

Løsningsforslag til eksamen høsten 2009

Oppgave 1

a)

$$\begin{aligned} Z &= \int d^3p d^3x \exp\left(-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right) \\ &= \int_V d^3x \left[\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\beta \frac{p^2}{2m}\right) \right]^3 \\ &= V (2\pi mkT)^{3/2} \end{aligned}$$

så

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{Z^N}{h^{3N} N!} \\ &= \left(\frac{\sqrt{2\pi mkT}}{h} \right)^{3N} \frac{V^N}{N!} \\ &= \underline{\underline{C \frac{V^N}{N!}}} \end{aligned}$$

som vi skulle vise, med

$$C = \left(\frac{\sqrt{2\pi mkT}}{h} \right)^{3N}$$

b) Trykket er gitt ved

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

(oppgitt på eksamenssettet), der F er den fri energi:

$$F = -kT \ln Z_N$$

Setter vi inn Z_N fra deloppgave a) får vi

$$F = -NkT \ln V + \text{volumuavhengig}$$

så

$$p = NkT \frac{\partial \ln V}{\partial V} = \frac{NkT}{V}$$

og tilstandslikningen blir lik den ideelle gasslov:

$$pV = NkT$$

c) Vi skal beregne

$$B_2(T) = \frac{1}{2} \int d^3r [1 - e^{-\beta\phi(|\mathbf{r}|)}] \quad (1)$$

(oppgitt på eksamenssettet) der

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & r < d \\ -\varepsilon \left(\frac{d}{r}\right)^6 & r > d \end{cases} \quad (2)$$

Potensialet er sentralsymmetrisk, så vi innfører kulekoordinater og integrerer over vinklene først:

$$\begin{aligned} B_2(T) &= \frac{1}{2} \int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 [1 - e^{-\beta\phi(r)}] \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr r^2 [1 - e^{-\beta\phi(r)}] \end{aligned} \quad (3)$$

Integralet over r deler vi opp i et integral fra 0 til d og et fra d til ∞ , rekkeutvikler eksponentialfunksjonen i det siste integralet og integrerer ledd for ledd:

$$\begin{aligned} B_2(T) &= 2\pi \int_0^d dr r^2 + 2\pi \int_d^\infty dr r^2 \left[1 - e^{\beta\varepsilon \frac{d^6}{r^6}}\right] \\ &= \frac{2\pi}{3} d^3 - 2\pi \sum_{n=1}^\infty \frac{(\beta\varepsilon d^6)^n}{n!} \int_d^\infty dr r^{2-6n} \\ &= \frac{2\pi}{3} d^3 - 2\pi \sum_{n=1}^\infty \frac{(\beta\varepsilon d^6)^n}{n!} \frac{d^{3-6n}}{3-6n} \\ &= \frac{2\pi}{3} d^3 \left(1 - \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{(2n-1)n!} \left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)^n\right) \end{aligned}$$

d) Boyletemperaturen er definert som temperaturen T_B der B_2 er lik null:

$$B_2(T_B) = 0$$

La oss nå skrive $T = T_B + \tilde{T}$ og

$$B_2(\tilde{T}) = \frac{2\pi}{3} d^3 \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)n!} \left(\frac{\varepsilon}{k(T_B + \tilde{T})} \right)^n \right)$$

(i) $T < T_B$:

Da er $T - T_B < 0$ som medfører $\tilde{T} < 0$. Vi får da

$$\begin{aligned} B_2(\tilde{T}) &= \frac{2\pi}{3} d^3 \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)n!} \left(\frac{\varepsilon}{k(T_B - |\tilde{T}|)} \right)^n \right) \\ &< \frac{2\pi}{3} d^3 \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)n!} \left(\frac{\varepsilon}{kT_B} \right)^n \right) = B_2(T_B) = 0 \end{aligned}$$

Altså finner vi at B_2 er negativ

$$B_2(\tilde{T}) < 0$$

så i dette temperaturområdet er trykket mindre enn trykket for en ideell gass.

(ii) $T = T_B$:

Da er $B_2 = 0$, og trykket lik trykket av en ideell gass (når vi antar at tredje og høyere-ordens korreksjoner er neglisjerbare).

(iii) $T > T_B$:

Da er $\tilde{T} > 0$ og

$$\begin{aligned} B_2(\tilde{T}) &= \frac{2\pi}{3} d^3 \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)n!} \left(\frac{\varepsilon}{k(T_B + \tilde{T})} \right)^n \right) \\ &> \frac{2\pi}{3} d^3 \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)n!} \left(\frac{\varepsilon}{kT_B} \right)^n \right) = B_2(T_B) = 0 \end{aligned}$$

B_2 er positiv, og trykket dermed større enn trykket av en ideell gass.

Oppgave 2

a)

$$N = C_d V \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{(d-2)/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} = C_d V \int_0^{\infty} d\varepsilon \varepsilon^{(d-2)/2} f(\varepsilon)$$

der

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$

er Fermifunksjonen. Når $T = 0$ er

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon < \mu \\ 0 & \varepsilon > \mu \end{cases} \quad (4)$$

Det kjemiske potensialet ved $T = 0$ er *Fermienergien* ε_F , så vi kan skrive

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon < \varepsilon_F \\ 0 & \varepsilon > \varepsilon_F \end{cases} \quad (5)$$

så ved $T = 0$:

$$N = C_d V \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon^{(d-2)/2} = \frac{2}{d} C_d V \varepsilon_F^{d/2} \quad (6)$$

$$U = C_d V \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon^{d/2} = \frac{2}{d+2} C_d V \varepsilon_F^{(d+2)/2}$$

Deler vi disse på hverandre får vi:

$$\frac{U}{N} = \frac{d}{\underline{\underline{d+2}}} \varepsilon_F \quad (7)$$

b) En delvis integrasjon av

$$P = C_d k T \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{(d-2)/2} \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)})$$

gir

$$\begin{aligned} P &= \frac{2}{d} C_d k T \left[\varepsilon^{d/2} \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}) \right]_{\varepsilon=0}^{\varepsilon=\infty} + \frac{2}{d} C_d \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/2} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \\ &= \frac{2}{d} C_d \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \\ &= \frac{2}{d} \frac{1}{V} C_d V \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{d/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \\ &= \underline{\underline{\frac{2}{d} \frac{U}{V}}} \end{aligned}$$

c) Ved $T = 0$ blir trykket

$$P = \frac{2}{d} \frac{U}{V} = \frac{2}{d} \frac{d}{d+2} \frac{N}{V} \varepsilon_F = \frac{2}{d+2} \rho \varepsilon_F$$

som altså er større enn null. Fysisk skyldes dette Pauliprinsippet.

Oppgave 3

a) Energien til en tilstand med n åpne basepar er $E_n = n\varepsilon$, så partisjonsfunksjonen er

$$Z = \sum_{n=0}^N e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^N e^{-n\beta\varepsilon}$$

Setter vi

$$x = e^{-\beta\varepsilon}$$

får vi

$$Z = \sum_{n=0}^N x^n$$

som er en geometrisk rekke. Summerer vi denne, får vi:

$$Z = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x}$$

som vi skulle vise.

b) Midlere antall åpne basepar:

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=0}^N n e^{-n\beta\varepsilon}}{\sum_{n=0}^N e^{-n\beta\varepsilon}} = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^N n e^{-n\beta\varepsilon} = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^N n x^n$$

Ved å benytte oss av

$$\sum_{n=0}^N n x^n = x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N x^n = x \frac{d}{dx} Z$$

får vi

$$\langle n \rangle = x \frac{d}{dx} \ln Z = (N+1) \frac{x^{N+1}}{x^{N+1} - 1} - \frac{x}{x - 1}$$

som var det vi skulle vise.

(i) $x \rightarrow 0$

Vi ser nå på grensen $x \rightarrow 0$. Ved å rekkeutvikle i x får vi

$$\langle n \rangle = x + \mathcal{O}(x^2)$$

så $\langle n \rangle$ går mot null når $x \rightarrow 0$.

(ii) $x \rightarrow 1$

Sett $x = 1 - \varepsilon$. Nær $x = 1$ er ε liten, og vi kan rekkeutvikle i ε :

$$\begin{aligned}\langle n \rangle &= (N+1) \frac{(1-\varepsilon)^{N+1}}{(1-\varepsilon)^{N+1} - 1} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \\ &= (N+1) \frac{1 - (N+1)\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)}{-(N+1)\varepsilon + \frac{N(N+1)}{2}\varepsilon^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)} + \frac{1}{\varepsilon} - 1 \\ &= -\frac{1}{\varepsilon} \frac{1 - (N+1)\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)}{1 - \frac{N}{2}\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)} + \frac{1}{\varepsilon} - 1 \\ &= -\frac{1}{\varepsilon} (1 - (N+1)\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)) (1 + \frac{N}{2}\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)) + \frac{1}{\varepsilon} - 1 \\ &= -\frac{1}{\varepsilon} + \frac{N}{2} + 1 + \frac{1}{\varepsilon} - 1 + \mathcal{O}(\varepsilon) \\ &= \frac{N}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon)\end{aligned}$$

I grensen $x \rightarrow 1$, som er det samme som $\varepsilon \rightarrow 0$ er altså

$$\langle n \rangle = \frac{N}{2}$$

c) Når $x \gg 1$ kan vi rekkeutvikle i $1/x$:

$$\begin{aligned}\langle n \rangle &= (N+1) \frac{x^{N+1}}{x^{N+1} - 1} - \frac{x}{x-1} \\ &= (N+1) \frac{1}{1 - 1/x^{N+1}} - \frac{1}{1 - 1/x} \\ &= (N+1) \left(1 + \frac{1}{x^{N+1}} + \mathcal{O}(x^{-2(N+1)}) \right) - \left(1 + \frac{1}{x} + \mathcal{O}(x^{-2}) \right) \\ &= N - \frac{1}{x} + \mathcal{O}(x^{-2})\end{aligned}$$

så vi ser at $\langle n \rangle \rightarrow N$. Figur 1 viser et plot av $\langle n \rangle / N$ når $N = 1024$ og for $x \in [0.95, 1.05]$.

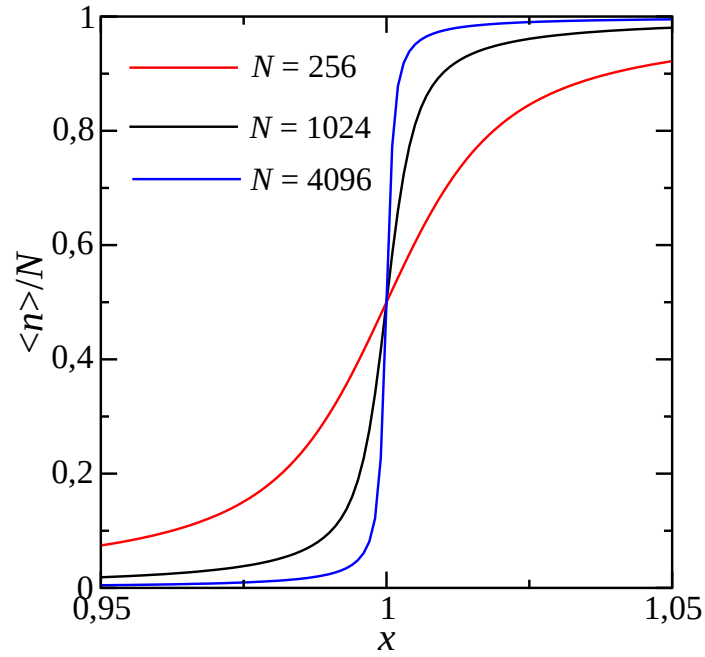


Figure 1: Midlere antall åpne basepar per totalt antall basepar $\langle n \rangle / N$ for tre ulike verdier av N .

d) Sannsynligheten for at det separerer helt er:

$$P = \frac{g^N e^{-\beta N \varepsilon}}{Z} = \frac{x^N (1 - x)}{1 - x^{N+1}}$$

(i) $T < T_c$:

Da er $x < 1$ og

$$P = \frac{x^N (1 - x)}{1 - x^{N+1}} = x^N + \mathcal{O}(x^{N+1})$$

(ii) $T = T_c$:

La $x = 1 - \varepsilon$ der ε er liten. Da er

$$P = \frac{(1 - \varepsilon)^N \varepsilon}{1 - (1 - \varepsilon)^{N+1}} = \frac{1}{N + 1} - \frac{N}{2(N + 1)} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

så ved $T = T_c$ når $x = 1$ og $\varepsilon = 0$ får vi

$$P = \frac{1}{N + 1}$$

(iii) $T > T_c$:

Da er $x > 1$. Hvis vi skriver $x = 1/\varepsilon$, så er $0 < \varepsilon < 1$ og

$$P = \frac{x^N(x-1)}{x^{N+1}-1} = \frac{1-\varepsilon}{1-\varepsilon^{N+1}} = 1 - \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1})$$

eller uttrykt ved x :

$$P = 1 - \frac{1}{x} + \mathcal{O}(1/x^{N+1})$$

Kommentar:

Under den kritiske temperaturen er sannsynligheten for at DNA-molekylet skal dele seg i to essensielt lik null for store N . Selv ved den kritiske temperaturen er det kun en av $N+1$ ($\approx N$ for store N) som er åpne, mens den over den kritiske temperaturen pent og pyntlig går mot en (lag gjerne et plot!). Tar vi ikke hensyn til degenerasjon i modellen vår er altså sannsynligheten for at molekylet deler seg i to forsvinnende liten.