Eksamen i statistisk mekanikk
fag 74315, den 10/1 – 96.

Forslag til løsning.

Oppgave 1.

a) Bestemmer først partisjonsfunksjonen ($\beta = 1/kT$)

$$Z = \sum_{\{s_i\}=\pm 1} e^{-\beta H} = \left(\sum_{s_1=\pm 1} e^{\beta h s_1}\right)^N$$

$$= \left(e^{\beta h} + e^{-\beta h}\right)^N = \left(2\cosh(\beta h)\right)^N$$

Midlere magnetiske moment følger så av

$$M = \mu_B \sum_{i=1}^{N} \langle s_i \rangle = \mu_B \frac{1}{Z_1} \frac{\partial Z}{\partial(\beta h)} = \mu_B \frac{\partial}{\partial(\beta h)}(\ln Z)$$

$$= \mu_B N \frac{\partial}{\partial(\beta h)} \ln\left(2\cosh(\beta h)\right) = \underline{\underline{N\mu_B \tanh(\beta h)}}$$

Midlere energi blir tilsvarende

$$\langle H \rangle = \frac{1}{Z_1}\left(-\frac{\partial Z_1}{\partial \beta}\right) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_1 = \underline{\underline{-Nh \tanh(\beta h)}}$$

b) $H(\vec{r}, \vec{p})$ er kvadratisk i $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, og det er 3 frihetsgrader som hver gir bidrag $\frac{1}{2}kT$ til midlere energi ifølge ekvipartisjonsprinsippet. Midlere kinetiske energi blir følgelig

$$T_{kin} = 3 \cdot \frac{1}{2} kT = \underline{\underline{\frac{3}{2} kT}}$$

Midlere potensiell energi finner en så ved å midle over posisjonene som er uavhengige av impulsene. Den potensielle energi blir følgelig

$$\langle ar^3 \rangle = \frac{\int ar^3 e^{-\beta a r^3} d\vec{r}}{\varphi} = -\frac{1}{\varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial \beta}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta}(\ln \varphi)$$

der

$$\varphi = \int e^{-\beta a r^3} d\vec{r} = 4\pi \int_0^\infty e^{-\beta a r^3} r^2 dr =$$

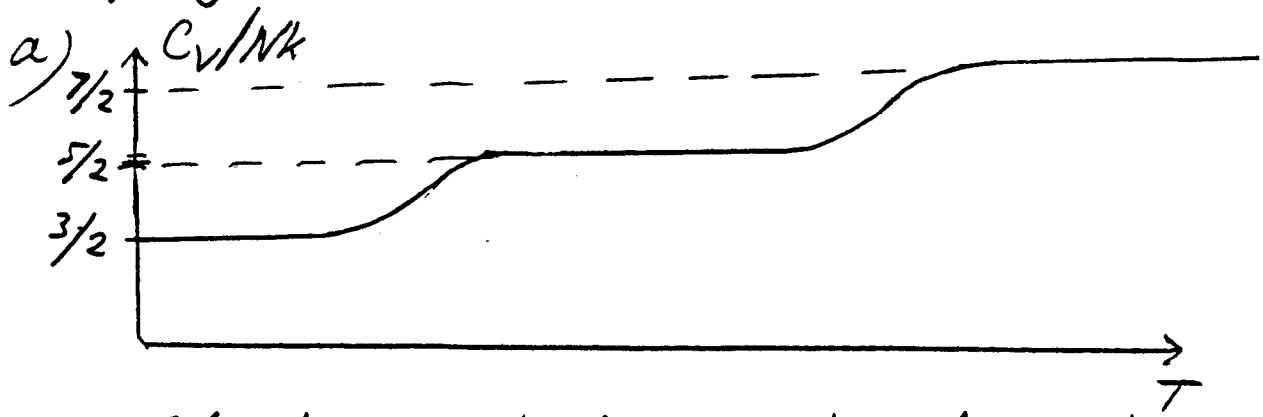
$$\frac{4\pi}{3\beta a}\Big|_0^\infty \left(-e^{-\beta a r^3}\right) = \underline{\frac{4\pi}{3\beta a}}$$

$$\ln \varphi = \ln\left(\frac{4\pi}{3a\beta}\right) = \text{konst.} - \ln \beta$$

$$\langle ar^3 \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta}(\ln \beta) = \frac{1}{\beta} = \underline{\underline{kT}}$$

Oppgave 2

a)



Ved lave T bidrar bare translasjonsbevegelsen i x, y, og z-retningen. Dette gir 3 frihetsgrader pr. molekyl som etter ekvipartisjonsprinsippet for for kvadratiske ledd gir bidraget $\frac{3}{2}kN$ til C_V.

(N er antall molekyl.) Ved økende T vil også de 2 rotasjonsfrihetsgradene for diatomiske molekyl bidra, med et beløp $2 \cdot \frac{1}{2}kN = kN$. Ved enda høyere temperaturer vil også de kvantiserte vibrasjonene langs forbindelseslinjen mellom de 2 atomene bidra. I den klassiske grensen (dvs. $T \to \infty$) gir dette bidraget $2 \cdot \frac{1}{2}kN = kN$ pr.g.a. 2 frihetsgrader fra kvadratisk ledd i energien med både kinetisk og potensiell energi (harmonisk oscillator).

b/ Med 2 ulike atomer i XY molekylet vil det ikke være noen symmetrikrav på bølgefunksjonen til rotasjonsnivåene. Dette betyr igjen at det ikke blir noen restriksjoner på l-kvantetallet, og følgelig vil odde og like verdier av l vektlegges like mye.

Med 2 X-atomer i molekylet vil det bestå av 2 bosoner. Det resulterende molekylet har også totalt kjernespinn lik 0, dvs. bare én spinntilstand. Denne ene spinntilstanden kan bare være symmetrisk da de 2 X-atomene begge har spinn 0. Eller betraktet som en spinnløs partikkel vil spinnkoordinatene falle bort. Uansett vil dermed bare romdelen ha betydning for bølgefunksjonen.

Siden X atomkjernene er bosoner må følgelig bølgefunksjonen (romdelen) være symmetrisk. Dette innebærer at bare like verdier av L-kvantetallet vil oppstre ($L = 0, 2, 4, \ldots$), mens ulike verdier av L ($L = 1, 3, 5, \ldots$) vil falle ut helt. (Rotasjonsbølgefunksjone (kulefunksjonene) har egenskapene $\psi_L(\vec{r}) = (-1)^L \psi_L(-\vec{r})$ der $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$.)

Med 2 X-atomer vil molekylet bestå av 2 fermioner. Resulterende bølgefunksjon måda være antisymmetrisk. Det totale kjernespinnet gir i alt $2 \times 2 = 4$ tilstander der enten $S = 0$ (singlett) eller $S = 1$ (triplett, $S_z = \pm 1, 0$). Den første er antisymmetrisk i de 2 koordinatene ($\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$) mens den siste er symmetrisk ($\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$). De tilhørende rotasjonsbølgefunksjonene (romdelen) må da være henholdsvis symmetrisk (L = like) eller antisymmetrisk (L = odde). Pågrunn av degenerasjonen i spinnet vil L = partall ha vekt 1 (med $S=0$, singlett) mens L = oddetall vil ha 3 ganger så stor vekt (med $S=1$, triplett).

Oppgave 3.

a) Når $T \leq T_\lambda$ er verdien på det kjemiske potensialet

$$\underline{\underline{\mu = 0}}$$

da dette medfører at $\langle n_i \rangle \to \infty$ når $\varepsilon_i \to 0$ (laveste energi er $\varepsilon_i = 0$), dvs. bosonene kondenserer ut ignumtilstanden

Tettheten av partikler er gitt ved

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \sum_i \langle n_i \rangle = \frac{1}{V} \int_0^\infty g(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$$

$$= C \int_0^\infty \varepsilon^2 \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} d\varepsilon = C(kT)^3 \int_0^\infty \frac{x^2\, dx}{e^{x-\beta\mu}-1}$$

der $x = \beta\varepsilon$ ($dx = \beta\, d\varepsilon$) er innført som ny variabel. Kondensasjon inntreffer når $\mu = 0$. Dette bestemmer $T = T_\lambda$, og en finner sammenhengen

$$\rho = C(kT_\lambda)^3 \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = \underline{\underline{2C(kT_\lambda)^3 \zeta(3)}}$$

b) Den indre energi blir tilsvarende ($x = \beta\varepsilon$)

$$U = \sum_i \varepsilon_i \langle n_i \rangle = \int_0^\infty \varepsilon g(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}$$

$$= VC(kT)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^{x - \beta\mu} - 1}$$

For $T \leq T_\lambda$ er $\mu = 0$ slik at vi finner

$$U = VC(kT)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \underline{\underline{6VC(kT)^4 \zeta(4)}}$$

(Partiklene i grunntilstanden vil ikke bidra til U da $\varepsilon = 0$.)

Spesifikke varme blir nå for $T < T_\lambda$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 24 VC k (kT)^3 \zeta(4)$$

Eliminering av VC ved hjelp av uttrykket for ρ gir så ($\langle N \rangle = \rho V$)

$$C_V = 24 \frac{\langle N \rangle}{2\zeta(3)(kT_\lambda)^3} k (kT)^3 \zeta(4)$$

$$= \underline{\underline{12 k \langle N \rangle \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_\lambda}\right)^3}} = A k \langle N \rangle \left(\frac{T}{T_\lambda}\right)^q$$

Dvs. $A = 12 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)}$ og $q = 3$.