

Oppgave 1

For N partikler med impulser $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N$ og posisjoner $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$: Sannsynligheten for å finne systemet i faseelementet $(dp dq) = \prod_{i=1}^N d^3 p_i d^3 r_i$ er $P(dp dq)$, med

$$P = \frac{1}{N! h^{3N}} e^{\beta [F - H(\vec{p}, \vec{q})]}$$

med H = Hamiltonfunksjonen,
 $\beta = 1/kT$,
 k = Boltzmanns konstant
 T = absolutt temperatur
 F = den fri energi

*

Når en koordinat q (eller impulskoordinat) forekommer som et kvadratisk ledd i H : $H = \alpha q^2 + \dots$

fås sannsynlighetsfordelingen av q lik

$$e^{-\alpha \beta q^2} \cdot \text{konstant} = \sqrt{\alpha \beta / \pi} e^{-\alpha \beta q^2}$$

ved normering, og middelverdien av det kvadratiske ledd blir

$$\langle \alpha q^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha q^2 \sqrt{\alpha \beta / \pi} e^{-\alpha \beta q^2} dq = \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} kT,$$

som er det klassiske ekvipartisjonsprinsipp.

*

Når partiklene er uavhengige faktoriseres sannsynlighetsfordelingen

$$P(p, q) = \prod_{i=1}^N P(\vec{p}_i, \vec{r}_i) = \prod_i \text{konst.} e^{-\beta [\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(r_i) - \vec{p}_i \cdot \vec{B}_i]}$$

1. Partikkeltetheten. Når vi bare er interessert i den romlige fordeling har vi

$$P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \text{konst.} \cdot \prod_{i=1}^N e^{-\beta V(r_i)},$$

Sannsynlighetsfordelingen av én partikkel er

$$P(\vec{r}) = C \cdot e^{-\beta V(\vec{r})} = C \cdot e^{-\beta \frac{1}{3} c r^3}$$

Normering: $C^{-1} = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 e^{-\beta \frac{1}{3} c r^3} dr = \left[-\frac{4\pi}{\beta c} e^{-\beta \frac{1}{3} c r^3} \right]_0^{\infty} = \frac{4\pi}{\beta c}$

ders. $P(\vec{r}) = \frac{\beta c}{4\pi} e^{-\beta \frac{1}{3} c r^3}$

Med N partikler fås

$$\underline{\underline{\rho(\vec{r}) = N \frac{c}{4\pi kT} e^{-\frac{c}{3kT} r^3}}}$$

2. Magnetisk moment

Retningsfordelingen for et magnetisk moment $\vec{\mu}$ er

$$P(\vec{\mu}) = \text{konst.} \cdot e^{+\beta \vec{\mu} \cdot \vec{B}} = \text{konst.} \cdot e^{\beta \mu B \cos \vartheta}$$

Av symmetri grunner er $\langle \vec{\mu} \rangle$ rettet langs $\vec{B}$, og størrelsen er

$$\langle \mu \cos \vartheta \rangle = \frac{\int_0^{\pi} \mu \cos \vartheta e^{\beta \mu B \cos \vartheta} d\Omega}{\int_0^{\pi} e^{\beta \mu B \cos \vartheta} d\Omega}, \quad d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

Med $\cos \vartheta = x$ fås

$$\langle \mu \cos \vartheta \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln \int_{-1}^{+1} e^{\beta \mu B x} dx = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln \frac{e^{\beta \mu B} - e^{-\beta \mu B}}{\beta \mu B}$$

$$= \mu \left[\frac{e^{\beta \mu B} + e^{-\beta \mu B}}{e^{\beta \mu B} - e^{-\beta \mu B}} - \frac{1}{\beta \mu B} \right]$$

Med $\xi = \mu B / kT$ fås for $\vec{M} = N \langle \vec{\mu} \rangle$:

$$\underline{\underline{M = N \mu [\coth \xi - \xi^{-1}]}}$$

3. Varmekapasiteten

$$\langle \frac{p^2}{2m} \rangle = 3 \cdot \frac{kT}{2} \quad \text{ved} \quad \text{ekvipartisjonsprinsippet}$$

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle &= \int_0^\infty V(r) P(r) dr = \int_0^\infty \frac{1}{3} cr^3 \frac{\beta c}{4\pi} e^{-\beta \frac{1}{3} cr^3} dr \\ &= \frac{\beta c}{4\pi} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \right) \int_0^\infty e^{-\beta \frac{1}{3} cr^3} dr = \frac{\beta c}{4\pi} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \right) \frac{4\pi}{\beta c} \\ &= -\frac{1}{\beta} = kT \end{aligned}$$

$$\langle \vec{\mu} \cdot \vec{B} \rangle = B \langle \mu \cos \theta \rangle = \mu B [\coth \xi - \xi^{-1}]$$

Middelenergi ved konstant B:

$$U = N \langle \frac{p^2}{2m} + V(r) - \vec{\mu} \cdot \vec{B} \rangle = N \left[\frac{5}{2} kT + \mu B (\coth \xi - \xi^{-1}) \right]$$

$$C_B = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_B = \underline{\underline{Nk \left[\frac{5}{2} + \left(\frac{\xi}{\sinh \xi} \right)^2 \right]}}$$

Oppgave 2

Det store kanoniske ensemble er sannsynligheten for et sett besetnings tall $n_1, n_2, \dots$ gitt ved

$$w(n_1, n_2, \dots) = \frac{\exp[(\sum_i \mu n_i - \sum_i \epsilon_i n_i)/kT]}{\sum_{n_i=0}^\infty \dots}$$

for bosoner ($n_i = 0, 1, 2, \dots$) da $w \sim e^{(\mu N - E)/kT}$ og $N = \sum_i n_i$ og $E = \sum_i \epsilon_i n_i$, $\epsilon_i = \text{enpartikkelnivåer}$.

Det gir

$$\begin{aligned} \langle n_k \rangle &= \sum_{n_k=0}^\infty n_k w(n_1, n_2, \dots) = \frac{\sum_{n_k=0}^\infty n_k e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{kT} n_k}}{\sum_{n_k=0}^\infty e^{\frac{\mu - \epsilon_k}{kT} n_k}} = \frac{\frac{e^{(\mu - \epsilon_k)/kT}}{[1 - e^{(\mu - \epsilon_k)/kT}]^2}}{\frac{1}{1 - e^{(\mu - \epsilon_k)/kT}}} \\ &= \frac{e^{(\mu - \epsilon_k)/kT}}{1 - e^{(\mu - \epsilon_k)/kT}} = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/kT} - 1} \end{aligned}$$

Det $\mu - \epsilon_k < 0$ for alle k da $\mu < 0$

$$\langle n_k - \langle n_k \rangle \rangle^2 = \langle n_k^2 \rangle - \langle n_k \rangle^2 = \frac{1}{e^{\epsilon_k - \mu}/kT} - 1.$$

For et stort system har vi for partikkeltallet

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} \langle n_k \rangle \rightarrow \int_0^{\infty} 2\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} V e^{\frac{\epsilon}{2}} d\epsilon \cdot \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/kT} - 1} \\ &= 2\pi V \left(\frac{2mkT}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^{x - \mu/kT} - 1} \end{aligned}$$

Den maksimale verdi av h.s. er for $\mu=0$, hvoravende

$$\rho = \langle N \rangle / V = 2\pi \left(\frac{2mkT}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} dx = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$$

For en gitt T er dette en maksimal tetthet, omvendt for gitt ρ er dette den minimal temperatur,

$$T_\lambda = \frac{h^2}{2\pi mk} \left[\frac{\rho}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3},$$

som synes mulig. Ved lavere T "kondenseres" partikler ut i grunn tilstanden, og $\mu \approx 0$.

Varmekapasiteten

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V,$$

med $U = \sum_k \epsilon_k \langle n_k \rangle \rightarrow \int_0^{\infty} 2\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} V \epsilon^k d\epsilon \frac{\epsilon}{e^{\epsilon - \mu}/kT - 1}.$

idet partiklene i grunn tilstanden har forsvunnet energi. For $T \leq T_\lambda$ er $\mu=0$ som gir (med $\epsilon=kTx$)

$$U = 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} (kT)^{5/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1}$$

$$= \frac{3V}{2} \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{3/2} (kT)^{5/2} \zeta(5/2), \text{ og}$$

$$C_V = \frac{15}{4} V k \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \zeta(5/2)$$

