NTNU **Institutt for fysikk**

Faglig kontakt under eksamen:
Professor Kåre Olaussen
Telefon: 9 36 52 eller 45 43 71 70

Eksamen i TFY4230 STATISTISK FYSIKK

Fredag 17. august, 2012
09:00–13:00

Tillatte hjelpemidler: Alternativ **C**
- Standard kalkulator (ifølge NTNU's liste).
- Ett A4 formelark; egne notater er tillatt på dette.
- K. Rottman: *Matematisk formelsamling* (alle språkutgaver).
- Barnett & Cronin: *Mathematical Formulae*

Dette oppgavesettet er på 3 sider.

Oppgave 1. Klassisk og kvantemekanisk beskrivelse av toatomige molekyler

Toatomige molekyler, som for eksempel CO, kan vibrere langs langs aksen som forbinder atomene. Den enkleste matematiske modellen for denne vibrasjonen er en klassisk, endimensjonal harmonisk oscillator, definert ved Hamiltonfunksjonenen

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2. \tag{1}$$

a) Hva er ekvipartisjonsprinsippet? Hva er midlere energi og varmekapasitet for den harmoniske oscillatoren (1) ifølge dette?

b) Skriv opp og beregn den klassiske partisjonsfunksjonen Z for systemet (1).

c) Bruk partisjonsfunksjonen fra punkt **b)** til å beregne midlere energi $\langle E\rangle$ og varmekapasitet C_{V} for systemet (1).

For en kvantemekaniske beskrivelse av vibrasjonsbevegelsen i det toatomige molekylet kvantiserer man Hamiltonfunksjonen (1). Energiegenverdiene til en endimensjonal harmonisk oscillator er

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right), \quad n_0, 1, 2, \ldots \tag{2}$$

Egenverdiene er ikke degenererte.
Massen m_{C} til et ^{12}C-atom og m_{O} til et ^{16}O-atom er henholdsvis

$$m_{\mathrm{C}} = 1.992\,647 \times 10^{-29}\ \mathrm{kg}, \quad m_{\mathrm{O}} = 2.656\,862 \times 10^{-29}\ \mathrm{kg}, \tag{3}$$

og fjærkonstanten k har omtrent verdien

$$k = 8\ \mathrm{kg/s^2}. \tag{4}$$

Plancks konstant $\hbar$ og Boltzmanns konstant k_{B} er henholdsvis

$$\hbar = 1.054\,572 \times 10^{-34}\ \mathrm{kg\ m^2/s}, \quad k_{\mathrm{B}} = 1.380\,650 \times 10^{-23}\ \mathrm{kg\ m^2/s^2K}. \tag{5}$$

d) Hva blir ω i dette tilfellet?

e) Skriv opp og beregn den kvantemekaniske partisjonsfunksjonen Z for systemet (1).

f) Bruk partisjonsfunksjonen fra punkt **e)** til å beregne midlere energi $\langle E \rangle$ og varmekapasitet C_V for systemet (1).

g) Bruk resultatet fra punkt **f)** til å finne lavtemperaturoppførselen for $\langle E \rangle$ og C_V.

h) Bruk resultatet fra punkt **f)** til å finne høytemperaturoppførselen for $\langle E \rangle$ og C_V.

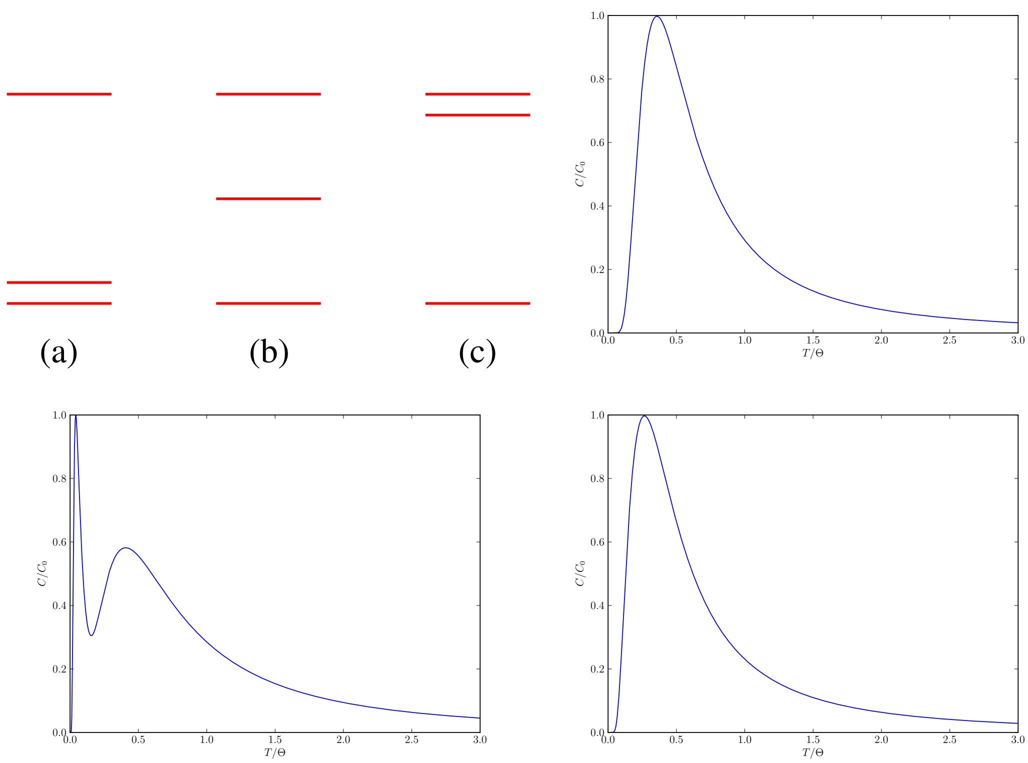
i) Lag to skisser som viser $\langle E \rangle$ og C_V som funksjon av temperaturen T. Sammenlign oppførselen til den klassiske og kvantemekaniske oscillatoren.

j) Anslå hvor lav T må være for at lavtemperaturoppførselen skal være en god tilnærming, og hvor høy T må være for at høytemeraturoppførselen skal være en god tilnærming.

k) Hva menes med utfrysing av frihetsgrader?

l) Vibrasjonsbevegelsen er bare et av bidragene til varmekapasiteten til en gass CO-molekyler. Hvilke andre bidrag bør kan være aktuelle?

Oppgave 2. Varmekapasitet for 3-nivå systemer
Se på et system som kan være i tre forskjellige energitilstander, $\{E_0, E_1, E_2\}$, i termisk likevekt med et reservoir med temperatur T.



I figuren øverst til venstre vises tre mulige ordninger av energinivåene. De tre andre figurene viser de tilsvarende varmekapasitetene, men i tilfeldig rekkefølge. Temperaturskalaen Θ er den samme i alle tre tilfellene (C_0 er ikke det).

a) Hvilke varmekapasiteter svarer til hvilke nivåordninger? Begrunn dine valg.

Oppgave 3. Python kode

Listing 1: Python kodesnutt

```
nPoints = 50000
nBins = 1000
qValues = numpy.linspace(0, 0.5*numpy.pi, nPoints)[1:nPoints]
omega = numpy.sqrt( 4*numpy.sin(qValues)**2 + 2*numpy.sin(2*qValues)**2)
[weights, bins] = numpy.histogram(omega, bins=nBins)
normalizedWeights = weights/numpy.sum(weights)
```

a) Forklar hva de seks linjene med Python kode over gjør.

Oppgave 4. Middelfeltbeskrivelse av en Ising modell

Hamiltonfunksjonen of en lukket endimensional kjede av Ising-spinn i et gitt "magnetfelt" B er

$$H = -\left(J \sum_{n=1}^{N} s_n s_{n+1} + B \sum_{n=1}^{N} s_n \right), \tag{6}$$

der hvert Isingspinn s_n kan ta to verdier, $s_n = \pm 1$. Vi gjør dessuten identifiseringen $s_{N+1} = s_1$ (periodiske grensebetingelser) og antar at N er et like tall. Partisjonsfunksjonen for dette systemet er

$$Z_N = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \mathrm{e}^{-\beta H}. \tag{7}$$

a) Hvor mange ledd er det i summen (7) i) når $N = 100$, ii) når $N = 1000$?

b) Anta at du kan erstatte vekselvirkningen mellom spinnet s_n og dets naboer $s_{n\pm 1}$ med et midlere bidrag $\Delta B s_\mathrm{n} = J\left(\langle s_{n+1}\rangle + \langle s_{n-1}\rangle\right) s_n$.
Regn ut middelverdien $\langle s_n \rangle$ under denne antagelsen.

c) Skriv opp de selvkonsistente middelfeltligningene under denne antagelsen.

d) Når $|\beta J|$ blir stor nok vil middelfeltligningene ha en løsning der $\langle s_n \rangle \neq 0$ selv om $B = 0$.
Hva er den minste verdien βJ kan ha for at dette skal skje?

e) Hvilket fortegn må βJ ha for at $\langle s_{n+1} \rangle$ og $\langle s_n \rangle$ skal peke i samme retning i løsningen fra forrige punkt (dvs, når har vi en ferromagnetisk kobling mellom spinnene)?