

UITWERKING TENTAMEN
STATISTISCHE EN THERMISCHE FYSICA 1
11 juni 2003

- 1) (Andere antwoorden zijn niet noodzakelijk incorrect)
- (a) De entropie S is in het microkanoniek ensemble in evenwicht **maximaal**.
 - (b) De *fase-ruimte* is de hoog-dimensionale ruimte opgespannen door de variabelen (of: vrijheidsgraden) in een fysisch systeem (bv. de posities en impulsen van alle deeltjes). De fase-ruimte voor N zuurstof (O_2) moleculen is $12N$ -dimensionaal (twee maal 6 vrijheidsgraden per molecuul; 6 per atoom: 3 voor de positie(vector) en 3 voor de impuls(vector)).
 - (c) (zie bv. Fig. 4.4 in "Garrod")
 - (d) De druk is **hoger** in een ideaal gas van fermionen; het Pauli-principe is effectief een afstoting tussen de fermionen die aanleiding geeft tot meer botsingen en impulsoverdracht met de wand van de container waarin het gas zich bevindt, d.w.z. hogere druk.
 - (e) *Bose-Einstein condensatie* is macroscopische (d.w.z. van de orde van de totale dichtheid) bezetting van de laagste energie-toestand.
- 2) (a) $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$, met $\beta = 1/k_B T$, k_B : constante van Boltzmann, T : temperatuur, n : label voor toestanden en E_n : energie van toestand n .
- (b)

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n E_n^2 e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

$$\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \dots = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}$$

- (c) Merk op dat er een direct verband is tussen het aantal fotonen n in een mode en de energie van die toestand: $E_n = n\hbar\omega$. Er geldt dus: $\langle E \rangle = \langle E_n \rangle = \langle n \rangle \hbar\omega$.
Oplossing: Kanonieke toestandssom

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar \omega} = \frac{1}{1 - \exp(-\beta \hbar \omega)}$$

$$\langle n \rangle = \frac{\langle E \rangle}{\hbar \omega} = \frac{1}{\hbar \omega} \left(-\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1}$$

(de Planck verdeling).

[Een alternatieve oplossing is het groot-kanoniek ensemble te gebruiken met de affiniteit gelijk aan nul genomen.]

(d) Via onderdelen (b) en (c):

$$\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} = -\frac{1}{\hbar\omega} \frac{\partial}{\partial \beta} (\langle n \rangle) = \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2}$$

Standaarddeviatie:

$$\sqrt{\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle} = \frac{e^{\beta\hbar\omega/2}}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

- (e) De standaarddeviatie is een factor $\exp(\beta\hbar\omega/2)$ (die altijd groter dan 1 is) *groter* dan het gemiddeld aantal fotonen $\langle n \rangle$ in de mode (hetgeen opmerkelijk genoemd mag worden).
- 3) (a) Energieverschil tussen een compacte en gestrekte monomeer is: $\tau(\ell_g - \ell_c)$. Neem de situatie met allemaal gestrekte monomeren als nulpunt van energie; dan geldt voor de energie van de toestand met N_c compacte monomeren: $E = N_c\tau(\ell_g - \ell_c)$. Substitueer $N_c\ell_c = L - N_g\ell_g$ (hetgeen volgt uit de gegeven uitdrukking voor L) in E ; dan geldt:

$$E = \tau(N_c\ell_g - L + N_g\ell_g) = \tau(N\ell_g - L)$$

- (b) Elke monomeer kan onafhankelijk van de anderen in 2 toestanden zijn: 1) “gestrekt”, energie $\varepsilon_1 = 0$, 2) “compact”, energie $\varepsilon_2 = \tau(\ell_g - \ell_c) \equiv \varepsilon$. Kanonieke toestandssom:

$$Z_N = (Z_1)^N = \left(\sum_{i=1}^2 e^{-\beta\varepsilon_i} \right)^N = (1 + e^{-\beta\varepsilon})^N$$

Uit (a) volgt: $\langle L \rangle = N\ell_g - \langle E \rangle / \tau$. Er geldt:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\log Z_N) = \frac{N\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} + 1},$$

zodat:

$$\langle L \rangle = N\ell_g - \frac{N(\ell_g - \ell_c)}{\exp[\tau(\ell_g - \ell_c)/k_B T] + 1}$$

(als functie van temperatuur T en spanning τ)

- (c) $T \rightarrow 0$: $\langle L \rangle \rightarrow N\ell_g$

$$T \rightarrow \infty$$

$\langle L \rangle \rightarrow \frac{1}{2}N(\ell_g + \ell_c)$
 Voor $T \rightarrow 0$ zoekt het systeem de toestand van laagste energie, d.w.z. alle monomeren gestrekt (ofwel: er is geen thermische energie beschikbaar om ze compact te doen worden). Voor $T \rightarrow \infty$ wordt het energieverschil tussen “compact” en “gestrekt” verwaarloosbaar t.o.v. $k_B T$ en dus komen de beide toestanden evenveel voor ($N_c = N_g = N/2$).

[Alternatief: het relatieve voorkomen van ℓ_c en ℓ_g zal evenredig zijn met $\exp(-\beta\varepsilon_2)/\exp(-\beta\varepsilon_1) = \exp(-\beta\varepsilon)$; voor $T \rightarrow 0$ gaat dit naar nul (d.w.z. alleen ℓ_g komt voor), voor $T \rightarrow \infty$ gaat dit naar 1 (d.w.z. ℓ_g en ℓ_c komen even vaak voor.)]

- 4) (a) Vanwege het bereik van de componenten van \vec{k} is $\varepsilon(\vec{k})$ maximaal $6t$ en minimaal $-6t$. De toestandsdichtheid $D(\varepsilon)$ zal dus gelijk aan nul zijn (d.w.z. geen toestanden met die energie) indien $|\varepsilon| > 6t$: $E_0 = 6t$.
- (b) Dichtheid n en magnetisatie m zijn, respectievelijk, de **som** en het **verschil** van de dichtheden van elektronen met “spin omhoog” en met “spin omlaag”. Deze laatste dichtheden zijn te schrijven als integralen over energie van het product van toestandsdichtheid (aantal toestanden met die energie) en een Fermi-Dirac verdeling (gemiddelde bezetting van die energietoestand). In de FD-verdeling dient de chemische potentiaal (μ_+ of μ_-) gebruikt te worden die van toepassing is.

$$n = \frac{1}{N_p} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) \left[\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_+}{k_B T}\right)} + \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_-}{k_B T}\right)} \right]$$

$$m = \frac{1}{N_p} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon D(\varepsilon) \left[\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_+}{k_B T}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_-}{k_B T}\right)} \right]$$

- (c) Voor $T = 0$ wordt de uitdrukking voor m uit (b):

$$m = \frac{1}{N_p} \int_{-6t}^{\mu_+} d\varepsilon D(\varepsilon) - \frac{1}{N_p} \int_{-6t}^{\mu_-} d\varepsilon D(\varepsilon) = \frac{1}{N_p} \int_{\mu_-}^{\mu_+} d\varepsilon D(\varepsilon) .$$

Na substitutie van de aanname, $\mu_+ - \mu_- = mU$, is de vergelijking waar m aan moet voldoen:

$$m = \frac{1}{N_p} \int_{\mu_-}^{\mu_- + mU} d\varepsilon D(\varepsilon) .$$

Merk op dat het rechterlid een stijgende functie is van m (want $D(\varepsilon)$ is altijd positief). Vat linker- en rechterlid op als functie van m ; er kan alleen een snijpunt $m^* \neq 0$ zijn (grafiek) indien het rechterlid een afgeleide bij $m = 0$ heeft die groter of gelijk aan 1 is (denk aan de gegeven aanwijzing!). De gevraagde minimale U is die waarvoor de afgeleide precies 1 is:

$$\frac{d}{dm} \left(\frac{1}{N_p} \int_{\mu_-}^{\mu_- + mU} d\varepsilon D(\varepsilon) \right)_{m=0} = \frac{1}{N_p} U D(\mu_-) \implies \boxed{U_{\min} = N_p D^{-1}(\mu_-)}$$