NTNU

Institutt for fysikk

Fakultet for naturvitenskap og teknologi

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

$$H = J\,(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1)\,. \tag{1}$$

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

Partisjonsfunksjonen blir

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

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

En direkte beregning av middelverdien gir

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

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

$$U \underset{T \to 0}{\longrightarrow} \begin{cases} -J & \text{hvis } J > 0, \\ 3J & \text{hvis } J < 0. \end{cases} \tag{4}$$

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

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

Vi finner

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k_B\beta^2\frac{\partial U}{\partial \beta} = k_B(\beta J)^2\left[\frac{4\,\mathrm{e}^{4\beta J}\cdot(1+3\,\mathrm{e}^{4\beta J})+(1-\mathrm{e}^{4\beta J})\cdot 12\mathrm{e}^{4\beta J}}{(1+3\,\mathrm{e}^{4\beta J})^2}\right]$$
$$= \frac{(4\beta J)^2\,\mathrm{e}^{4\beta J}}{(1+3\,\mathrm{e}^{4\beta J})^2}\,k_B = \frac{(4\beta J)^2\,\mathrm{e}^{-4\beta J}}{(3+\mathrm{e}^{-4\beta J})^2}\,k_B. \tag{5}$$

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

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

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

For $J > 0$ bruker vi uttrykkene

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

som gir

$$S = k_B\left[\frac{4\beta J\,\mathrm{e}^{-4\beta J}}{(3+\mathrm{e}^{-4\beta J})}+\ln\left(6+2\,\mathrm{e}^{-4\beta J}\right)\right]\underset{T\to 0}{\to} k_B\ln 6. \tag{7}$$

For $J < 0$ bruker vi uttrykkene

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

som gir

$$S = k_B\left[-\frac{12\beta J\,\mathrm{e}^{4\beta J}}{(1+3\,\mathrm{e}^{4\beta J})}+\ln\left(2+6\,\mathrm{e}^{4\beta J}\right)\right]\underset{T\to 0}{\to} k_B\ln 2. \tag{8}$$

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

$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}Q}{T} = \frac{C\mathrm{d}T}{T},\ \text{dvs. } S(T)-S(T_0) = \int_{T_0}^{T}\frac{C\,\mathrm{d}T'}{T'},$$

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

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

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

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

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

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

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

$$S \underset{T\to 0}{\to} k_B\ln\left(\text{Antall konfigurasjoner i grunntilstanden}\right). \tag{11}$$

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

En enkel metoder er å utnytte symmetrien i systemet:

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

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

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

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

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

som igjen leder til (12).

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

Oppgave 2. Kvantemagnetisme

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

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

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

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

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 $eB\mathcal{A}/h$ 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

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

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

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

We expand the logarithm in a series, using the formula

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

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

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 $(L\beta)^{-1/2}\,\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = (\pi k_B T/L)^{1/2}$.

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

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

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

e) Se på grensen $B \to 0$ 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 $B \to 0$. In this limit the factor from s_z-summation, $2\cosh(L\beta\varepsilon_b/2) \to 2$, which is the correct degeneracy factor for a spin-$\frac{1}{2}$ particle. Since further the factor from n-summation, $(L\beta\varepsilon_a/2)\,[\sinh(L\beta\varepsilon_a/2)]^{-1} \to 1$, 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

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

Beregn dette uttrykket til første orden i fugasiteten $z = \lambda^{-3}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}$, 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

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

which gives

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

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. $g > 1.633\ldots$) and diamagnetic for $g^2 < \frac{8}{3}$.

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

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

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

$$\int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t}}\, \mathrm{e}^{-t} = \sqrt{\pi}. \tag{23}$$