Forslag til løsning.

Sørlaus A (Statistisk fysikk)
Eksamen 26/1-84.

Oppgave 1.

a) [$\beta = 1/k_B T$ der T er temperaturen, k_B er Boltzmanns konstant]
μ er kjemisk potensial (Gibbs fri energi pr. partikkel)
p er trykket
$\varphi(x)$ er parvekselvirkningen
Denne formelen gjelder bare for éndimesjonale systemer og $\varphi(x)$ er begrenset av at partiklene må ha en hard kjerne, og at $\varphi(x) = 0$ for $|x|$ større enn det dobbelte av rekkevidden til den harde kjernen slik at bare nærmeste naboer kan vekselvirke. [Med dette reduseres partisjonsfunksjonen i konstant trykk ensemblet til et énpartikkel problem]

b) For den gitte gittergassen finnes

$$e^{-\beta\mu} = \text{konst} \sum_{m=n}^{\infty} e^{-\beta p d m} = \frac{e^{-\beta p d n}}{1-e^{-\beta p d}}$$

$$\beta\mu = \beta p d n + \ln(1-e^{-\beta p d})$$

Midlere volum pr. partikkel blir

$$\langle x \rangle = d\langle m \rangle = \frac{1}{\rho} = \frac{\partial(\beta\mu)}{\partial(\beta p)} = dn + d\frac{e^{-\beta p d}}{1-e^{-\beta p d}}$$

der ρ er partikkeltettheten. Denne likning kan enkelt løses m.h.p. $\beta p d$ (eller p)

$$(1-n\rho d)(1-e^{-\beta p d}) = \rho d e^{-\beta p d}$$

$$e^{-\beta p d} = (1-n\rho d)/(1-(n-1)\rho d)$$

$$\underline{\beta p d = \ln[(1-(n-1)\rho d)/(1-n\rho d)]}$$

For $n=1$ finnes: $\underline{\beta p = -\frac{1}{d}\ln(1-\rho d)}$ (Enkel hard kjerne gittergass)

For $n \to \infty$, $nd = v_0$ finnes: $\beta p = \frac{1}{d}\ln\left(1 + \frac{\rho d}{1-\rho v_0}\right) \xrightarrow[d\to 0]{} \underline{\underline{\frac{\rho}{1-\rho v_0}}}$

(Harde stenger uten gitter)

Oppgave 2.

I det her tilfellet blir uttrykket for summen av ringgrafene

$$\underline{\underline{I = -\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\left[\ln\left(1-\rho\tilde{v}(k)\right)+\rho\tilde{v}(k)\right]d\vec{k}}}$$

hvor
$$\tilde{v}(k) = -\beta\tilde{\varphi}(k) = \frac{-4\pi\beta q^2}{k^2+z^2}$$

Setter inn for $\tilde{v}(k)$ og finner med $\lambda^2 = z^2 + x^2$

$$I = -\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^\infty\left[\ln\left(\frac{k^2+z^2+x^2}{k^2+z^2}\right)-\frac{x^2}{k^2+z^2}\right]k^2dk$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty\left[\frac{x^2}{k^2+z^2}-\ln\left(1+\frac{\lambda^2}{k^2}\right)+\ln\left(1+\frac{z^2}{k^2}\right)\right]k^2dk$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty\left[\frac{x^2}{k^2+z^2}-\frac{\lambda^2}{k^2}+\frac{z^2}{k^2}+\left(\frac{\lambda^2}{k^2}-\ln\left(1+\frac{\lambda^2}{k^2}\right)\right)\right.$$

$$\left.-\left(\frac{z^2}{k^2}-\ln\left(1+\frac{z^2}{k^2}\right)\right)\right]k^2dk = \frac{1}{4\pi^2}\left[-\int_0^\infty\frac{x^2z^2}{k^2+z^2}dk + I_1(\lambda) - I_1(z)\right]$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\left[-x^2z^2I_2(z)+I_1(\lambda)-I_1(z)\right] = \frac{1}{4\pi^2}\left[-x^2z^2\frac{\pi}{2z}+\frac{\pi}{3}\left(\lambda^3-z^3\right)\right]$$

$$\underline{\underline{= \frac{1}{12\pi}\left[\left((x^2+z^2)^{3/2}-z^3\right)-\frac{3}{2}x^2z\right]}}$$

Uttrykket for kjedebåndet blir

$$\underline{\underline{\tilde{K}(k) = \frac{\tilde{v}(k)}{1-\rho\tilde{v}(k)}}}$$

Innsatt for $\tilde{v}(k)$

$$\tilde{K}(k) = \frac{\frac{-4\pi\beta q^2}{k^2+z^2}}{1+\frac{x^2}{k^2+z^2}} = \frac{-4\pi\beta q^2}{k^2+\lambda^2}$$

En ser at $\tilde{K}(k)$ er det samme som $\tilde{\varphi}(k)$ multiplisert med $-\beta$ mens z er erstattet med λ. Følgelig er det tilsvarende relasjon mellom $K(r)$ og $\varphi(r)$ slik at

$$K(r) = -\frac{\beta q^2}{r}e^{-\lambda r}$$ ($\lambda = ($[illegible]$)^{1/2}$)

Oppgave 3.

Retningsavhengighet m.h.p. $\hat{r}$ (enhetsvektor) kan rekkeutvikles v.h.a. kuleflatefunksjoner $Y_n^m(\hat{r})$. $\Delta(12)$ er retningsuavhengig (m.h.p. $\hat{r}$) og kan da framstilles ved $Y_0^0(\hat{r})$ alene. $D(12)$ har retningsavhengighet som kan framstilles ved funksjoner $Y_n^m(\hat{r})$ der $n=2$ mens $m = 0, \pm 1, \pm 2$. Dvs. n er fast.

$\left[\frac{1}{r^3} D(12)\right.$ finnes ved 2 ganger derivasjon av $1/r$ m.h.p. x_i $(i=1,2,3)$ og er løsning av $\nabla^2 \phi = 0$. Radialdelen $1/r^3$ er løsning av $\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r\phi - \frac{l(l+1)}{r^2}\phi = 0$ med „dreieimpuls kvantetall" $n = l = 2$. Følgelig inneholder $D(12)$ bare $\left. Y_2^m(\hat{r}). \right]$

Ved Fouriertransformering multipliseres funksjonen som skal integreres med $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ som videre kan rekkeutvikles med sfæriske Besselfunksjoner $j_n(kr)$ og Legendre polynomer $P_n(\hat{k}\hat{r})$ $[\hat{k}\hat{r} = \cos\theta_{kr}]$ som oppgitt. Som videre oppgitt kan $P_n(\hat{k}\hat{r})$ rekkeutvikles i kuleflatefunksjoner $Y_n^m(\hat{k})$ og $Y_n^m(\hat{r})$.

Integrering m.h.p. $\hat{r}$ (dvs. over vinklene eller retningen til $\vec{r}$) og bruk av den oppgitte ortogonalitetsrelasjonen for Y_n^m fører dermed til at vinkelavhengighet $Y_n^m(\hat{r})$ i den rekkeutviklede gitte funksjonen går over til $Y_n^m(\hat{k})$ ved Fouriertransformering, dvs. den funksjonelle formen bevares. Videre vil den tilhørende kulesymmetriske delen transformeres v.h.a. $j_n(kr)$, og dette blir et éndimensjonalt integral (uavh. av m med gitt n)

Da $\Delta(12)$ er uavhengig av $\vec{r}$ vil den forbli uforandret ved Fouriertransformering. $D(12)$ derimot vil gå over til $\tilde{D}(12)$, dvs $\hat{r}$ kan erstattes med $\hat{k}$ fordi som nevnt

$D(12)$ består av $Y_n^m(\hat{r})$ der n er fast $(n=2)$.
Radialdelene vil transformere som

$$g_2(k) = 4\pi \int j_0(kr)\, g_1(r)\, r^2 dr$$
$$f_2(k) = 4\pi \int (i)^2 j_2(kr)\, f_1(r)\, r^2 dr$$

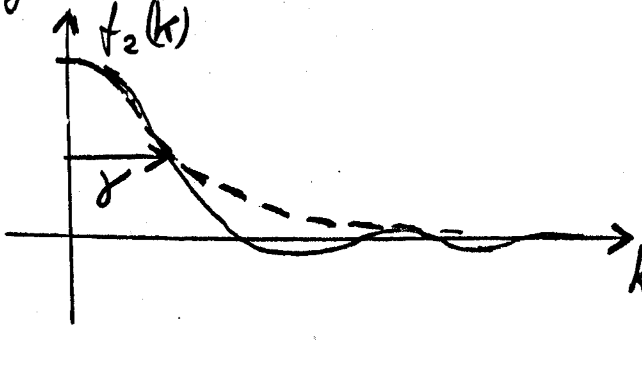
$$\left[j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \; ; \; j_2(z) = \frac{3\sin z}{z^3} - \frac{3\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \right]$$

b) Ved γ-parametrisering tenker en seg potensialet skrevet på formen $\varphi(12) = \gamma^3 F(\gamma r)$ slik at potensialets inverse rekkevidde vil definere en verdi på γ. Det ideelle dipol potensialet $\frac{1}{r^3} D(12)$ vil ikke definere noen γ fordi $\gamma^3 F(\gamma r) = \gamma^3 \frac{1}{(r\gamma)^3} = 1/r^3$, og det kan ikke brukes som perturbasjon ved beregning. Derimot viser det seg at dipol potensialet kan kuttes skarpt (eller gradvis) for avstander $r \lessapprox R$ som dermed definerer perturbasjonsparameteren $\gamma = 1/R$. Dvs. $1/r^3$ kan f.eks. erstattes med

$$H(\gamma r - 1) \frac{1}{r^3}$$

der
$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x > 0 \end{cases}$$

[Det at $1/r^3$ beholdes for $r \to \infty$ fører til at egenskaper karakteristiske for molekyler med dipol moment også beholdes. For reelle system vil R være mindre eller lik molekyldiameteren.]



[Det viser seg at $f_2(k)$ vil ha samme form som den fouriertransformerte av et kulesymmetrisk potensial med rekkevidde $1/\gamma$.]