

TENTAMEN STATISTICAL PHYSICS 1

(College Dr. P.J.H. Denteneer, najaar 2018)

19 december 2018

14:00-17:00 uur

Schrijf op elk vel dat je inlevert NAAM, VOORLETTERS en STUDENTNUMMER.

Aanwijzingen: **Het tentamen bestaat uit 3 opgaven. Lees de opgaven zorgvuldig! Begin de uitwerking van elke opgave op een nieuwe pagina. Doe langere berekeningen eerst op kladpapier en neem ze dan over op het tentamenpapier. Geef bij berekeningen duidelijk de verschillende stappen weer.**

Met elk onderdeel is 3 punten te verdienen; in totaal maximaal 54 punten.

Bedenk dat gedeeltelijk correcte antwoorden ook punten op kunnen leveren.

Opgave 1 (*Kennis van en inzicht in de statistische fysica*)

Geef kort en bondig antwoord op de volgende vragen of opdrachten (er wordt in deze opgave niet om uitgebreide argumentaties of berekeningen gevraagd):

- (a) Welke
- thermodynamische potentiaal*
- X
- hangt als volgt samen met de
- partitiefunctie*
- Z
- :

$$Z = e^{-\beta X} \quad ? \quad \left(\beta \equiv \frac{1}{k_B T} \right)$$

- (b) De entropie van een klassiek
- ideaal gas*
- wordt gegeven door:

$$S(E, V, N) = k_B N \left[c \ln \left(\frac{E}{N} \right) + d \ln \left(\frac{V}{N} \right) + X \right] ,$$

waarin c en d numerieke constanten (getallen) zijn en X een willekeurige constante. Wat is de constante c ?

- (c) De entropie van een klassiek
- idioot gas*
- wordt gegeven door:

$$S(E, V, N) = A \left(\frac{NE}{V} \right)^{\frac{2}{3}} ,$$

met A een willekeurige constante. Is de entropie van dit gas *extensief*? Beargumenteer je antwoord.

- (d) Hoeveel dimensies heeft de
- faseruimte*
- van
- twee methaanmoleculen**
- ? Beargumenteer je antwoord. (chemische formule van een methaanmolecuul:
- CH_4
-)

- (e) Uit de differentiaalvorm van de fundamentele thermodynamische relatie voor de
- enthalpie*
- $H(S, P, N)$
- ,
- $dH = TdS + VdP + \mu dN$
- , kan de volgende
- Maxwellrelatie*
- worden afgeleid:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_X = \left(\frac{\partial Y}{\partial Z} \right)_S$$

Welke *toestandsvariabelen* zijn respectievelijk X , Y en Z ?

Z.O.Z.

Opgave 2 (Ideaal gas in een harmonische-zwaartekracht potentiaal)

We beschouwen een ideaal gas van N identieke, **onafhankelijke** moleculen in een rechthoekige kolom. Het gas is in **thermisch** en **mechanisch evenwicht** bij temperatuur T en de moleculen zijn onderhevig aan een (fictieve) *harmonische-zwaartekracht* potentiaal: $V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2 z^2$, waarin m de molecuulmassa en ω een (hoek)frequentie. De kolom strekt zich in zowel de x - als de y -richting uit over een lengte L en is in de z -richting onbeperkt, $z \in [0, \infty)$. Gegeven is de partitiefunctie Z voor een systeem van N deeltjes:

$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^3 \vec{p}_1 \dots \int d^3 \vec{p}_N \int d^3 \vec{r}_1 \dots \int d^3 \vec{r}_N e^{-\beta H(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)},$$

met $H(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ de Hamiltonfunctie voor N deeltjes.

($d^3 \vec{r} = dx dy dz$, $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$, $d^3 \vec{p} = dp_x dp_y dp_z$, $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, $\beta = 1/(k_B T)$)

- Druk $Z(T, L, N)$ uit in de partitiefunctie $Z_1(T, L)$ van één molecuul en geef de uitdrukking in de vorm van een (zes-dimensionale) integraal voor $Z_1(T, L)$.
- Laat door een berekening zien dat:

$$Z_1(T, L) = \frac{\zeta m L^2}{\omega h^3} (k_B T)^2,$$

waarin ζ een getal is. Geef de waarde van ζ .

- Bereken de gemiddelde (interne) energie U als functie van T en verklaar je antwoord.
- Je verwacht dat de molecuuldichtheid op hoogte z wordt gegeven door een formule van de vorm:

$$n(z) = \frac{N}{L^2 \ell_z} e^{-\frac{1}{2} \beta m \omega^2 z^2}$$

met ℓ_z een karakteristieke lengte. Laat via een berekening zien dat $\ell_z = C T^\gamma$ en geef de formule voor C en de waarde van γ .

Aanwijzing: $n(z)$ heeft de dimensie lengte^{-3} .

- Welke druk $P(z)$ op hoogte z verwacht je op grond van de ideale gaswet? Zal $P(z)$ in de gegeven zwaartekrachtspotentiaal groter, kleiner, of gelijk zijn aan de druk die je op grond van de ideale gaswet zou voorspellen?
- Bereken een formule voor de gemiddelde fluctuatie in de hoogte-positie z van een molecuul: $\Delta z \equiv \sqrt{\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2}$. Vergelijk je antwoord met het resultaat voor ℓ_z in onderdeel (d).

Opgave 3 (Entropie en magnetisatie in het Ising model)

Beschouw een model voor een (uniaxiale) magneet dat bestaat uit N onafhankelijke magnetische momenten (*spins*) op een rooster in een extern magneetveld ter grootte B , waarbij de spinvariabele σ_j twee waarden kan aannemen: $\sigma_j \in \{-1, 1\}$ ($j = 1, \dots, N$). Dit is het model van *vrije* Ising spins in een magneetveld. Het magnetisch moment van spin j heeft dan de waarde $m_j = \mu_B \sigma_j$, met μ_B een eenheid van magnetisch moment. De Hamiltonfunctie van dit systeem wordt gegeven door:

$$H^{(v)}(\{\sigma_j\}) = -\mu_B B \sum_j \sigma_j$$

- Beargumenteer dat het *gemiddelde* magnetische moment van een individuele spin in een magneetveld bij (willekeurige) temperatuur T **niet** gelijk aan nul is.
- Bereken de partitiefunctie Z en schrijf deze als functie van temperatuur T , magneetveld B en aantal spins N .
- Bereken de entropie S van de magneet als functie van T en B .
Aanwijzing: De *exacte differentiaal* van de (Helmholtz) vrije energie F voor een magneet is: $dF = -SdT - MdB + \mu dN$, met M de *magnetisatie*.
- Schets de grafiek van $S(T)$ voor een willekeurige waarde van $B \neq 0$. Welke waarde heeft de entropie in de limiet $T \rightarrow \infty$?

We breiden het model uit met (ferromagnetische) interacties tussen naburige spins. Dan hebben we het *Ising model*, met de volgende Hamiltonfunctie :

$$H_{\text{Ising}}(\{\sigma_j\}) = H^{(v)}(\{\sigma_j\}) - J \sum_{\langle j,k \rangle} \sigma_j \sigma_k ,$$

waarin $J > 0$ een interactieconstante is en er gesommeerd wordt over **naaste-buurparen** $\langle j,k \rangle$. We kiezen verder het specifieke geval dat de spins een *simpel kubisch rooster* vormen: d.w.z. **elk** van de N spins heeft dezelfde afstand tot een naaste-buurspin in 3 onderling loodrechte richtingen (Oppervlakte-effecten mogen verwaarloosd worden voor grote N).

- Om eenvoudige berekeningen aan dit model te doen maken we de *gemiddelde-veld-benadering* (of: *mean field approximation*). Die kan (ook) als volgt beschreven worden: schrijf de spinwaarde σ_j (voor elke spin) als een gemiddelde σ plus een (kleine) fluctuatie $\delta\sigma_j$ en verwaarloos termen die kwadratisch zijn in fluctuaties. Laat door een berekening zien dat de Hamiltonfunctie in deze benadering gegeven wordt door:

$$H_{\text{GVB}}(\{\sigma_j\}) = E_0 - \mu_B B_{\text{eff}} \sum_j \sigma_j$$

en geef formules voor E_0 en B_{eff} .

- Bepaal $F(T, B)$ voor het Ising model in de gemiddelde-veld-benadering.
- Geef aan hoe je uit het resultaat van (f) en de aanwijzing bij (c) de *magnetisatie* M , het (gemiddelde) totale magnetische moment van het systeem ($M = \langle \sum_j m_j \rangle$), kunt bepalen. Gebruik dit om de (*zelf-consistentie*) vergelijking voor de gemiddelde spinwaarde σ te vinden in het geval $B = 0$.