



Løsningsforslag til eksamen i TFY4230 STATISTISK FYSIKK

Mandag 12. august, 2013

Dette løsningsforslaget er på 7 sider.

Oppgave 1. Ideell gass av relativistiske partikler

I denne oppgaven skal du først se på et system av N identiske masseløse ikke-vekselvirkende partikler i et volum V . Hamilton-funksjonen for dette systemet er

$$H = \begin{cases} \sum_{n=1}^N |\mathbf{p}_n c| & \text{når alle } N \text{ partiklene er i volumet } V, \\ \infty & \text{ellers.} \end{cases} \quad (1)$$

Vi antar at tettheten $\rho = N/V$ er så lav at systemet kan betraktes som klassisk.

- a) *Skriv ned* den kanoniske partisjonsfunksjonen Z_N for dette systemet ved temperaturen T .

$$Z_N = \frac{1}{N!} \int e^{-\beta H} \prod_{n=1}^N \frac{d^3 q_n d^3 p_n}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{1}{N!} \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \left[\int e^{-\beta c|\mathbf{p}|} d^3 p \right]^N \quad (2)$$

- b) Regn ut den kanoniske partisjonsfunksjonen Z_N for dette systemet ved temperaturen T .

Utfør først $\mathbf{p}$ -integrasjonen. Ved å innføre kulekoordinater fås (med $p \equiv |\mathbf{p}|$)

$$\begin{aligned} \int e^{-\beta c|\mathbf{p}|} d^3 p &= 4\pi \int_0^\infty p^2 dp e^{-\beta c p} \\ &= \frac{4\pi}{(\beta c)^3} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = \frac{4\pi}{(\beta c)^3} 2! = \frac{8\pi}{(\beta c)^3}, \end{aligned}$$

der vi har innført ny variabel, $x = \beta c p$, i annen linje, og tilslutt utført integralet ved å huske definisjonen på Γ -funksjonen. Kombinert med ligning (2) gir dette

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\pi^2 (\beta \hbar c)^3} \right)^N \quad (3)$$

- c) Finn tilstandsligningen $P = P(N, V, T)$ for dette systemet.

Vi har de generelle sammenhengene¹

$$\begin{aligned} Z_N &= e^{-\beta F}, \\ P &= - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, N}. \end{aligned}$$

¹Ved å kombinere differensialet $dF = dE - TdS - SdT$ med den termodynamiske identitet, $TdS = dE + pdV - \mu dN$, finner vi

$$dF = -PdV - SdT + \mu dN.$$

I dette tilfellet får vi, når vi skriver $\beta = 1/(k_B T)$,

$$P = \frac{\partial}{\partial V} k_B T (N \log V - \log N! - 2N \log \pi - 3N \log \beta \hbar c) = \frac{N k_B T}{V}, \quad (4)$$

som er ideell gasslov.

- d)** Finn den indre energien $E = \langle H \rangle$ til dette systemet.

Her er det kanskje enklest å bruke den statistiske tolkningen, som sier at

$$E = \langle H \rangle = \frac{\int H e^{-\beta H} / N!}{\int e^{-\beta H} / N!} = - \left(\frac{\partial \log Z_N}{\partial \beta} \right)_{V,N}.$$

Den ekvivalente termodynamiske utledningen følger fra relasjonene

$$E = F + TS = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = F + \beta \left(\frac{\partial F}{\partial \beta} \right)_{V,N} = \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \beta F \right)_{V,N}.$$

Uansett gir dette

$$\begin{aligned} E &= - \frac{\partial}{\partial \beta} (N \log V - \log N! - 2N \log \pi - 3N \log \beta - 3N \log \hbar c) \\ &= \frac{3N}{\beta} = 3N k_B T. \end{aligned} \quad (5)$$

- e)** Finn Helmholtz fri energi $F = E - TS$ til dette systemet.

Dette var den første termodynamiske størrelsen vi regnet ut,

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \log Z_N = k_B T (\log N! + 2N \log \pi + 3N \log \beta \hbar c - N \log V) \\ &\approx N k_B T \left[-1 + \log \rho (\pi^{2/3} \beta \hbar c)^3 \right], \end{aligned} \quad (6)$$

der $\rho \equiv N/V$ er partikkeltettheten. Her har vi brukt Stirlings formel, $\log N! \approx N \log N - N$, i siste linje.

- f)** Finn varmekapasiteten C_V (ved konstant volum) til dette systemet.

Varmekapasiteten for en ideell relativistisk gass er

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = 3N k_B, \quad (7)$$

dobbelt så stor som for en tilsvarende ikke-relativistisk gass.

- g)** Finn entropien S til dette systemet.

Vi kan enten bruke relasjonen

$$S = \frac{E - F}{T} = N k_B \left[4 - \log \rho (\pi^{2/3} \beta \hbar c)^3 \right], \quad (8)$$

eller den ekvivalente relasjonen $S = -(\partial F / \partial T)_{V,N}$. Vi finner at disse uttrykkene er identiske ved å sammenligne med formelen $E = F - T(\partial F / \partial T)_{V,N}$ som ble utledet like over ligning (5).

- h)** Finn det kjemiske potensialet μ til dette systemet.

Fra $dF = -PdV - SdT + \mu dN$ finner vi

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = k_B T \log \rho (\pi^{2/3} \beta \hbar c)^3. \quad (9)$$

- i) Hva er den termiske de Broglie bølgelengden til disse partiklene?

Vi *definerer* termisk de Broglie bølgelengde λ_{dB} slik at ligning (3) ser vakker ut,

$$Z_N = \frac{1}{N!} (V \lambda_{\text{dB}}^{-3})^N,$$

dvs.

$$\lambda_{\text{dB}} = \pi^{2/3} \beta \hbar c. \quad (10)$$

Fysisk er λ_{dB} et uttrykk for den kvantemekaniske utstrekningen på en termisk partikkel ved temperaturen T . Man kan merke seg at den dimensjonsløse kombinasjonen $\rho \lambda_{\text{dB}}^3$ går igjen i ligningene (6), (8) og (9).

- j) Omtrent ved hvilken tetthet vil du anta at kvantemekaniske effekter begynner å bli av betydning for dette systemet?

Røfft kan man si at kvantemekaniske effekter blir av betydning når $\rho \lambda_{\text{dB}}^3 \approx 1$. Fra det klassiske uttrykket (8) ser vi at entropien S blir negativ når $\log \rho \lambda_{\text{dB}}^3 > 4$. Det er ikke fysisk mulig, så kvantemekaniske effekter må hvertfall få betydning før tettheten blir så stor.

Kommentar: Det kan være instruktivt å sammenligne med de tilsvarende resultatene for en gass av ikke-relativistiske partikler. Vi skriver fortsatt

$$Z_N = \frac{1}{N!} (V \lambda_{\text{dB}}^{-3})^N,$$

men finner nå at

$$\lambda_{\text{dB}}^{-3} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\beta p^2/(2m)} \right]^3 = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2},$$

dvs. at

$$\lambda_{\text{dB}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\pi k_B T m}}. \quad (11)$$

Uttrykket for Helmholtz fri energi blir seende ut som før,

$$F = N k_B T [-1 + \log \rho \lambda_{\text{dB}}^3]. \quad (12)$$

Tilstandsligningen er fortsatt den ideelle gassloven

$$P = k_B T \rho, \quad (13)$$

mens den indre energien endres til

$$E = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (14)$$

Derved blir entropien

$$S = N k_B \left[\frac{5}{2} - \log \rho \lambda_{\text{dB}}^3 \right]. \quad (15)$$

Det kjemiske potensialet får også samme form som for relativistiske partikler,

$$\mu = k_B T \log \rho \lambda_{\text{dB}}^3. \quad (16)$$

Oppgave 2. Bosoner i et harmonisk potensial

I denne oppgaven skal du studere en samling termiske bosoner som er fanget i et harmonisk potensial. For å forenkle regningen antar skal vi anta et endimensjonalt system. Énpartikkel-tilstandene er da gitt som løsninger av Schrödinger-ligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} K x^2 \right) \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \quad (17)$$

med énpartikkel-egenenergi $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$, der $\omega = \sqrt{K/M}$, og $n = 0, 1, \dots$

- a) *Skriv ned* den store kanoniske partisjonsfunksjonen Ξ for dette systemet ved temperatur T (bruk variabelen $\beta = 1/(k_B T)$), og kjemisk potensial μ .

Vi tilpasser uttrykket på formelarket til denne situasjonen,

$$\Xi = \prod_{n=0}^{\infty} \left(1 - e^{\beta(\mu - E_n)} \right)^{-1} = \prod_{n=0}^{\infty} \left(1 - e^{\beta[\mu - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega]} \right)^{-1}. \quad (18)$$

- b) Innfør *fugasiteten* $z = e^{\beta\mu}$, og regn ut $\log \Xi$ som en potensrekke i z .

Vi bruker rekkeutviklingen $\log(1-x) = -\sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{\ell} x^{\ell}$, og bytter om summasjonsrekkefølge:

$$\begin{aligned} \log \Xi &= -\sum_{n=0}^{\infty} \log \left[1 - z e^{-\beta(n+\frac{1}{2})\hbar\omega} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{\ell} e^{-\beta\hbar\omega\ell(n+\frac{1}{2})} \\ &= \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{\ell} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega\ell(n+\frac{1}{2})} = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{\ell} \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega\ell}} = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{2\ell \sinh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell)}. \end{aligned} \quad (19)$$

- c) Regn ut det midlere partikkeltallet $N = \sum_{n=0}^{\infty} \langle N_n \rangle$ som en potensrekke i z , der $\langle N_n \rangle$ er det midlere antall partikler i énpartikkel-tilstanden n .

Fra den statistiske beskrivelsen følger det direkte at

$$N = \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{2 \sinh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell)}. \quad (20)$$

Kommentar 1: Det kan være en nyttig oppfriskning av termodynamikk å utlede denne relasjonen fra identifikasjonen $\log \Xi = \beta PV$. Vi bruker først relasjonen $G = \mu N = E + PV - TS$ til å omskrive

$$PV = -E + TS + \mu N,$$

som gir $PdV + VdP = -dE + TdS + SdT + \mu dN + Nd\mu$. Kombinert med den termodynamiske identiteten $TdS = dE + PdV - \mu dN$ fås da

$$VdP = SdT + Nd\mu, \quad (21)$$

som impliserer ligning (20). Problemet med denne utledningen er imidlertid at det systemet vi ser på her ikke har noe fast volum. Vi fyller partikler i en harmonisk brønn; jo flere partikler vi har dess større volum vil de fylle opp. Men selv om den termodynamiske utledningen er vaklende er altså sluttsvaret riktig, fordi det kan utledes fra statistisk mekanikk under mer generelle betingelser.

Ligning (20) gir oss imidlertid ingen informasjon om midlere antall partikler $\langle N_n \rangle$ i énpartikkelnivået n . Dette er en så sentral størrelse i kvantestatistikk at den bør huskes! For bosoner,

$$\langle N_n \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_n - \mu)} - 1} \stackrel{\text{her}}{=} \frac{z}{e^{\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} - z} = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} e^{-\beta\hbar\omega\ell(n+\frac{1}{2})}. \quad (22)$$

Fra dette finner vi som før, ved ombytte av summasjonsrekkefølgen,

$$\begin{aligned} N &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle N_n \rangle = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega\ell n} = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega\ell}} \\ &= \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{2 \sinh(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell)}. \end{aligned} \quad (23)$$

Kommentar 2: Minner om hvordan ligning (22) kan utledes. Den relative vekten, dvs. den unormerte sannsynligheten for å ha N_n partikler i énpartikkelnivået n er $e^{\beta(\mu - E_n)N_n}$. Da fås

$$\langle N_n \rangle = \frac{\sum_{N_n=0}^{\infty} N_n e^{\beta(\mu - E_n)N_n}}{\sum_{N_n=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - E_n)N_n}} = \frac{e^{\beta(\mu - E_n)}}{1 - e^{\beta(\mu - E_n)}} = \frac{1}{e^{\beta(E_n - \mu)} - 1}, \quad (24)$$

etter bruk av summasjonsformlene $\sum_{k=0}^{\infty} x^k = \frac{1}{1-x}$, og $\sum_{k=0}^{\infty} k x^k = \frac{x}{(1-x)^2}$.

- d) Regn ut den midlere eksitasjonsenergien $\bar{E} = \sum_{n=0}^{\infty} \langle E_n \rangle$ som en potensrekke i z , der $\langle E_n \rangle = n\hbar\omega \langle N_n \rangle$ er den midlere eksitasjonsenergien til partiklene i énpartikkel-tilstanden n .

Vi bruker bruker igjen framgangsmåten med ombytte av summasjonsrekkefølgen:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_{n=0}^{\infty} \hbar\omega n \langle N_n \rangle = \hbar\omega \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta\hbar\omega\ell n} = \hbar\omega \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} \frac{e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega\ell}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega\ell})^2} \\ &= \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\hbar\omega z^{\ell} e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell}}{4 \sinh^2(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\ell)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Kommentar: Vi må også unne oss gleden av å utlede denne relasjonen termodynamisk fra identifikasjonen $\log \Xi = \beta PV$. Vi finner, ved bruk av ligning (21),

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \beta} \right)_{\mu, V} &= \left(\frac{\partial \beta PV}{\partial \beta} \right)_{\mu, V} = PV + \beta V \left(\frac{\partial P}{\partial \beta} \right)_{\mu, V} \\ &= PV - TV \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\mu, V} = PV - TS, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \mu} \right)_{T, V} = N. \quad (27)$$

Derved finner vi at

$$E = -PV + TS + \mu N = \mu \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \mu} \right)_{T, V} - \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \beta} \right)_{\mu, V}.$$

Siden μ -avhengigheten bare sitter i z , og $\mu \left(\frac{\partial}{\partial \mu} z^\ell \right)_\beta - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} z^\ell \right)_\mu = 0$, kan dette skrives som

$$E = - \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \beta} \right)_z. \quad (28)$$

Med vårt uttrykk for $\log \Xi$ gir dette

$$E = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\hbar \omega z^\ell \cosh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \ell \right)}{4 \sinh^2 \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \ell \right)}, \quad (29)$$

som avviker litt fra resultatet i ligning (25). Årsaken er at (25) ikke inkluderer nullpunktsenergien. Vi ser at

$$E - \bar{E} = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\hbar \omega z^\ell}{4 \sinh^2 \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right)} \left(\cosh \frac{1}{2} \beta \hbar \omega - e^{-\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \ell} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^\ell}{2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \ell \right)} = \frac{1}{2} \hbar \omega N.$$

- e) Bruk resultatene fra de to foregående punktene til å finne E som funksjon av N til annen orden i N , dvs. bestem koeffisientene C_1 og C_2 i utviklingen

$$E = C_1 N + C_2 N^2 + \dots \quad (30)$$

Vi innfører $x \equiv \frac{1}{2} \beta \hbar \omega$. Da har vi funnet at

$$N = \frac{z}{2 \sinh x} + \frac{z^2}{2 \sinh 2x} + \dots$$

Dette kan løses iterativt med hensyn på z ,

$$\begin{aligned} z &= 2 \sinh x N - \frac{\sinh x}{\sinh 2x} z^2 + \dots = 2 \sinh x N - \frac{4 \sinh^3 x}{\sinh 2x} N^2 + \dots \\ &= 2 \sinh x N - \frac{2 \sinh^2 x}{\cosh x} N^2 + \dots \end{aligned}$$

Vi setter dette inn i ekspansjonen for $\bar{E}$

$$\bar{E} = \hbar \omega \left(\frac{z e^{-x}}{4 \sinh^2 x} + \frac{z^2 e^{-2x}}{4 \sinh^2 2x} + \dots \right) = \hbar \omega \left(\frac{e^{-x}}{2 \sinh x} N + \frac{1}{4 \cosh^2 x} N^2 + \dots \right) \quad (31)$$

Anta nå istedet at $\beta \hbar \omega \gg 1$, slik at man kan gjøre tilnærmingen

$$\sinh \frac{1}{2} \beta \hbar \omega \approx \frac{1}{2} e^{\frac{1}{2} \beta \hbar \omega}. \quad (32)$$

- f) Regn ut $\log \Xi$ med denne tilnærmingen.

Vi innfører igjen $x \equiv \frac{1}{2} \beta \hbar \omega$. Hvis $\sinh x \approx \frac{1}{2} e^x$, så gjelder også $\sinh \ell x \approx \frac{1}{2} e^{\ell x}$ for alle positive heltall ℓ . Vi finner

$$\log \Xi = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^\ell}{2 \sinh \ell x} \approx \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^\ell e^{-\ell x}}{\ell} = -\log (1 - z e^{-x}). \quad (33)$$

- g) Regn ut det midlere partikkeltallet N med denne tilnærmingen.

$$N = \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \mu} \right)_{\beta} = z \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial z} \right)_{\beta} = \frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}}. \quad (34)$$

- h) Regn ut den midlere energien E med denne tilnærmingen.

$$E = - \left(\frac{\partial \log \Xi}{\partial \beta} \right)_z = \frac{1}{2} \hbar \omega \frac{z e^{-x}}{1 - z e^{-x}} = \frac{1}{2} \hbar \omega N. \quad (35)$$

Kommentar: Dette betyr at alle partiklene er i $n = 0$ -tilstanden i denne tilnærmingen.

Oppgave 3. Python kode

Listing 1: Python code fragments

```

1 def make1DRandomWalkByTossingCoins(nsteps):
2     # Generate a one-dimensional random walk of length 'nsteps' by throwing (virtual) coins
3     randomSteps = numpy.random.randint(0, 2, nsteps)
4     randomWalk = numpy.cumsum(randomSteps-0.5)
5     return randomWalk
6
7 def plot1DRandomWalk(randomWalk):
8     # Plot a one-dimensional random walk as function of discrete time
9     pyplot.plot(randomWalk, 'ob')
10    pyplot.xlabel(r'Discrete_time_$n$')
11    pyplot.ylabel(r'Discrete_position_$X(n)$')
12    pyplot.title(r'A_1-dimensional_random_walk')
13    # pyplot.show()
14    pyplot.savefig("random1DWalk")

```

- a) Forklar hva som blir gjort i de to Python funksjonene listet over.

Den første funksjonen genererer en én-dimensjonal virrevandring av lengde $nsteps$, med verdiene $randomWalk[0], \dots, randomWalk[nsteps-1]$, og returnerer resultatet. Virrevandringen starter i posisjonen 0 ved (den diskrete) tiden -1.

- I linje 3 genereres et NumPy array, $randomSteps$, av $nsteps$ tilfeldige heltall mellom 0 (inkludert) og 2 (ikke inkludert).
- I linje 4 trekkes 0.5 fra hvert element i denne listen, og deretter genereres den akkumulerte summen

$$randomWalk[m] = \sum_{k=0}^m (randomSteps[k] - 0.5) \quad (36)$$

Kommentarer:

1. Programpakken `numpy` og `numpy.random` må ha vært importert før denne funksjonen kalles.
2. Merk at summasjonen (36) utføres av en NumPy funksjon, ikke i en Python løkke. Det siste ville vært mye mindre effektivt, og bør unngås i større numeriske beregninger.
3. For bedre overensstemmelse mellom variabelnavn og reell bruk burde subtraksjonen av 0.5 vært flyttet fra linje 3 til linje 2. (Det har ingen betydning for utførelsen av programmet, bare for den som leser koden.)

Den andre funksjonen genererer en figur av virrevandringen, og lagrer denne til en fil med navn `random1DWalk.xxx`, der `xxx` sannsynligvis er pdf eller png.

Kommentar:

Merk at oppgaven med *generering* av `randomWalk` (metafor for en prosess som kan ta lang tid, men som bare må gjøres en gang) er adskilt fra *plotting* av `randomWalk` (metafor for en prosess som sannsynligvis må gjøres mange ganger før resultatet blir som ønsket, men der hver iterasjon tar kort tid dersom vi allerede har `randomWalk` tilgjengelig).

b) Hvordan vil du ekstrahere endepunktet til `randomWalk`?

Best ved kommandoen

```
last = randomWalk[-1].
```

En alternativ, mindre elegant, mulighet er

```
end = len(a); last = randomWalk[end-1].
```

Kommandoen

```
last = randomWalk[nsteps-1]
```

forutsetter at vi har tilgang til korrekt verdi av `nsteps`, og er derfor mer usikker.

c) Hvordan vil du ekstrahere det største avviket fra startverdien i `randomWalk`?

Best ved kommandoen

```
numpy.max(numpy.abs(randomWalk)),
```

når man tar hensyn til at startverdien er 0.

Eksplisitt Python kode for dette vil introdusere tidkrevende bruk av en Python løkke, og derfor være *ulurt*.