Forslag til løsning.

Oppgave 1.

a) $\beta = \frac{1}{kT}$ der k er Boltzmanns konstant og T temperaturen

p er trykket

ρ er tettheten av partikler

Her betyr en irredusibel graf at grafen ikke kan deles i 2 eller flere ikke sammenhengende ved å fjerne (eller kutte i) et feltpunkt.

Eksempler:

2 irredusible grafer   2 redusible grafer.

b) I virialutviklingen er båndene i grafene primært Mayer-bånd

$$f = e^{-\beta\varphi} - 1$$

Med γ som liten parameter kan en perturbere i denne lille parameteren. Generelt deles da potensialet i 2 deler, en referansedel (referansesystem) og en perturberende del som inneholder γ og er svakt og langtrekkende. I det her tilfellet kan referansedelen settes lik 0, og referansesystemet blir ideell gass. For små γ kan f rekkeutvikles

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[v(r) \right]^n$$

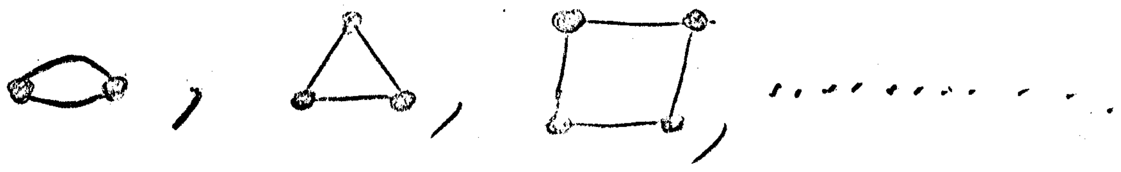
I viréalutviklingen kan nå f-bånd erstattes med v-bånd slik at det kan være et vilkårlig antall v-bånd mellom 2 pkt. Bidrag til $\mathcal{O}(\gamma^{3n})$ fåes nå fra grafer med m v-bånd og q integrasjoner (der $q+1$ er antall pkt) slik at $n = m - q$. Bidrag til $\mathcal{O}(\gamma^0)$ blir da gitt ved grafen $\bullet\!\!-\!\!-\!\!\circ$. Følgelig

$$\beta p = \rho + \left(1 - \rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right)\left(\bullet\!\!-\!\!-\!\!\circ\right) = \rho - \bullet\!\!-\!\!-\!\!\bullet = \rho + a\rho^2$$

$$a = \frac{1}{2}\int_0^{\infty} \beta \varphi(r)\, d\vec{r} = \frac{1}{2} 4\pi\beta\varphi_0 \int_0^{\infty} \gamma^2 \frac{e^{-\gamma r}}{r} r^2 dr$$

$$= \underline{\underline{2\pi\beta\varphi_0}}$$

Til $\mathcal{O}(\gamma^3)$ vil ringgrafene bidra, dvs.



Disse har generelt m bånd og m punkter, dvs. $q = m-1$ integrasjoner som etter regelen ovenfor vil gi bidrag til $\mathcal{O}(\gamma^3)$ $(n = m - q = 1)$.

Oppgave 2.

a) Partisjonsfunksjonen:

$$Z = \int e^{-\beta V} d\Omega = \int e^{\beta m E \cos\theta} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$

$$= 2\pi \int_{-1}^{1} e^{\beta m E x} dx = 2\pi \frac{e^{\beta m E} - e^{-\beta m E}}{\beta m E} = 4\pi \frac{\sinh(\beta m E)}{\beta m E}$$

$x = -\cos\theta$, $dx = \sin\theta \, d\theta$

Midlere dipolmoment (parallelt $\vec{E}$):

$$p = |\langle \vec{m} \rangle| = \frac{\partial(\ln Z)}{\partial(\beta E)} = m\left[\frac{\cosh(\beta m E)}{\sinh(\beta m E)} - \frac{1}{\beta m E}\right]$$

For små $E (\rightarrow 0)$:

$$p = \frac{1}{3} \beta m^2 E$$

Polarisering:

$$\vec{P} = \rho \vec{p}$$

Dielektrisitetskonstant bestemt ved:

$$\varepsilon \vec{E} = \vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} = \vec{E}\left(1 + \frac{4\pi}{3} \beta \rho m^2\right)$$

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi}{3} \beta \rho m^2$$

b/

$\tilde{h}(12)$ er den Fouriertransformerte av parkorrelasjonsfunksjonen til den polare væsken.

Ved beregning av ε skal verdien $k=0$ benyttes i $\tilde{h}(12)$. Dette fordi ε fysisk sett er en størrelse definert på makroskopisk nivå, dvs. avstander mye større enn typisk avstand mellom molekyler betrakter. Det vil igjen si at vi må betrakte store avstander mellom testpartiklene, altså $r \to \infty$. Ved Fouriertransformering tilsvarer dette lange bølgelengder, dvs. små $k \to 0$.

Med oppgitt $\tilde{h}(12)$ finnes:

$$\frac{1}{\varepsilon} = 1 - 9y\int(\hat{s}\hat{k})(\hat{s}\hat{k}) - 9y\iint(\hat{s}_1\hat{k})\,\rho\tilde{h}(12)(\hat{s}_2\hat{k})\frac{d\Omega_1}{\Omega}\frac{d\Omega_2}{\Omega}$$

$$= 1 - 9y\cdot\frac{1}{3} - 9y\rho\,\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3}\left\{\left[3(\hat{k}\hat{k})^2 - (\hat{k}\hat{k})\right]\tilde{h}_D(0) + (\hat{k}\hat{k})\,\tilde{h}_\Delta(0)\right\}$$

$$= \underline{\underline{1 - 3y - y\rho\left[2\,\tilde{h}_D(0) + \tilde{h}_\Delta(0)\right]}}$$