



Løsningsforslag til eksamen i TFY4230 STATISTISK FYSIKK

Tirsdag 9. aug 2011

Dette løsningsforslaget er på 5 sider.

Oppgave 1. Kjeder av Isingspinn

En syklisk kjede med tre Isingspinn har Hamiltonfunksjon

$$H = J(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1). \quad (1)$$

a) Skriv ned alle konfigurasjonene og de tilhørende energiene for denne kjeden.

Siden hvert av de tre Ising-spinnene kan ta to verdier, $\uparrow$ ($\sigma = +1$) og $\downarrow$ ($\sigma = -1$), er det ialt $2^3 = 8$ konfigurasjoner. Disse kan sorteres i to klasser:

- i. $\uparrow\uparrow\uparrow$ og $\downarrow\downarrow\downarrow$ med energi $E = 3J$.
- ii. $\downarrow\uparrow\uparrow$, $\uparrow\downarrow\uparrow$, $\uparrow\uparrow\downarrow$, $\uparrow\downarrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow\downarrow$ og $\downarrow\downarrow\uparrow$ med energi $E = -J$.

b) Finn partisjonsfunksjonen $Z = e^{-\beta F} = e^{-\beta U + S/k_B}$ for denne kjeden.

Partisjonsfunksjonen blir

$$Z = \sum_{\text{Konfigurasjoner } i} e^{-\beta E(i)} = 2e^{-3\beta J} + 6e^{\beta J}. \quad (2)$$

c) Finn midlere energi $U = \langle H \rangle$ for denne kjeden. Se spesielt på grensen $T \rightarrow 0$, både for $J > 0$ og $J < 0$.

En direkte beregning av middelveiden gir

$$\begin{aligned} U = \langle H \rangle &= \frac{(3J) \times 2e^{-3\beta J} + (-J) \times 6e^{\beta J}}{Z} = \left(\frac{6e^{-3\beta J} - 6e^{\beta J}}{2e^{-3\beta J} + 6e^{\beta J}} \right) J \\ &= \left(\frac{1 - e^{-4\beta J}}{3 + e^{-4\beta J}} \right) \times (-3J) = \left(\frac{1 - e^{-4\beta J}}{1 + 3e^{-4\beta J}} \right) \times (3J). \end{aligned} \quad (3)$$

Vi finner samme svar ved å bruke formelen $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$. Siden $T \rightarrow 0$ svarer til $\beta \rightarrow \infty$ finner vi at

$$U \xrightarrow{T \rightarrow 0} \begin{cases} -J & \text{hvis } J > 0, \\ 3J & \text{hvis } J < 0. \end{cases} \quad (4)$$

I begge tilfeller er dette energien til grunntilstanden (negativ).

- d) Finn varmekapasiteten $C = \frac{\partial U}{\partial T}$ til denne kjeden.

Vi finner

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial U}{\partial T} = -k_B \beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = k_B (\beta J)^2 \left[\frac{4e^{4\beta J} \cdot (1 + 3e^{4\beta J}) + (1 - e^{4\beta J}) \cdot 12e^{4\beta J}}{(1 + 3e^{4\beta J})^2} \right] \\ &= \frac{(4\beta J)^2 e^{4\beta J}}{(1 + 3e^{4\beta J})^2} k_B = \frac{(4\beta J)^2 e^{-4\beta J}}{(3 + e^{-4\beta J})^2} k_B. \end{aligned} \quad (5)$$

- e) Finn entropien S til denne kjeden. Se spesielt på grensen $T \rightarrow 0$, både for $J > 0$ og $J < 0$.

Vi kan bruke sammenhengen oppgitt under pkt b), dvs.

$$S = k_B (\ln Z + \beta U) = k_B \left(1 - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \ln Z. \quad (6)$$

For $J > 0$ bruker vi uttrykkene

$$\ln Z = \beta J + \ln(6 + 2e^{-4\beta J}), \quad \beta U = -3\beta J \cdot (1 - e^{-4\beta J}) / (3 + e^{-4\beta J}),$$

som gir

$$S = k_B \left[\frac{4\beta J e^{-4\beta J}}{(3 + e^{-4\beta J})} + \ln(6 + 2e^{-4\beta J}) \right] \xrightarrow{T \rightarrow 0} k_B \ln 6. \quad (7)$$

For $J < 0$ bruker vi uttrykkene

$$\ln Z = -3\beta J + \ln(2 + 6e^{4\beta J}), \quad \beta U = 3\beta J \cdot (1 - e^{4\beta J}) / (1 + 3e^{4\beta J}),$$

som gir

$$S = k_B \left[-\frac{12\beta J e^{4\beta J}}{(1 + 3e^{4\beta J})} + \ln(2 + 6e^{4\beta J}) \right] \xrightarrow{T \rightarrow 0} k_B \ln 2. \quad (8)$$

Kommentar 1: Et annen metode er å beregne entropien fra den termodynamiske definisjonen

$$dS = \frac{dQ}{T} = \frac{C dT}{T}, \text{ dvs. } S(T) - S(T_0) = \int_{T_0}^T \frac{C dT'}{T'},$$

med C gitt av ligning (5). Dette fastlegger ikke integrasjonskonstanten $S(T_0)$, som ikke kan utledes av termodynamikk alene. Men som en kontroll av uttrykkene kan man hvertfall verifisere relasjonen

$$T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} = C = \frac{\partial U}{\partial \beta} = -k_B \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z. \quad (9)$$

Denne følger direkte av ligning (6). De som liker å regne — og som har tilstrekkelig med tid — kan også kvalitetskontrollere utregningene ved å verifisere at andre likhet i (9) anvendt på at uttrykkene (7) og (8) leder til (5).

Kommentar 2: En tredje, “informasjonsteoretisk”, beregning er ved bruk av formelen

$$S = -k_B \sum_{\text{Konfigurasjoner } i} p_i \ln p_i = -k_B (2p_{\uparrow\uparrow\uparrow} \ln p_{\uparrow\uparrow\uparrow} + 6p_{\downarrow\uparrow\uparrow} \ln p_{\downarrow\uparrow\uparrow}), \quad (10)$$

der $p_i = e^{-\beta E_i} / Z$. Med

$$p_{\uparrow\uparrow\uparrow} = \frac{e^{-4\beta J}}{6 + 2e^{-4\beta J}} = \frac{1}{2 + 6e^{4\beta J}}, \quad p_{\downarrow\uparrow\uparrow} = \frac{1}{6 + 2e^{-4\beta J}} = \frac{e^{4\beta J}}{2 + 6e^{4\beta J}},$$

innsatt i (10) finner man igjen resultatene (7) og (8).

Ved $T = 0$ er det bare konfigurasjonene med lavest energi (grunntilstanden) som bidrar til (10). Man ser derfor generelt at

$$S \xrightarrow{T \rightarrow 0} k_B \ln (\text{Antall konfigurasjoner i grunntilstanden}). \quad (11)$$

- f) Finn korrelasjonsfunksjonen $\langle s_1 s_2 \rangle$ for denne kjeden.

En enkel metoder er å utnytte symmetrien i systemet:

$$\begin{aligned}\langle s_1 s_2 \rangle &= \langle s_2 s_3 \rangle = \langle s_3 s_1 \rangle = \frac{1}{3J} \langle J(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1) \rangle = \frac{U}{3J} \\ &= - \left(\frac{1 - e^{-4\beta J}}{3 + e^{-4\beta J}} \right) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \begin{cases} -\frac{1}{3} & \text{hvis } J > 0, \\ 1 & \text{hvis } J < 0. \end{cases}\end{aligned}\quad (12)$$

Hvis $J < 0$ er det energetisk gunstigst at spinnene er parallelle, dvs. med $s_i s_{i+1} = 1$. Derfor finner vi at $\langle s_i s_{i+1} \rangle \rightarrow 1$ ved lave temperaturer.

Hvis $J > 0$ er det energetisk gunstigst at spinnene er anti-parallelle, dvs. med $s_i s_{i+1} = -1$. Men siden kjeden består av et odde antall spinn er det ikke mulig å ha alle nabospinn anti-parallelle (systemet sies å være *frustrert*). Det beste som kan oppnås er at to par av nabospinn er anti-parallelle, og ett par er parallelt. Derfor finner vi at

$$\langle s_i s_{i+1} \rangle \rightarrow \frac{2}{3} \times (-1) + \frac{1}{3} \times (+1) = -\frac{1}{3}$$

ved lave temperaturer.

Kommentar: En direkte beregning av korrelasjonen er omtrent like enkel: Av konfigurasjonene vi fant under punkt a) se vi at det er fire der $s_1 s_2 = +1$ (to med energi $3J$ og to med energi $-J$) og fire der $s_1 s_2 = -1$ (alle med energi $-J$). Vi finner derfor at

$$\langle s_i s_i \rangle = 2p_{\uparrow\uparrow\uparrow} + (2 - 4)p_{\downarrow\uparrow\uparrow} = 2(p_{\uparrow\uparrow\uparrow} - p_{\downarrow\uparrow\uparrow}),$$

som igjen leder til (12).

- g) Skisser hvordan du ville gjøre tilsvarende analyse av en syklisk kjede med N Ising-spinn, dvs. med Hamilton-funksjon $H = J \left(s_N s_1 + \sum_{j=1}^{N-1} s_j s_{j+1} \right)$.

Oppgave 2. Kvantemagnetisme

Én-partikkel Hamiltonfunksjonen for et elektron (med ladning $q = -e$) i et magnetfelt $\mathbf{B}$ er

$$H = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - g\mu_B B s_z, \quad (13)$$

der $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Etter kvantisering finner man at egenenergiene til H er

$$E = \frac{1}{2m_e} p_z^2 + \left(n + \frac{1}{2} \right) \varepsilon_a + s_z \varepsilon_b, \quad \text{der } s_z = \pm \frac{1}{2} \text{ og } n = 0, 1, \dots \quad (14)$$

Her er $\varepsilon_a = \mu_B B$ og $\varepsilon_b = \frac{1}{2} g\mu_B B$. For hver verdi av p_z , n og s_z er det eBA/h degenererte tilstander, der $\mathcal{A}$ er arealet av systemet normalt på magnetfeltet.

I det store kanoniske ensemblet kan partisjonsfunksjonen for en gass av slike elektroner uttrykkes som

$$\beta p = \frac{\ln \Xi}{V} = \frac{eB\sqrt{2m_e}}{h^2} \sum_{s_z = \pm \frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon_z}{\sqrt{\varepsilon_z}} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta[\varepsilon_z + (n+1/2)\varepsilon_a + s_z \varepsilon_b - \mu]} \right\}, \quad (15)$$

når vi ser bort fra vekselvirkningen mellom elektroner.

- a) Skisser den generelle sammenhengen mellom én-partikkeltilstandene E_n og den store kanoniske partisjonsfunksjonen Ξ til en ideell Fermigass.
- b) Indiker hvordan man i dette spesielle tilfellet kommer fram til partisjonsfunksjonen (15) fra én-partikkeltilstandene (14).
- c) Vis at partisjonsfunksjonen (15) kan omskrives til formen

$$\begin{aligned}\beta p &= \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^{M+1}}{M} e^{M\beta\mu} \times \frac{eB\sqrt{2m_e}}{h^2} \times \\ &\times \sum_{s_z = \pm 1/2} e^{-s_z M\beta\varepsilon_b} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+1/2)M\beta\varepsilon_a} \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon_z}{\sqrt{\varepsilon_z}} e^{-M\beta\varepsilon_z}.\end{aligned}\quad (16)$$

We expand the logarithm in a series, using the formula

$$\ln(1+x) = \sum_{L=1}^{\infty} \frac{(-1)^{L+1}}{L} x^L, \quad (17)$$

with $x = e^{-\beta[\varepsilon_z + (n+1/2)\varepsilon_a + s_z\varepsilon_b - \mu]}$.

- d) Utfør summasjonene over s_z og n , og integrasjonen over ε_z i ligning (16).

The summation over s_z gives a factor $2 \cosh(L\beta\varepsilon_b/2)$.

The summation over n gives a factor $[2 \sinh(L\beta\varepsilon_a/2)]^{-1}$.

The integration over p_z gives a factor $(L\beta)^{-1/2} \Gamma(\frac{1}{2}) = (\pi k_B T/L)^{1/2}$.

Since $\varepsilon_a = \frac{e\hbar B}{2m_e}$ we may write

$$\frac{eB}{2 \sinh(L\beta\varepsilon_a/2)} = \frac{2\pi m_e k_B T}{Lh} \frac{(L\beta\varepsilon_a)}{\sinh(L\beta\varepsilon_a/2)}$$

to obtain

$$\beta p = \frac{1}{\lambda^3} \sum_{L=1}^{\infty} \frac{(-1)^{L+1}}{L^{5/2}} e^{L\beta\mu} \times 2 \cosh(L\beta\varepsilon_b/2) \times \frac{(L\beta\varepsilon_a/2)}{\sinh(L\beta\varepsilon_a/2)}, \quad (18)$$

where $\lambda = h/\sqrt{2\pi m_e k_B T}$ is the thermal de Broglie wavelength.

- e) Se på grensen $B \rightarrow 0$ av resultatet ditt fra punkt d). Ligner resultatet på partisjonsfunksjonen for en ideell elektrongass?

Since ε_a and ε_b is proportional to B they will also go to 0 as $B \rightarrow 0$. In this limit the factor from s_z -summation, $2 \cosh(L\beta\varepsilon_b/2) \rightarrow 2$, which is the correct degeneracy factor for a spin- $\frac{1}{2}$ particle. Since further the factor from n -summation, $(L\beta\varepsilon_a/2) [\sinh(L\beta\varepsilon_a/2)]^{-1} \rightarrow 1$, we get back the correct fugacity expansion for an ideal non-relativistic spin- $\frac{1}{2}$ Fermi gas.

- f) Den midlere magnetiseringen pr volumenhet er her gitt ved uttrykket

$$M = \left(\frac{\partial p}{\partial B} \right)_{\beta, \mu}. \quad (19)$$

Beregn dette uttrykket til første orden i fugasiteten $z = \lambda^{-3} e^{\beta\mu}$, der $\lambda = h^2/\sqrt{2\pi k_B T m_e}$ er den termiske de Broglie bølgelengden til elektronet. Du kan anta at størrelsen $u \equiv \beta\mu_B B$ er liten, og bare beregne M til første orden i u .

To first order

$$\begin{aligned} \beta p &= \rho = \frac{1}{\lambda^3} e^{\beta\mu} \times 2 \cosh(g\beta\mu_B B/4) \times \frac{(\beta\mu_B B/2)}{\sinh(\beta\mu_B B/2)} \\ &\approx \frac{2}{\lambda^3} e^{\beta\mu} \left\{ 1 + \left(\frac{g^2}{8} - \frac{1}{3} \right) (\beta\mu_B B/2)^2 + \dots \right\}, \end{aligned}$$

which gives

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \beta p = \frac{2}{\lambda^3} e^{\beta\mu} \times \left(\frac{g^2}{8} - \frac{1}{3} \right) \frac{1}{2} \beta \mu_B^2 B \\ &= \frac{1}{2} \beta \rho \left(\frac{g^2}{8} - \frac{1}{3} \right) \mu_B^2 B. \end{aligned} \quad (20)$$

- g) For hvilke verdier av g er systemet *paramagnetisk*, og for hvilke verdier av g er det *diamagnetisk*?

We see from equation (20) that the system is paramagnetic for $g^2 > \frac{8}{3}$ (i.e. $g > 1.633\dots$) and diamagnetic for $g^2 < \frac{8}{3}$.

Oppgitt: Noen av uttrykkene under *kan* være til nytte ved løsning av eksamenssettet.

$$(1-x)^{-1} = \sum_{M=0}^{\infty} x^M, \quad (21)$$

$$\ln(1+x) = \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^{M+1}}{M} x^M, \quad (22)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{t}} e^{-t} = \sqrt{\pi}. \quad (23)$$