**Uitwerking Tentamen Statistische en Thermische Fysica I**
**Donderdag 5 juni 2008**

OPGAVE 1: *Ideaal gas onder druk*

a) De Hamiltoniaan van het gassysteem is $H = \frac{p_0^2}{2M} + Mgz_0 + \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m}$

b) Omdat de temperatuur hier constant is en het aantal deeltjes niet kan variëren kan het systeem beschreven worden met het canonieke ensemble. De waarschijnlijkheid voor een specifieke configuratie van het systeem bedraagt $P(z_0, p_0, \vec{r}_1, \vec{p}_1, .., \vec{r}_N, \vec{p}_N) = \exp(-\beta H)/I$, waarbij $H$ gegeven wordt door de uitdrukking bij a) en de partitiefunctie $I$ de integraal is van $\exp(-\beta H)$ over alle toegestane configuraties. Een complicerend aspect hierbij is dat de ruimte die voor de gasdeeltjes beschikbaar is in de $z$-richting afhangt van de positie $z_0$ van de zuiger (zie volgende onderdeel).

c) De partitiefunctie is

$$I = \int_0^\infty dz_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 \int_A dx_1 dy_1 \int_0^{z_0} dz_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}_1 ... \int_A dx_N dy_N \int_0^{z_0} dz_N \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}_N e^{-\beta H}$$

$$= A^N \int_0^\infty dz_0\, z_0^N e^{-\beta M g z_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_0 e^{-\beta p_0^2/2M} \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}_1 e^{-\beta p_1^2/2m} ... \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}_N e^{-\beta p_N^2/2m}$$

$$= A^N \left(\frac{2\pi M}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}N} \int_0^\infty dz_0\, z_0^N e^{-\beta M g z_0}$$

$$= A^N \left(\frac{2\pi M}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}N} \frac{N!}{(\beta M g)^{N+1}}$$

Bij de laatste stap is gebruik gemaakt van de bij het tentamen meegeleverde ‘standaard’-formules.

d) De waarschijnlijkheidsverdeling van de zuigerhoogte vinden we door de bij b) afgeleide waarschijnlijkheid te integreren over alle coördinaten, behalve de zuigerpositie $z_0$:

$$P(z_0) = I^{-1} A^N \left(\frac{2\pi M}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}N} z_0^N e^{-\beta M g z_0}$$

$$= \frac{(\beta M g)^{N+1}}{N!} z_0^N e^{-\beta M g z_0}$$

e) De meest waarschijnlijke hoogte vinden we als het maximum van $P(z_0)$:

$$\frac{d}{dz_0} P(z_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad N z_0^{N-1} e^{-\beta M g z_0} - \beta M g z_0^N e^{-\beta M g z_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad z_0^* = \frac{N}{\beta M g} = \frac{NkT}{Mg}$$

OPGAVE 2: *Alternatieve ensembles*

a) De microcanonieke potentiaal is de entropie: $S^0 = \ln\Omega(N,E,V)$. De canonieke potentiaal is $\phi = \phi(N,\beta,V) = S^0 - \beta E$, waarbij $\beta = \partial S^0/\partial E$ de inverse temperatuur is en $E$ staat voor de gemiddelde energie $\bar{E}$.

b) Bij de transformatie van het microcanonieke ensemble naar het canonieke ensemble stappen we over van de instelbare variabelen $(N,E,V)$ naar $(N,\beta,V)$. Bij de transformatie tussen het canonieke ensemble en het groot-canonieke ensemble wordt op zijn beurt het aantal deeltjes $N$ vrijgelaten en wordt deze variabele vervangen door de affiniteit $\alpha = \partial S^0/\partial N$. Als we $N$ vasthouden en het volume $V$ vrijlaten, vervangen we deze laatste variabele door de derde afgeleide van de entropie $\gamma = \partial S^0/\partial V = \beta p$, waarbij $p$ de druk is. De drie variabelen waar we op uitkomen in het laatste ensemble zijn dus $(N,\beta,\gamma)$ ofwel $(N,p,T)$. In analogie met de spelregels voor de canonieke en groot-canonieke ensembles mag je verwachten dat de potentiaal voor het $(N,p,T)$-ensemble de vorm heeft: $\xi = S^0 - \beta E - \gamma V$, waarbij $V$ voor het gemiddelde volume $\bar{V}$ staat.

c) $P_V(z_1,..,z_N) = \dfrac{1}{h^{3N}N!}e^{-\beta H(z_1,..,z_N)} \cdot \dfrac{1}{h^{3N_R}N_R!}\int e^{-\beta H_R} d^6z_{N+1}..d^6z_{N_T} \cdot \dfrac{1}{Z_T}$. Hierbij staan $H$ en $H_R$ respectievelijk voor de Hamiltoniaan van het $N$-deeltjes systeem en dat van de rest van het totaalsysteem (het reservoir) met $N_R = N_T - N$ deeltjes. De integratie over ruimtelijke coördinaten vindt plaats voor alle $N_R$ reservoir-deeltjes over een gebied ter grootte $V_T - V$, waarbij $V_T$ het totale volume is en $V$ het volume van het $N$-deeltjes systeem. $Z_T$ is de canonieke partitiefunctie van het totaalsysteem.

d) Het tweede deel van de uitdrukking in c) hangt af van het volume $V$, omdat de posities van de $N_R$ reservoir-deeltjes altijd buiten dit volume moeten liggen. Dit gedeelte kan herschreven worden in termen van de canonieke potentiaal voor het reservoir als

$$\frac{1}{h^{3N_R}N_R!}\int e^{-\beta H_R} d^6z_{N+1}..d^6z_{N_T} = \exp\left[\phi(N_R,\beta,V_R)\right] = \exp\left[\phi(N_R,\beta,V_T - V)\right].$$

De gesuggereerde 1^e^-orde benadering luidt

$$\phi(N_R,\beta,V_T - V) = \phi(N_R,\beta,V_T) - \left.\frac{\partial\phi}{\partial V}\right|_{V_T} V = \phi(N_R,\beta,V_T) - \left.\frac{\partial S^0}{\partial V}\right|_{V_T} V = \phi(N_R,\beta,V_T) - \gamma V.$$

Hiermee vinden we dat $P_V(z_1,..,z_N) = \dfrac{1}{\Gamma}\exp\left[-\beta H(z_1,..,z_N) - \gamma V\right]$

In deze uitdrukking zijn alle factoren die niet van het deelvolume $V$ afhangen samengeveegd in de normeringsconstante $\Gamma$, de partitiefunctie voor dit ensemble, die natuurlijk overeenkomt met $\exp(\xi)$. De constante $g$ waarnaar werd gevraagd is gelijk aan de volume-afgeleide van de entropie $\gamma$.

e) Bij het 'groot-kolderiek' ensemble, waarin $(N,E,V)$ vervangen wordt door $(\alpha,\beta,\gamma) = (\alpha,\beta,\beta p)$, zou een thermodynamische potentiaal horen van de vorm

$S^0 - \alpha N - \beta E - \gamma V$. Vanwege de gegeven gelijkheid $S^0 = \alpha N + \beta E + \gamma V$ is deze potentiaal onder alle omstandigheden identiek aan nul, wat uiteraard geen zinvol resultaat is. Wat hier 'fout' gaat is dat de combinatie van de drie vervangingen tot een onderbepaald systeem leidt. Immers elk van de oorspronkelijke grootheden $(N, E, V)$ is extensief (evenredig met $N$), terwijl elk van de geconjugeerde grootheden $(\alpha, \beta, \gamma)$ intensief is. Als we alle drie gelijktijdig vervangen, is de informatie over de grootte van het systeem, bijvoorbeeld het (optimale) aantal deeltjes, geheel verloren gegaan. We mogen dus wel elke combinatie van twee van de drie extensieve grootheden door de bijbehorende intensieve grootheden vervangen maar mogen dat niet met alle drie gelijktijdig doen.

OPGAVE 3: *Ideale klassieke en Fermi-gassen in zwaartekrachtsveld*

a) We gaan uit van de Maxwell-Boltzmann verdeling en vinden daaruit direct de exponentiële hoogteverdeling voor het klassieke, ideale gas:

$$\begin{aligned} n(z) &= C \int e^{-\beta\left[mv^2/2 + mgz\right]} d^3v \\ &= C\, e^{-\beta mgz} \left[\int e^{-\beta m v_x^2/2} dv_x\right]^3 \\ &= n(0) e^{-\beta mgz} \end{aligned}$$

b) Voor de dichtheid van het Fermi-gas bij $T = 0$ geldt: $n = \frac{4}{3}\gamma \varepsilon_F^{3/2}$, waarbij $\varepsilon_F$ de Fermi-energie is en de constante $\gamma$ gegeven wordt door $\gamma = 2\pi\left(2m/h^2\right)^{3/2}$.

c) Dit vormt slechts een schijnbare tegenspraak. Zolang overal de som van de Fermi-energie (kinetische energie van de deeltjes) $\varepsilon_F$ en de potentiële energie $U(z) = mgz$ dezelfde waarde heeft, bevindt de gaskolom als geheel zich in de toestand van minimale, totale energie. Immers, in dat geval kan de totale energie niet worden verlaagd door een deeltje van een hoogte te verplaatsen naar een andere hoogte.

d) Het recept dat we bij c) beredeneerd hebben, luidt: $\varepsilon_F(z) = \varepsilon_F(0) - mgz$. Hieruit volgt direct, met behulp van b) dat de dichtheid verloopt als:

$n = \frac{4}{3}\gamma\left[\varepsilon_F(0) - mgz\right]^{3/2}$.

e) Bij voldoende grote hoogte geldt uiteraard dat $mgz > \varepsilon_F(0)$, zodat de dichtheid op het eerste gezicht imaginair lijkt te worden. Uiteraard moet de dichtheid reëel blijven en bij de hoogte $z = \varepsilon_F(0)/mg$ en hoger is de dichtheid dus domweg nul. Door de vergelijking tussen het klassieke gas bij $T \neq 0$ en het Fermi-gas bij $T = 0$ wordt mogelijk de indruk gewekt dat het klassieke gas onder de zelfde omstandigheden tot grotere hoogte (oneindig) doorloopt dan het quantumgas, maar dit is niet correct. Bij $T = 0$ verzamelen zich *alle* deeltjes van het klassieke gas (en uiteraard ook van een bosonen-gas) bij $z = 0$, terwijl de Pauli-repulsie het Fermi-gas ook bij het absolute nulpunt dwingt om zich over een hoogte tot aan $z = \varepsilon_F(0)/mg$ te verdelen. Bij $T \neq 0$ komt overigens ook het Fermi-gas boven deze grenshoogte uit en blijft de dichtheid ervan minder snel afnemen met de hoogte dan die van het klassieke gas.