Kontinuasjonseksamen i fag 74315
statistisk mekanikk den 6/8-97.

Forslag til løsning

Oppgave 1.

a) Energien til systemet er $H = -h\sum_{i=1}^{N} s_i + U$ der U er uavhengig av h. Partisjonsfunksjonen er så

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H}$$

Ved å derivere Z, finner en så

$$Z' = \frac{\partial Z}{\partial h} = \sum \beta\left(\sum_{i=1}^{N} s_i\right) e^{-\beta H} = N\beta \sum s_1 e^{-\beta H}$$

$$= N\beta \langle s_1 \rangle Z = N\beta Z m$$

$$m = \frac{1}{N\beta}\frac{Z'}{Z}$$

$$Z'' = \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} = \sum \beta^2 \left(\sum_{i=1}^{N} s_i \sum_{j=1}^{N} s_j\right) e^{-\beta H} = Z\beta^2 \sum_{ij} \langle s_i s_j \rangle$$

En finner så ved derivering av m og innsetting for Z' og Z''

$$\frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{N\beta}\left\{\frac{Z''}{Z} - \left(\frac{Z'}{Z}\right)^2\right\} = \frac{\beta}{N}\sum_{ij} \langle s_i s_j \rangle - N\beta m^2$$

$$= \frac{\beta}{N}\sum_{ij}\left(\langle s_i s_j \rangle - m^2\right) = \frac{\beta}{N}\sum_{ij} \Gamma_{ij} = \underline{\underline{\beta \sum_j \Gamma_{ij}}}$$

som gir fluktuasjonsteoremet med størrelsen $\underline{\underline{a = \beta}}$.
Her har vi benyttet at

$$\Gamma_{ij} = \langle (s_i - m)(s_j - m) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - m\langle s_i \rangle - m\langle s_j \rangle + m^2$$

$$= \langle s_i s_j \rangle - m^2 \qquad \text{da } \langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = m.$$

Videre avhenger Γ_{ij} bare av relativavstanden $\vec{r}_i - \vec{r}_j$ (for store N). En trenger da bare å summere over j. Summering over i gir da bare en enkel faktor N.

b) Har først at $\Gamma_{ii} = \langle (s_i - m)^2 \rangle = \langle s_i^2 \rangle$
$= \langle (\pm 1)^2 \rangle = 1$ da $m = 0$ for $h = 0$

Følgelig må vi ha at $\Gamma_{ii} = c\,u^0 = \underline{\underline{c = 1}}$

Derivering av det gitte uttrykket for m gir (med $x = \beta h$)

$$\frac{\partial m}{\partial h} = \beta \frac{\partial m}{\partial x} = \beta \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\sinh x}{(\sinh^2 x + e^{-4\beta J})^{1/2}}\right] =$$

$$\beta\left[\frac{\cosh x}{(\sinh^2 x + e^{-4\beta J})^{1/2}} - \frac{\sinh^2 x \cosh x}{(\sinh^2 x + e^{-4\beta J})^{3/2}}\right]_{x \to 0} \to \underline{\beta e^{2\beta J}}$$

Fluktuasjonsteoremet gir så

$$\frac{\partial m}{\partial h} = \beta \sum_j \Gamma_{ij} = \beta \sum_n u^{|n|} = \beta\Big(1 + 2\sum_{n=1,2,3,\dots} u^n\Big)$$

$$= \beta\left(1 + 2\frac{u}{1-u}\right) = \beta \frac{1+u}{1-u}$$

Likhet betyr følgelig

$$\frac{1+u}{1-u} = e^{2\beta J}$$

som løst gir

$$1 + u = (1-u)e^{2\beta J}$$

$$(e^{2\beta J} + 1)\,u = e^{2\beta J} - 1$$

$$u = \frac{e^{2\beta J} - 1}{e^{2\beta J} + 1} = \frac{e^{\beta J} - e^{-\beta J}}{e^{\beta J} + e^{\beta J}} = \underline{\underline{\tanh(\beta J)}}$$

Oppgave 2.

a) Ved å benytte kontinuitetslikningen sammen med Hamiltons likninger finner en

$$0 = \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_i}(\dot{q}_i w) + \frac{\partial}{\partial p_i}(\dot{p}_i w) = \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_i}(\underbrace{\dot{q}_i}_{\partial H/\partial p_i}) w$$

$$+ \underbrace{\dot{q}_i \frac{\partial w}{\partial q_i}} + \frac{\partial}{\partial p_i}(\underbrace{\dot{p}_i}_{-\partial H/\partial q_i}) w + \underbrace{\dot{p}_i \frac{\partial w}{\partial p_i}} = \underbrace{\frac{dw}{dt}}$$

$$\underbrace{+ \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\right) w + \frac{\partial}{\partial p_i}\left(-\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) w}_{=0} = \underline{\underline{\frac{dw}{dt}}}$$

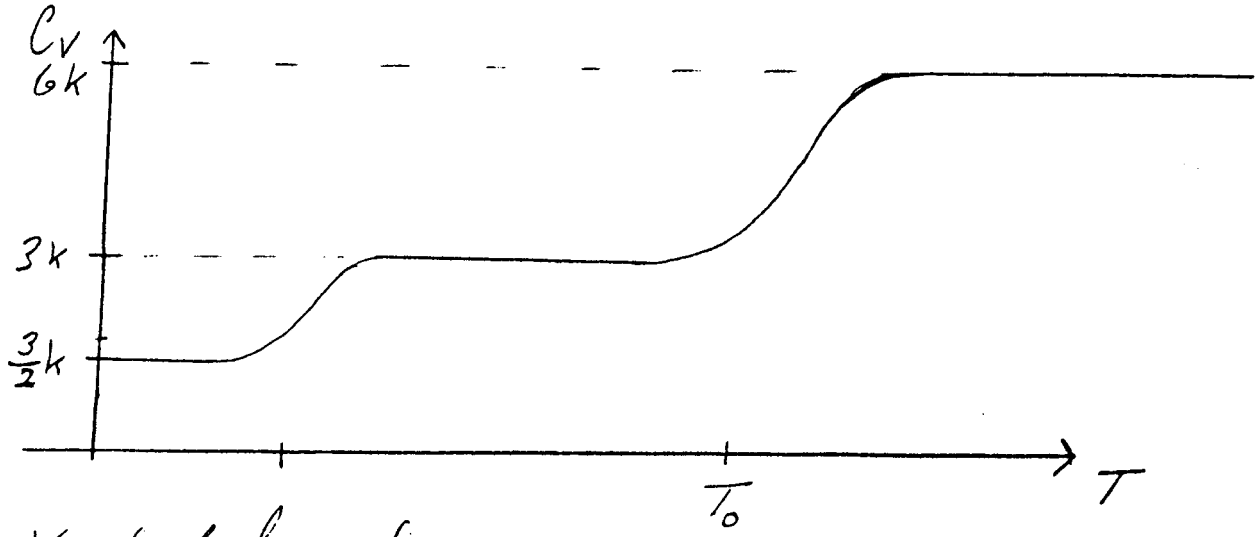
b) Ved å sette inn $w = e^{-\beta H}$ i likningen for $\frac{dw}{dt}$ finner en

$$\frac{dw}{dt} = \frac{\partial}{\partial t}(e^{-\beta H}) + \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i}(e^{-\beta H}) + \dot{p}_i \frac{\partial}{\partial p_i}(e^{-\beta H}) =$$

$$0 + \frac{\partial H}{\partial p_i}(-\beta)\frac{\partial H}{\partial q_i} e^{-\beta H} + \left(-\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)(-\beta)\frac{\partial H}{\partial p_i} e^{-\beta H} = \underline{\underline{0}}$$

Dvs. den kanoniske fordingen er løsning av likningen $dw/dt = 0$ (med $\partial H/\partial t = 0$ forutsatt).

Oppgave 3.



Kvalitativ skisse av varmekapasiteten C_v pr. molekyl.

Ved lave temperaturer bidrar kun translasjonsbevegelsen til molekylet. Dette gir 3 frihetsgrader (x, y, og z-retning). Etter ekvipartisjonsprinsippet (for kvadratiske ledd i Hamiltonfunksjonen) gir hver frihetsgrad et bidrag $\frac{1}{2}k$ til spesifikke varme (der k er Boltzmanns konstant). Følgelig gir translasjonen et bidrag $C_{tr} = 3\frac{1}{2}k = \underline{\underline{\frac{3}{2}k}}$.
Rotasjon om 3 akser gir 3 frihetsgrader og bidraget til spesifikke varme blir følgelig $C_{rot} = 3\frac{1}{2}k = \underline{\underline{\frac{3}{2}k}}$.
P.g.a. av kvantemekaniske effekter er dette bidraget frosset ut ved lave temperaturer. Vibrasjonene, som også er frosset ut ved lave temperaturer gir bidraget $C_v = 3 \cdot 2\frac{1}{2}k = \underline{\underline{3k}}$ ved høye temperaturer. 3 oscillatorer som hver har 2 frihetsgrader (kvadratiske ledd i både potensiell og kinetiske energi), gir 6 frihetsgrader.

Oppgave 4.

Siden D-atomene er bosoner må den resulterende bølgefunksjone for de 2-atomene i D_2-molekylet være symmetrisk i de 2 partikkelkoordinatene. Følgelig vil symmetrisk rombølgefunksjon høre sammen med symmetrisk spinnbølgefunksjon, og antisymmetrisk rombølgefunksjon vil høre sammen med antisymmetrisk spinnbølgefunksjon. Da like verdier av kvantetallet l gir symmetrisk rombølgefunksjon mens odde verdier av l gir antisymmetrisk rombølgefunksjon er det klart at

like l ($l=0,2,4,\ldots$) høyer sammen med $S_t=0,2$
odde l ($l=1,3,5,\ldots$) — " — $S_t=1$

Med den gitte degenerasjonsgrad for S_t følger det da at vektleggingen av like l gir en faktor $1+5=\underline{\underline{6}}$ mens odde l gir en faktor $\underline{\underline{3}}$.

Partisjonsfunksjonen for et slik molekyl blir følgelig

$$Z = 6\sum_{l=0,2,4,\ldots} e^{-\beta\frac{\hbar}{2I}l(l+1)} + 3\sum_{l=1,3,5,\ldots} e^{-\beta\frac{\hbar}{2I}l(l+1)}$$

Oppgave 5.

Partisjonsfunksjonen for den ene partikkelen blir

$$Z = 4\pi \int_0^\infty e^{-\beta a r^\alpha} r^2 dr$$

Ny integrasjonsvariabel $u = r\beta^{1/\alpha}$ eller $r = u\beta^{-1/\alpha}$ og $dr = du\,\beta^{-1/\alpha}$ gir så

$$Z = 4\pi \frac{1}{\beta^{3/\alpha}} \int_0^\infty e^{-au^\alpha} u^2 du = \underline{\frac{\text{const}}{\beta^{3/\alpha}}}$$

$$\ln Z = \text{const.} - \frac{3}{\alpha}\ln\beta$$

Indre energi blir da

$$U = \langle r^\alpha \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{3}{\alpha\beta} = \underline{\frac{3}{\alpha}kT}$$

slik at bidraget til spesifikk varme fra den potensielle energien blir

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \underline{\underline{\frac{3}{\alpha}k}}$$