Uitwerking Hertentamen Statistische en Thermische Fysica I
Maandag 18 augustus 2008

OPGAVE 1: *Weetjes*

a) De kans om n keer een '6' te gooien in N worpen met een dobbelsteen bedraagt

$$P_{n,N} = \binom{N}{n}\left(\frac{1}{6}\right)^n \left(\frac{5}{6}\right)^{N-n} .$$

b) De *'wet van de grote getallen'* kan geschreven worden als

$$\Delta x = a/\sqrt{N} ,$$

waarbij Δx de onzekerheid (rms variatie) is in het gemiddelde van N bepalingen van een grootheid die verdeeld is met een breedte a. Dit betekent dat elk gemiddelde steeds beter bepaald wordt naarmate het ensemble (N) groter wordt, zodat de macroscopische ensembles uit de statistische mechanica zeer scherp bepaalde gemiddelde eigenschappen vertonen met zeer kleine fluctuaties.

c) De Maxwell-verdeling voor de x-componenten v_x van de snelheden van deeltjes met een massa m bij temperatuur T luidt

$$P(v_x) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{m v_x^2}{2k_B T}\right) .$$

Hierbij is k_B de constante van Boltzmann. De meest waarschijnlijke snelheid v_x in de x-richting is … nul!

d) De bezettingsgraad van toestanden met energie ε voor een ensemble van bosonen bij temperatuur T kan geschreven worden als

$$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon} - 1} .$$

Hierbij is α de affiniteit van de bosonen en is β de inverse temperatuur ($\beta = 1/k_B T$).

e) Voor het canonieke ensemble liggen het volume V, het aantal deeltjes N en de temperatuur T (of de inverse temperatuur β) vast. De geconjugeerde grootheden, namelijk de affiniteit α, de energie E en de coëfficiënt van vrije expansie γ hebben de vrijheid om te fluctueren.

f) De groot-canonieke potentiaal $\psi(\alpha,\beta,V)$ kan geschreven worden als

$$\psi(\alpha,\beta,V) = S^0 - \alpha N - \beta E ,$$

waarbij S^0 de entropie is, α de affiniteit, β de inverse temperatuur, N het aantal deeltjes en E de energie.

OPGAVE 2: *Stappen en kinken*

a) Op elke positie langs de stap zijn er drie mogelijkheden: (1) geen kink, (2) kink naar links en (3) kink naar rechts. De partitiefunctie die hiermee overeenkomt, bedraagt

$$Z_1 = 1 + 2\exp(-E_k/k_B T) ,$$

waarbij het subscript '1' slaat op het feit dat dit de partitiefunctie is voor één positie langs de staprand.

b) De kans voor een kink naar links bedraagt

$$P_{links} = \exp\left(-E_k/k_BT\right)/Z_1 \ .$$

Uiteraard is de kans voor een kink naar rechts precies even groot, $P_{rechts} = P_{links}$, en is de kans voor een kink, ongeacht de richting van die kink, gelijk aan

$$P_{kink} = P_{links} + P_{rechts} = 2\exp\left(-E_k/k_BT\right)/Z_1 \ .$$

c) Op elk van de N stapposities zijn er 3 mogelijkheden, zodat het totale aantal configuraties gelijk is aan 3^N. Omdat de keuze *(links, rechts, rechtdoor)* op elke stappositie onafhankelijk is van de keuzes op alle andere posities, is de partitiefunctie voor de gehele stap eenvoudig gelijk aan

$$Z_N = \left(Z_1\right)^N = \left[1+2\exp\left(-E_k/k_BT\right)\right]^N \ .$$

d) De kans op een totaal aantal van K kinken in deze stap, ongeacht hun richting is gelijk aan

$$\binom{N}{K}\left(P_{kink}\right)^K\left(1-P_{kink}\right)^{N-K} = \frac{N!}{K!\left(N-K\right)!}\frac{2^K\exp\left(-KE_k/k_BT\right)}{\left[1+2\exp\left(-E_k/k_BT\right)\right]^N} \ ,$$

waarbij de binomiaalcoëfficiënt het aantal configuraties telt met K gekinkte posities op een lengte van N stapposities.

e) Als meervoudige kinken worden toegelaten, dan zijn er per stappositie oneindig veel mogelijkheden, $-\infty < L < \infty$, waarbij L de grootte is van de verspringing (negatief naar links en positief naar rechts). De bijbehorende partitiefunctie voor een individuele stappositie is dan

$$Z_1 = \sum_{L=-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\left|L\right|E_k/k_BT\right) = 2\sum_{L=0}^{+\infty}\exp\left(-LE_k/k_BT\right) - 1 \ .$$

Dit kunnen we verder vereenvoudigen tot

$$Z_1 = \frac{2}{1-\exp\left(-E_k/k_BT\right)} - 1 = \frac{1+\exp\left(-E_k/k_BT\right)}{1-\exp\left(-E_k/k_BT\right)} = \coth\left(\tfrac{1}{2}E_k/k_BT\right) \ .$$

f) De kans voor elke stappositie op een kink naar rechts met diepte van L atoomposities is gelijk aan

$$P_L = \frac{\exp\left(-LE_k/k_BT\right)}{Z_1} = \exp\left(-LE_k/k_BT\right)\tanh\left(\tfrac{1}{2}E_k/k_BT\right) \ .$$

<u>OPGAVE 3: *Elektronen en spontane magnetisatie*</u>

a) De maximale en minimale waarden van de energie $\varepsilon\left(\vec{k}\right)$ zijn $\pm 6t$. De minimale waarde van $-6t$ wordt aangenomen voor $\vec{k}=0$, dus in de limiet voor heel grote golflengte. De toestandsdichtheid $D\left(\varepsilon\right)$ is juist heel groot (divergent) voor de waarden van k_x, k_y en k_z, waar een of meer van de cosinustermen maximaal of minimaal is.

b) De totale elektronendichtheid $n = N_e/N_p$ en de magnetisatie m (gemiddelde spin per roosterpositie) zijn respectievelijk de som en het verschil van de dichtheden van elektronen met omhoog gerichte spin en elektronen met omlaag gerichte spin. Elk van deze dichtheden volgt een eigen Fermi-Dirac verdeling:

$$n_{\pm} = \frac{1}{N_p}\int_{-\infty}^{+\infty} D\left(\varepsilon\right) f_{\pm}^{FD}\left(\varepsilon\right) d\varepsilon \ ,$$

waarbij

$$f_{\pm}^{FD} = 1 \big/ \left[\exp\left(\left(\varepsilon - \mu_{\pm} \right) / k_B T \right) + 1 \right] \; .$$

Hieruit vinden we

$$n = \frac{1}{N_p} \int_{-6t}^{+6t} D(\varepsilon) \left[\frac{1}{\exp\left(\left(\varepsilon - \mu_+ \right) / k_B T \right)} + \frac{1}{\exp\left(\left(\varepsilon - \mu_- \right) / k_B T \right)} \right] d\varepsilon$$

$$m = \frac{1}{N_p} \int_{-6t}^{+6t} D(\varepsilon) \left[\frac{1}{\exp\left(\left(\varepsilon - \mu_+ \right) / k_B T \right)} - \frac{1}{\exp\left(\left(\varepsilon - \mu_- \right) / k_B T \right)} \right] d\varepsilon$$

c) Bij $T = 0$ neemt de Fermi-Dirac verdeling de eenvoudige vorm aan van een stapfunctie, zodat de magnetisatie gegeven wordt door

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

d) We combineren het resultaat van c) met de gegeven aanname dat voor een infinitesimale beginwaarde van de magnetisatie δm geldt dat $\mu_+ - \mu_- = \delta\mu = U \delta m$. De door dit verschil in chemische potentiaal veroorzaakte magnetisatie m is gelijk aan

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

Als deze, resulterende magnetisatie m groter is dan de beginwaarde δm, dan is ons systeem instabiel voor de allerkleinste fluctuaties vanuit een ongemagnetiseerde begintoestand $m = 0$ en zal het spontaan magnetiseren. Dus

$$m > \delta m \quad \Rightarrow \quad \frac{D(\mu_-) U \delta m}{N_p} > \delta m \quad \Rightarrow \quad U > \frac{N_p}{D(\mu_-)} \; .$$

(in plaats van μ_- hadden we hier ook μ_+ mogen gebruiken of de uitgangswaarde van de chemische potentiaal μ in afwezigheid van magnetisatie)