[illegible]

Antydet Løsning. Oppgave 1

a) Tilstandsligningen for fermioner er

$$P\Omega/KT = \ln Z_g = \sum_k \ln(1+ze^{-\beta\varepsilon_k}),$$

og midlere besettelsestall er

$$\langle n_k\rangle = ze^{-\beta\varepsilon_k}/(1+ze^{-\beta\varepsilon_k}) = [e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1]^{-1},$$

dvs. for $T=0$ har vi

$$\langle n_k\rangle = \begin{cases} 0 & \text{for } \varepsilon_k > \varepsilon_F, \\ 1 & \text{for } \varepsilon_k < \varepsilon_F. \end{cases}$$

Den indre energi er

$$U = \langle E\rangle = \sum_k \varepsilon_k\langle n_k\rangle = \sum_k [\varepsilon_k/(e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1)],$$

og ikke-relativistisk er énpartikkel-energien

$$\varepsilon = p^2/2m,$$
$$\varepsilon_F = p_F^2/2m = (6\pi^2\rho/g)^{2/3}(\hbar^2/2m),$$

der g er degenerasjonsgraden. Gassens totale energi blir da

$$E = g(\Omega/h^3)\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon\, d^3p = [4\pi g\Omega/(2\pi\hbar)^3]\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon p^2 dp$$
$$= (g\Omega/4m\pi^2\hbar^3)\int_0^{p_F} p^4 dp = g\Omega p_F^5/20m\pi^2\hbar^3$$
$$= \tfrac{3}{10}(6\pi^2/g\Omega)^{2/3}N^{5/3}(\hbar^2/m) = \tfrac{3}{10}(6\pi^2\rho/g)^{2/3}N(\hbar^2/m) = \underline{\underline{\tfrac{3}{5}N\varepsilon_F}}\,.$$

Gasstrykket er

$$\mathcal{P} = -(\partial E/\partial\Omega) = \tfrac{1}{5}(6\pi^2/g)^{2/3}(\hbar^2/m)\rho^{5/3} = \tfrac{2}{5}\rho\varepsilon_F$$

dvs.

$$\underline{\underline{\mathcal{P}\Omega = \tfrac{2}{3}E}}$$

Alternativ løsning:

$$E \propto \Omega^{-2/3},$$

dvs.

$$\delta E/E = -\tfrac{2}{3}\delta\Omega/\Omega,$$
$$\mathcal{P} = -(\partial E/\partial\Omega) = \underline{\underline{\tfrac{2}{3}E/\Omega}}.$$

b) For elektrongass er degenerasjonsgraden $g=2$, og ekstremt relativistisk er energien

$$\varepsilon = cp,$$
$$\varepsilon_F = cp_F = (6\pi^2\rho/g)^{1/3}\hbar c = (3\pi^2\rho)^{1/3}\hbar c.$$

Total energi blir da

$$E = g(\Omega/h^3)\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon\, d^3p = [4\pi g\Omega/(2\pi\hbar)^3]\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon p^2 dp$$
$$= (c\Omega/\pi^2\hbar^3)\int_0^{p_F} p^3 dp = c\Omega p_F^4/4\pi^2\hbar^3$$
$$= \tfrac{3}{4}(3\pi^2/\Omega)^{1/3} N^{4/3}\hbar c = \tfrac{3}{4}(3\pi^2\rho)^{1/3} N\hbar c = \underline{\underline{\tfrac{3}{4}N\varepsilon_F}}$$

Gasstrykket er

$$\mathcal{P} = -(\partial E/\partial\Omega) = \tfrac{1}{4}(3\pi^2)^{1/3}\hbar c\rho^{4/3} = \tfrac{1}{4}\rho\varepsilon_F,$$

dvs.

$$\underline{\underline{\mathcal{P}\Omega = \tfrac{1}{3}E.}}$$

c) Partisjonsfunksjonen for en fotongass er

$$Z = \prod_k (1 - e^{-\beta\varepsilon_k})^{-1},$$

og midlere besettelsestall er gitt ved

$$\langle n_k\rangle = \sum_{n_k} n_k e^{-\beta n_k\varepsilon_k} \Big/ \sum_{n_k} e^{-\beta n_k \varepsilon_k} = (e^{\beta\varepsilon_k} - 1)^{-1},$$

dvs. Z kan „fortolkes" som den store kanoniske partisjonsfunksjonen Z_g og $\langle n_k\rangle$ som midlere besettelsestall for en ideell Bose gass med $\underline{\mu = 0.}$

Med to polarisasjonsretninger får vi egentlig

$$\ln Z = -2\sum_k \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}),$$

der impuls og energi er

$$p = \hbar k = \hbar\omega/c,$$
$$\varepsilon = \hbar\omega = pc.$$

Midlere besettelsestall og indre energi blir

$$\langle n_k\rangle = 2(e^{\beta\hbar\omega}-1)^{-1},$$
$$U = \sum_k \hbar\omega\langle n_k\rangle = \sum_k [2\hbar\omega/(e^{\beta\hbar\omega}-1)].$$

Periodiske grensebetingelser i kubisk volum $\Omega = L^3$ gir

$$\omega = ck = 2\pi nc/L = 2\pi nc\,\Omega^{-1/3} \propto \Omega^{-1/3},$$

dvs.

$$E \propto \Omega^{-1/3},$$
$$\delta E/E = -\tfrac{1}{3}\,\delta\Omega/\Omega,$$
$$\mathcal{P} = -(\partial E/\partial\Omega) = \underline{\underline{\tfrac{1}{3}E/\Omega}}$$

Alternativ løsning:

$$\mathcal{P} = \beta^{-1}\frac{\partial}{\partial\Omega}(\ln Z) = -\sum_k \hbar\,(\partial\omega/\partial\Omega)\langle n_k\rangle = \tfrac{1}{3}\Omega^{-1}\sum_k \hbar\omega\langle n_k\rangle,$$

dvs.

$$\underline{\underline{\mathcal{P}\Omega = \tfrac{1}{3}E}},$$

Strålingstrykket er altså lik en tredjedel av energitettheten.

Teor. Fys. III A.

Antydet Løsning, Oppgave 2

a) Bohr-Van Leeuwens teorem sier at klassisk diamagnetisme er lik null.

Kvanteteori gir direkte tillatte baner (for en ladet partikkel i et ytre magnetfelt) som oppfyller

$$\oint \underset{\sim}{p} \cdot d\underset{\sim}{r} = (j + \tfrac{1}{2})h, \qquad \text{der } j = 0, 1, 2, \dots,$$

~~da~~ $\underset{\sim}{p}$ og $\underset{\sim}{r}$ er kanonisk konjugerte variable. Hamiltonfunksjonen kan skrives

$$\mathcal{H}(\underset{\sim}{p}, \underset{\sim}{r}) = \frac{1}{2m}(\underset{\sim}{p} + e\underset{\sim}{A})^2,$$

der $-e$ er ladningen for elektronet. Hastigheten i baneplanet normalt magnetfeltet er

$$\underset{\sim}{v} = \nabla_p \mathcal{H} = \frac{1}{m}(\underset{\sim}{p} + e\underset{\sim}{A}),$$
$$|\underset{\sim}{v}| = eaB/m,$$

i en sirkel med radius a, dvs.

$$\oint (m\underset{\sim}{v} - e\underset{\sim}{A}) \cdot d\underset{\sim}{r} = (j + \tfrac{1}{2})h,$$

der (ifølge Stokes' sats)

$$\oint \underset{\sim}{A} \cdot d\underset{\sim}{r} = \iint (\nabla \times \underset{\sim}{A}) d\underset{\sim}{S} = \iint \underset{\sim}{B} \cdot \underset{\sim}{n}\, dS = \pi a^2 B,$$
$$2\pi a m v - \pi a^2 e B = \pi a^2 e B = (j + \tfrac{1}{2})h.$$

Tillatte baner er da gitt ved

$$r^2 = 2(j+\tfrac{1}{2})(\hbar/eB), \qquad j = 0,1,2,\dots,$$

og energien blir tilsvarende

$$\frac{1}{2m}(\underset{\sim}{p}+e\underset{\sim}{A})^2 = \tfrac{1}{2}m|\underset{\sim}{v}|^2 = (j+\tfrac{1}{2})(e\hbar B/m), \quad j = 0,1,2,\dots.$$

Med eventuell kinetisk energi (langs z-aksen) i magnetfeltets retning inkludert, er tillatte energier

$$\underline{\underline{\varepsilon(p_z,j) = p_z^2/2m + (j+\tfrac{1}{2})(e\hbar B/m)}}$$

Tillatte verdier for impulsen i feltretningen er

$$p_z = 2\pi\hbar l/\Omega^{1/3}, \qquad l = 0,\pm1,\pm2,$$

som kan finnes på vanlig måte ved f.eks. periodiske grensebetingelser i kubisk volum.

b) Degenerasjonsgraden g, dvs. antall egenfunksjoner som tilsvarer samme energinivå, blir lik antall fri-partikkel tilstander som oppfyller betingelsen

$$j(e\hbar B/m) < (p_x^2+p_y^2)/2m < (j+1)(e\hbar B/m)$$

Hvis

$$p^2/2m = p_x^2+p_y^2/2m = e\hbar B/m$$

(tilsvarende f.eks. $j=0$), får vi

$$g = \pi p^2\Omega^{2/3}/h^2 = \underline{\underline{eB\Omega^{2/3}/2\pi\hbar}},$$

og

$$\varepsilon(p_z, j, \alpha) = 2(\pi\hbar l)^2/m\Omega^{2/3} + (j+\tfrac{1}{2})(e\hbar B/m),$$

der

$$\alpha = 1, 2, 3, \ldots\ g,$$
$$j = 0, 1, 2, \ldots,$$
$$l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots,$$

som blir våre betingelser eller „merkelapper".

Den store kanoniske partisjonsfunksjonen er

$$Z_g = \prod_\lambda (1 + z e^{-\beta\varepsilon_\lambda}),$$

der λ angir et sett kvantetall $\{p_z, j, \alpha\}$, dvs.

$$\ln Z_g = \sum_\lambda \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon_\lambda}) = \sum_{\alpha=1}^{g}\sum_{j=0}^{\infty}\sum_{p_z} \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon(p_z,j,\alpha)})$$
$$= (g\Omega^{1/3}/h)\int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{j=0}^{\infty} \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon(p,j,\alpha)}).$$

Totalt (midlere) antall elektroner er

$$N = z\frac{\partial}{\partial z}\ln Z_g = (g\Omega^{1/3}/h)\int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{j=0}^{\infty} (z^{-1}e^{\beta\varepsilon(p,j,\alpha)} + 1)^{-1}.$$

c) For høye temperaturer vil $z \to 0$, og vi kan rekkeutvikle i potenser av z. Første ledd gir

$$\ln Z_g \approx (zg\Omega^{1/3}/h)\int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{j=0}^{\infty} e^{-\beta[(p^2/2m) + (j+\frac{1}{2})(e\hbar B/m)]}$$
$$N \approx \ln Z_g,$$

dvs.

$$\tfrac{1}{\Omega}\ln Z_g \approx (z/4\pi^2)(eB/\hbar^2)\sqrt{2\pi m/\beta}\, e^{-x}/(1-e^{-2x})$$

$$= z\,(m/2\pi\beta\hbar^2)^{3/2}\,x/\sinh x = (z/\lambda^3)(x/\sinh x),$$

der

$$x = e\hbar B/2mKT = \mu_B B/KT,$$

og

$$\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mKT} = h/\sqrt{2\pi mKT}$$

er den termiske de Broglie bølgelengden. For svake felter kan vi rekkeutvikle om $x=0$, dvs.

$$\frac{1}{\Omega}\ln Z_g \approx (z/4\pi^2)(eB/\hbar^2)\sqrt{\pi m/2\beta}\,(1-\tfrac{1}{6}x^2)/x$$
$$= (z/\lambda^3)\left[1-\tfrac{1}{6}(e\hbar/2m)^2(B/KT)^2\right].$$

Dit gir

$$\mathcal{M} = KT\frac{\partial}{\partial B}\left(\frac{1}{\Omega}\ln Z_g\right) \approx \underline{\underline{-(z/3KT\lambda^3)\mu_B^2 B}}$$
$$\chi = \frac{\partial\mathcal{M}}{\partial B} \approx \underline{\underline{-(z/3KT\lambda^3)\mu_B^2}}$$

For svake felter, dvs. når $B\to 0$, får vi videre

$$\rho = N/\Omega \approx z/\lambda^3, \qquad \underline{\underline{\mathcal{M} \approx -(\rho\mu_B^2/3KT)B}}$$
$$\chi \approx -(\rho/3KT)(e\hbar/2m)^2 = \underline{\underline{-\rho\mu_B^2/3KT}}$$
$$\underline{\underline{C = \rho\mu_B^2/3K}},$$

der

$$\mu_B = e\hbar/2m$$

er et Bohr magneton.

Antydet Løsning Oppgave 3

a] Total kinetisk energi for systemet blir

$$E_0 = 2\sum_{k<k_F} \hbar^2k^2/2m = (\Omega/4\pi^3)\int_0^{k_F}(\hbar^2k^2/2m)\,4\pi k^2 dk$$
$$= \hbar^2\Omega k_F^5/10\pi^2 m = \tfrac{3}{5}(\hbar^2k_F^2/2m)N$$

dvs.

$$E_0/N = (3\hbar^2/10m)(3\pi^2\rho)^{2/3} = 3\hbar^2/10m\alpha^2 r_0^2,$$

der

$$k_F = (\alpha r_0)^{-1},$$
$$\alpha = (4/9\pi)^{1/3} = 0.521.$$

I „atomære enheter" blir Fermienergien derfor

$$E_F = (3me^4/10\hbar^2\alpha^2)/r_s^2 = \underline{\underline{2.21/r_s^2 \quad ry}}$$

med lengden i [Bohr] enheter.
„Exchange"-energien blir tilsvarende

$$E_{ex} = -e^2k_F^4/(4\pi^3\rho) = -3e^2/4\pi\alpha r_0 = -0.916/r_s \quad ry$$

dvs. Hartree-Fock energien blir

$$E_{HF} = E_F + E_{ex} = \underline{\underline{2.21/r_s^2 - 0.916/r_s \quad ry.}}$$

b) Coulombenergien (uten exchange) finnes ved å beregne energien til en punktladning |e| som vekselvirker elektrostatisk med en uniform negativ ladnings~~fordeling~~ i et volumelement med radius

$$r_0 = (3/4\pi\rho)^{1/3},$$

dvs. energi fra positiv ladningsbakgrunn blir

$$E_1 = -\rho e^2 \int_0^{r_0} 4\pi r \, dr = -(3e^2/4\pi r_0^3)\, 2\pi r_0^2 = \underline{\underline{-\tfrac{3}{2} e^2/r_0}}.$$

Elektronets "self-energy" beregner vi som om det var jevnt fordelt innen volumet, dvs. energien tilsvarer arbeidet med å "bygge opp" en kule med radius r_0 ved å "føre" en liten ladning dq inntil en kule med ladning $q(r)$. Det gir en energiforandring (utført arbeid) og ~~ladning~~økning (tilsvarende økning i radius) lik

$$dU = -\frac{q(r)\,dq}{r},$$
$$dq = 4\pi \rho e r^2 dr,$$

når vi antar samme (konstante) ladningstetthet ρe for $q(r)$ og dq. Da får vi

$$q(r) = \tfrac{4}{3}\pi r^3 \rho e$$
$$dU = -\tfrac{1}{3}(4\pi)^2 \rho^2 e^2 r^4 dr$$
$$E_2 = U(r_0) = \rho^2 e^2 \int_0^{r_0} \tfrac{1}{3}(4\pi)^2 \xi^4 d\xi = e^2 (3/4\pi r_0^3)^2 (4\pi)^2 (r_0^5/15)$$
$$= \underline{\tfrac{3}{5} e^2/r_0}$$

Med Fermienergien E_F inkludert, får vi

$$E_H = E_F + E_1 + E_2 = \tfrac{3}{10}(\hbar^2/m\alpha^2 r_0^2) - \tfrac{9}{10}(e^2/r_0) = \underline{\underline{2.21/r_s^2 - 1.80/r_s}} \text{ ry}.$$

Sitter vi $dE_H/dr_s = 0$, får vi likevektsverdien

$\underline{\underline{r_s = 2.45}}$, $r_0 = 2.45 r_B = \underline{\underline{1.3 Å}}$.

Hvis alle spinn er parallelle, får vi bare én spinn-tilstand pr. impuls-tilstand. Da blir

$$\alpha = (8/9\pi)^{1/3} = 0.657, \qquad (\text{siden } \rho = k_F^3/6\pi^2)$$

dvs. E_F øker med en faktor $2^{2/3} = 1.59$ og E_{ex} øker med en faktor $2^{1/3} = 1.26$, og vi får

$$\underline{\underline{E_{HF} = 3.51/r_s^2 - 1.164/r_s}} \text{ ry}.$$

(Dette raske argument forutsetter at studenten har regnet pkt. a). Hvis ikke, kan han jo regne gjennom c) på samme måte som a))