Løsningsforslag til eksamen høsten 2009

Oppgave 1

a)

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

så

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

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 eksamensettet), 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

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

(oppgitt på eksamenssettet) der

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

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

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

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

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

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

$$B_2(T_\mathrm{B}) = 0$$

La oss nå skrive $T = T_\mathrm{B} + \widetilde{T}$ og

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

<u>(i) $T < T_\mathrm{B}$</u>:
Da er $T - T_\mathrm{B} < 0$ som medfører $\widetilde{T} < 0$. Vi får da

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

Altså finner vi at B_2 er negativ

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

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

<u>(ii) $T = T_\mathrm{B}$</u>:
Da er $B_2 = 0$, og trykket lik trykket av en ideell gass (når vi antar at tredje og høyere-ordens korreksjoner er neglisjerbare).

<u>(iii) $T > T_\mathrm{B}$</u>:
Da er $\widetilde{T}$ >0 og

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

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

Oppgave 2

a)

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

der

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

er Fermifunksjonen. Når $T = 0$ er

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

Det kjemiske potensialet ved $T = 0$ er *Fermienergien* ε_{F}, så vi kan skrive

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon < \varepsilon_{\mathrm{F}} \\ 0 & \varepsilon > \varepsilon_{\mathrm{F}} \end{cases} \tag{5}$$

så ved $T = 0$:

$$N = C_d V \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon^{(d-2)/2} = \frac{2}{d} C_d V \varepsilon_{\mathrm{F}}^{d/2} \tag{6}$$

$$U = C_d V \int_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon^{d/2} = \frac{2}{d+2} C_d V \varepsilon_{\mathrm{F}}^{(d+2)/2}$$

Deler vi disse på hverandre får vi:

$$\frac{U}{N} = \underline{\underline{\frac{d}{d+2}\varepsilon_{\mathrm{F}}}} \tag{7}$$

b) En delvis integrasjon av

$$P = C_d kT \int_0^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, \varepsilon^{(d-2)/2} \ln\left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right)$$

gir

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

c) Ved $T = 0$ blir trykket

$$P = \frac{2}{d}\frac{U}{V} = \frac{2}{d}\frac{d}{d+2}\frac{N}{V}\varepsilon_{\mathrm{F}} = \frac{2}{d+2}\rho\varepsilon_{\mathrm{F}}$$

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

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

Setter vi

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

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:

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

Ved å benytte oss av

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

får vi

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

som var det vi skulle vise.

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

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

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

(ii) $x \to 1$
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 $x \to 1$, som er det samme som $\varepsilon \to 0$ er altså

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

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

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

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

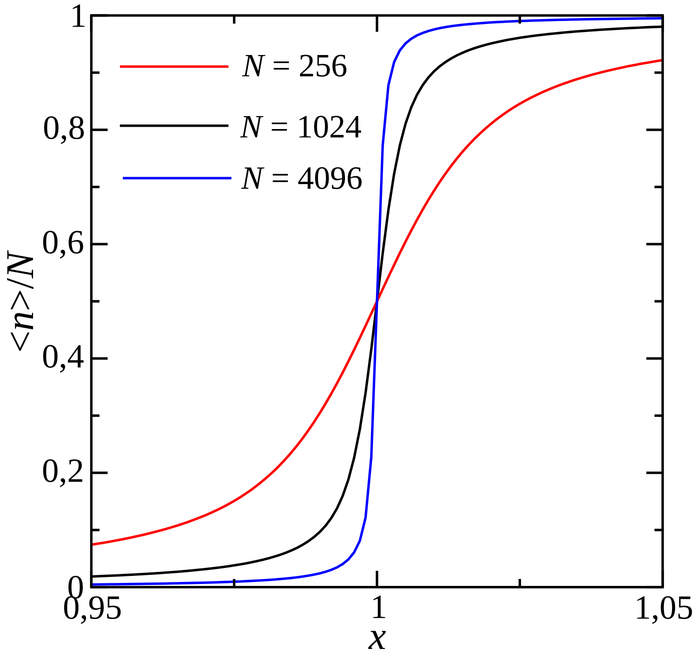

Figure 1: Midlere antall åpne basepar per totalt antall basepar $\langle n\rangle/N$ for tre ulike verdier av N.

d) Sannsynligheten for at det separerer helt er:

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

(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.