie energi.

b) Finn systemets tilstandsligning

$$p = k_B T \; \frac{\partial \ln Z}{\partial V}$$

Sammenlign med ideell gass lov $pV = N k_B T$, og gi en fysisk tolkning av svaret du finner.

c) Finn indre energi U og varmekapasitet C_V i grensen $L \to \infty$

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}; \quad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

d) Hvor stort blir potensialleddet i H sitt bidrag til C_V per partikkel? Begrunn svaret.

Oppgave 2

En ikke-relativistisk ideell kvantegass i d dimensjoner har en fugasitetsutvikling for tetthet og trykk gitt ved

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{\Lambda^d} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{l-1}}{l^{\frac{d}{2}}} \; z^l \\ \beta p &= \frac{1}{\Lambda^d} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(\pm 1)^{l-1}}{l^{\frac{d}{2}+1}} \; z^l \end{aligned}$$

hvor $\Lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ er termisk de Broglie-bølgelengde, m er partiklenes masse, $\beta = 1/k_B T$, T er systemets temperatur, k_B er Boltzmann's konstant, og fugasiteten z er gitt ved $z = \exp(\beta\mu)$, hvor μ er kjemisk potensial. Det øverste fortegnet gjelder for bosoner, det nederste for fermioner.

Et potensielt viktig teknologisk eksempel på slike kvantegasser er elektroner i kvanteprikker. En kvanteprikk er en laserlys-etset punktformet defekt i et faststoff, gjerne en halvleder, og defekten kan romme kvantetilstander. I enkleste tilnærmelse kan elektroner i slike prikker formelt betraktes som en $d = 0$-dimensjonal ideell kvante-gass.

a) Finn i denne tilnærmelsen et eksplisitt uttrykk for tettheten $\rho(z)$ til elektroner i en kvanteprikk.

b) Beregn tilstandsligningen βp som funksjon av ρ eksakt for slike elektroner.

c) Virialutviklingen for slike elektroners tilstandsligningen kan skrives

$$\beta p = \sum_{l=1}^{\infty} B_l(T) \; \rho^l$$

Finn et uttrykk for $B_l(T)$.

d) Ved substitusjonen $z \to -z$, $p \to -p$, og $\rho \to -\rho$ finner vi en tilsvarende boson-gass sin tilstandsligning fra kjennskap til elektronenes tilstandsligning. Bruk denne substitusjonen til å finne tilstandsligningen for en $d = 0$-dimensjonal ideell boson-gass.

e) Finn $B_l(T)$ for den ideelle boson-gassen i punkt **d)**.

Oppgave 3

Gittervibrasjonene i et tredimensjonalt krystall med N gitterpunkt gir et bidrag til kanonisk partisjonsfunksjon Z til krystallet gitt ved

$$\ln Z = -\sum_{i=1}^{3N} \ln\Big[2\sinh(\frac{\beta\hbar\omega_i}{2})\Big]$$

hvor det summeres over alle mulige svingemoder i.

a) Forklar under hvilke forutsetninger dette uttrykket er gyldig.

b) Vis at den indre energien U for systemet kan skrives

$$U = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\ \frac{\hbar\omega}{2}\ g(\omega)\ \coth(\beta\hbar\omega/2)$$

Gi en tolkning av funksjonen $g(\omega)$, og et generelt uttrykk for den. Hva representerer uttrykket for U i grensen $T \to 0$?

c) Funksjonen $g(\omega)$ modelleres med formen

$$\begin{aligned} g(\omega) &= \mathcal{C}\ \omega^{\nu}; 0 < \omega < \omega_D \\ &= 0; \text{ellers} \end{aligned}$$

hvor ν er en positiv konstant, og ω_D er en kjent frekvens. Bestem konstanten $\mathcal{C}$, og redegjør kort for resonnementet som ligger til grunn for bestemmelsen av $\mathcal{C}$.

d) Vis at systemets varmekapasitet ved konstant volum V kan skrives

$$C_{\rm V} = \frac{3N\ (\nu+1)\ k_B}{A^{\nu+1}} \int_0^A\ dx\ \frac{x^{\nu+2}}{\sinh^2(x)}$$

hvor $A = \beta\hbar\omega_D/2$.

e) Finn eksplisitte uttrykk for varmekapasiteten i de to tilfellene $A >> 1$ og $A << 1$. Gi en kort forklaring på resultatet for $A << 1$, og sammenhold det med forutsetningene i punkt **a)**.

Oppgitt:

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty dx \, \frac{x^{\nu+2}}{\sinh^2(x)} &= \frac{1}{2^{\nu+1}} \, \Gamma(\nu+3) \, \zeta(\nu+1) \\
\Gamma(x) &= \int_0^\infty dt \, t^{x-1} \, e^{-t} \\
\Gamma(x+1) &= x \;\; \Gamma(x) \\
\zeta(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x} \\
\sinh(x) &= x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + ... \\
\frac{d\coth(x)}{dx} &= -\frac{1}{\sinh^2(x)} \\
\sum_{n=1}^{\infty} a^n &= \frac{a}{1-a} \\
\int_0^\infty dt \, e^{-at} &= \frac{1}{a}; \quad a > 0 \\
\int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{-at^2} &= \sqrt{\frac{\pi}{a}}; \quad a > 0 \\
\ln(1+x) &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l-1}}{l} \, x^l \\
\int \frac{dx}{1+x} &= \ln(1+x) + \mathrm{C}
\end{aligned}
$$

Både $\Gamma(x)$ og $\zeta(x)$ kan antas kjente der man måtte få bruk for dem.

Oppgave 1

a) Alle integralene er like, og vi får

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{h^N N!}\left[2\int_0^L dx e^{-\beta q\mathcal{E}x} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\beta p^2/2m}\right]^N \\ &= \frac{1}{h^N N!}\left[\frac{2\pi m}{\beta}\right]^{N/2}\left[\frac{2}{\beta q\mathcal{E}}(1-e^{-\beta q\mathcal{E}L})\right]^N \end{aligned} \tag{1}$$

b) Vi har $V = 2L$, slik at $\partial V = 2\partial L$, og den eneste L-avhengigheten sitter i $1 - e^{-\beta q\mathcal{E}L}$-leddet. Dermed får vi

$$\begin{aligned} \beta p &= \frac{1}{2}\frac{\partial \ln Z}{\partial L} = \frac{N}{2}\frac{\partial}{\partial L}\ln(1-e^{-\beta q\mathcal{E}L}) = \frac{N}{2} \quad \frac{\beta q\mathcal{E}}{e^{\beta q\mathcal{E}L}-1} \\ pV &= Nk_BT \quad \frac{a}{e^a-1}; \qquad a = \beta q\mathcal{E}L \end{aligned} \tag{2}$$

Vi har $0 < a/(e^a - 1) < 1$; dermed fås en trykkreduksjon relativt ideell gass. Det elektriske feltet forsøker å samle partiklene i senteret av det endimensjonale "volumet", slik at partiklene trykker mindre mot veggene. Dermed reduseres selvfølgelig trykket. Når $\mathcal{E} \to 0$, vil $a \to 0$, og dermed $a/(e^a - 1) \to 1$. Når feltet slås av, gjenfinnes vanlig ideell gass lov. Den dimensjonsløse størrelsen $a = \beta q\mathcal{E}L$ er forholdet mellom en termisk energi k_BT og energien $q\mathcal{E}L$, som er arbeidet som skal til for å dra en ladning fra senteret av "boksen" og ut til veggen. Det er balansen mellom disse to energiene som regulerer avviket fra ideell gass lov.

c) Når $L \to \infty$, kan vi neglisjere $e^{-\beta q\mathcal{E}L}$. Dermed får vi

$$\begin{aligned} Z &\propto \beta^{-3N/2} \\ U &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{3Nk_BT}{2} \\ C_V &= \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{3Nk_B}{2} \end{aligned}$$

d) Det finnes ett kvadratisk ledd i H, og det må gi ett bidrag per partikkel $C_V = k_B/2$, i henhold til klassisk ekvipartisjonsprinsipp. Resten må komme fra potensial-leddet, dvs. det må gi k_B per partikkel. Alternativt kan vi regne ut bidraget direkte, ved først å se på potensial-leddet sitt bidrag til U:

$$\begin{aligned} < q\mathcal{E}|x| > &= \frac{2\int_0^\infty dx \quad q\mathcal{E}x \quad e^{-\beta q\mathcal{E}x}}{\underbrace{2\int_0^\infty dx \quad e^{-\beta q\mathcal{E}x}}_{I}} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln I; \qquad I = \frac{1}{\beta q\mathcal{E}} \\ < q\mathcal{E}|x| > &= k_BT \end{aligned} \tag{3}$$

Dermed blir dette leddet sitt bidrag til C_V gitt ved k_B.

Oppgave 2

a) Ved å bruke de oppgitte rekkene for $d = 0$, finner vi ved å bruke oppgitte formler

$$\rho = -\sum_{l=1}^{\infty} (-z)^l = \frac{z}{1+z}; \qquad \beta p = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l-1}}{l} z^l = \ln(1+z) \tag{4}$$

b) Ved å invertere relasjonen mellom ρ og z, finner vi $z = \rho/(1-\rho)$, som innsatt i uttrykket for βp gir

$$\beta p = \ln\left(1 + \frac{\rho}{1-\rho}\right) = -\ln(1-\rho) \tag{5}$$

Dette er tilstandsligningen for $d = 0$ fermion gassen.

c) Ved å Taylor-utvikle tilstandsligningen i ρ, genererer vi direkte virial-utviklingen (ved å bruke oppgitt rekke for $\ln(1+x)$:

$$\beta p = -\ln(1-\rho) = -\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l-1}}{l} (-\rho)^l = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\rho^l}{l} = \sum_{l=1}^{\infty} B_l(T)\rho^l \tag{6}$$

Ved sammenligning ser vi at $B_l = 1/l$.

d) Bruker substitusjonen $p \to -p$, $\rho \to -\rho$, sammen med tilstandsligningen for fermionene, og får

$$\begin{aligned} -\beta p &= -\ln(1-(-\rho)) \\ \beta p &= \ln(1+\rho) \end{aligned} \tag{7}$$

som altså er tilstandsligningen for boson-gassen. I lavtetthets grensen gjenfinnes klassisk resultat $\beta p = \rho$ i begge tilfellene. Trykket i boson-gassen ligger under klassisk verdi, men ligger over klassisk verdi og divergerer når $\rho \to 1$ i fermion tilfellet.

e) Ved å rekkeutvikle tilstandsligninger for bosonene i ρ, genererer vi direkte en virial-utvikling

$$\beta p = \ln(1+\rho) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l-1}}{l} \rho^l = \sum_{l=1}^{\infty} B_l(T)\, \rho^l \tag{8}$$

Ved sammenligning ser vi at $B_l(T) = (-1)^{l-1}/l$. Odde virialkoeffisienter er like i fermion- og boson-gassen, like virial-koeffisienter har motsatt fortegn. Dette gjelder generelt i enhver dimensjon for ideelle kvantegasser.

Oppgave 3

a) Oppgitt uttrykk for Z er gyldig dersom gittersvingningene kan betraktes som harmoniske. Det er tillatt dersom utsvingene av gitterpunktene rundt likevekt er mye mindre enn gitterkonstanten i problemet. Forutsetningen om dette er tilfredsstilt for lave temperaturer.

b) Standard derivasjon, hvor summen konverteres eksakt til et integral ved å innføre

$$g(\omega) = \sum_{i=1}^{3N} \delta(\omega - \omega_i) \tag{9}$$

på følgende måte

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{3N} \ \frac{\hbar\omega_i}{2} \ \frac{\cosh(\beta\hbar\omega_i/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega_i/2)} \\ &= \sum_{i=1}^{3N} \ \frac{\hbar\omega_i}{2} \ \coth(\beta\hbar\omega_i/2) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ \frac{\hbar\omega}{2} \ g(\omega) \ \coth(\beta\hbar\omega/2) \end{aligned} \tag{10}$$

$g(\omega)$ er frekvenstettheten av svingemodene til gitteret. Dersom vi integrerer denne fordelingsfunksjonen over alle mulige frekvenser, må vi få totalt antall svingemoder

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ g(\omega) = 3N \tag{11}$$

$T \to 0$ innebærer at

$$U = \sum_i \ \frac{\hbar\omega_i}{2} \tag{12}$$

som er summen av nullpunktsenergiene til alle svingemodene i gitteret.
c) Normeringen av $g(\omega)$ gitt over resulterer i

$$\mathcal{C} \int_0^{\omega_D} d\omega \ \omega^\nu = \frac{\mathcal{C}\omega_D^{\nu+1}}{\nu+1} = 3N; \qquad \mathcal{C} = \frac{3N \ (\nu+1)}{\omega_D^{\nu+1}} \tag{13}$$

d) Vi deriverer indre energi,

$$\begin{aligned} C_V &= -k_B \ \beta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_V = -k_B \frac{\hbar}{2} \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^{\omega_D} d\omega \ g(\omega) \ \omega \ \coth(\beta\hbar\omega/2) \\ &= \frac{3N(\nu+1)k_B}{\omega_D^{\nu+1}} \left(\frac{\hbar\beta}{2}\right)^2 \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega \ \omega^{\nu+2}}{\sinh^2(\beta\hbar/2)} \\ &= \frac{3N(\nu+1)k_B}{\omega_D^{\nu+1}} \left(\frac{\hbar\beta}{2}\right)^2 \ \left(\frac{2}{\beta\hbar}\right)^{\nu+3} \int_0^A \frac{dx \ x^{\nu+2}}{\sinh^2(x)} = \frac{3N(\nu+1)k_B}{A^{\nu+1}} \int_0^A \frac{dx \ x^{\nu+2}}{\sinh^2(x)} \end{aligned} \tag{14}$$

e) $A >> 1$ er ekstrem lavtemperatur grense. Siden integralet er meget raskt konvergent, kan vi erstatte øvre grense med ∞ og vi får dermed

$$C_V = \frac{3N(\nu+1)k_B}{A^{\nu+1}} \ \frac{1}{2^{\nu+1}} \ \Gamma(\nu+3)\zeta(\nu+1) \sim \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_D}\right)^{\nu+1} \tag{15}$$

Altså er C_V redusert langt under klassisk verdi ved lave T, dvs. $k_B T << \hbar\omega_D$. Når $A << 1$, rekkeutvikler vi integranden, siden alle bidrag til integralet må komme fra små x:

$$C_V = \frac{3N(\nu+1)k_B}{A^{\nu+1}} \int_0^A \ dx \ \frac{x^{\nu+2}}{x^2} = \frac{3N(\nu+1)k_B}{A^{\nu+1}} \frac{A^{\nu+1}}{\nu+1} = 3Nk_B \tag{16}$$

Dette høytemperatur resultatet er hva vi ville forventet fra klassisk ekvipartisjonsprinsipp: $3N$ oscillatorer, hver med to kvadratiske frihetsgrader x_i og p_i, som hver gir et bidrag $k_B/2$ til spesifikk varme. Imidlertid forventer vi at antagelsen om harmoniske oscillasjoner ikke er god når temperaturen i gitteret blir veldig høy, $k_B T >> \hbar\omega_D$. Harmoniske svingninger er i alle fall ikke tilstrekkelig til å beskrive gitterets termiske eksitasjoner f.eks. i nærheten av et smeltepunkt.