Departement Natuur- en Sterrenkunde, Faculteit Bètawetenschappen, UU.
In elektronische vorm beschikbaar gemaakt door de $\mathcal{TBC}$ van A–Eskwadraat.
Het college NS-335B werd in 2009/2010 gegeven door Prof. Dr. C. de Morais Smith.

Thermische Fysica 2 (NS-335B)
18 maart 2010

1. *Gebruik een apart vel voor elke opgave.*
2. *Schrijf uw naam en initialen op elk vel en op het eerste vel ook uw adres en studentnummer.*
3. *Schrijf duidelijk, onleesbaar werk kan niet worden gecorrigeerd.*
4. *Er mogen geen boeken of notities worden gebruikt. Een lijst van formules is beschikbaar aan het eind van het tentamen.*

Opgave 1 Een model voor ijs

In een eenvoudig model voor ijs (H_2O in vaste vorm) bevinden zich zuurstofatomen op een vierkant rooster, en elk zuurstofatoom is verbonden met zijn vier buren via waterstofbruggen: Er bevindt zich één waterstofatoom tussen tussen elk paar van zuurstof atomen. Deze waterstof atomen bevinden zich niet midden tussen de zuurstofatomen, maar zijn dichter bij de ene, dan bij de andere zuurstof. Er is een extra beperking: op de vier waterstofbruggen die aan een zuurstof vastzitten, zijn twee waterstofatomen dichtbij die zuurstof, en twee dichter bij zijn buren. Een mogelijke configuratie is getekend in figuur 1. Omdat de waterstofatomen positief geladen zijn, en de zuurstof negatief, heeft elk molecuul een dipoolmoment $\vec{D}$. Stel dat een elektrisch veld $\vec{E}$ is aangebracht, dat energetisch koppelt aan dit dipoolmoment, d.w.z., de Hamiltoniaan is

$$H = \sum_i \vec{D}_i \cdot \vec{E},$$

waarin de sommatie loopt over alle roosterposities (moleculen).

a) Teken de grondtoestand van het systeem, als de richting van het elektrische veld een hoek van 45 graden maakt met de roosterrichting, dus $E_x = E_y = \frac{1}{2}\sqrt{2}|E|$, en licht uw antwoord toe. (Vergeet niet in de tekening de richting van het elektrisch veld aan te geven!) *(0.5 punt)*

b) Laat zien dat voor kleine veldsterktes, de respons $\frac{\partial|\vec{D}|}{\partial E}$ op dit veld lineair is en evenredig met de natuurlijke fluctuaties $\langle \vec{D} \cdot \vec{D} \rangle$ van het dipoolmoment in afwezigheid van een elektrisch veld. *(1.0 punt)*

Opgave 2 Infinite Range Ising Model

We beschouwen een Isingmodel waarin *alle* spins $\sigma_i = \pm 1$ interacties met elkaar hebben met interactiesterkte $-J/N$, waarin N de hoeveelheid spins in het systeem is. Wanneer er een magnetisch veld H aanwezig is is de partitiefunctie gegeven door

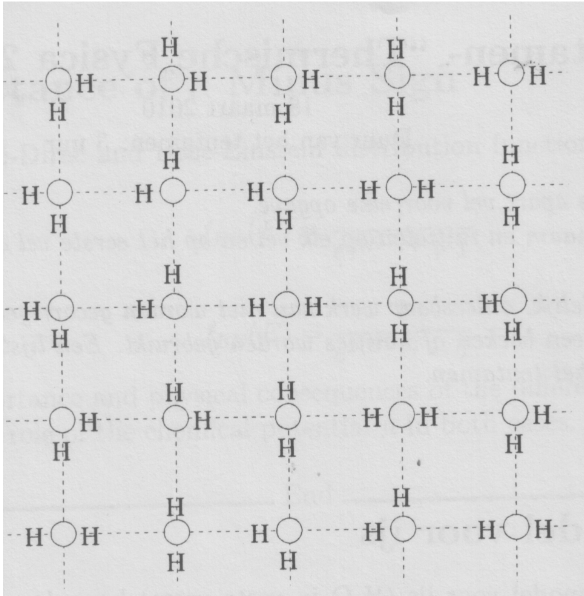
$$Z(\beta, H, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left(\frac{\beta J}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \sigma_i \right), \tag{1}$$

waarin $\sum_{\{\sigma_i\}}$ de som over alle 2^N spinconfiguraties van het systeem aanduidt.

a) Laat zien dat

$$\sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta(J\mu + H)\sum_i \sigma_i} = 2^N \prod_{i=1}^{N} \cosh\left[\beta(J\mu + H)\right] \tag{2}$$

waarin μ een nader te definiëren veld is. *(0.5 punt)*



Figuur 1: Een mogelijke configuratie van gecondenseerd H_2O (ijs).

b) Gebruik makende van de Gaussische identiteit,

$$\exp\left\{\frac{\beta J}{2N}\left(\sum_i \sigma_i\right)^2\right\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{\frac{2\pi}{N\beta J}}} \exp\left[-\frac{N\beta J}{2}\mu^2 + \beta J \mu \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\right],$$

en vergelijking 2, laat zien dat vergelijking 1 geschreven kan worden als

$$Z(\beta, H, N) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{\frac{2\pi}{N\beta J}}} \exp\left\{-\frac{N\beta J}{2}\mu^2 + N \log\left[2\cosh(\beta(H + \mu J))\right]\right\}$$

De magnetisatie m en susceptibiliteit χ kunnen gevonden worden uit (4) door afgeleiden te nemen naar het magnetische veld H. *(0.5 punt)*

c) De magnetisatie wordt gegeven door

$$m = \frac{1}{N\beta}\frac{\partial \log Z}{\partial H} = \langle f(\mu, H, \beta)\rangle,$$

waarin het gemiddelde is gedefinieerd als

$$\langle \ldots \rangle = \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{\frac{2\pi}{N\beta J}}} \ldots \exp\left\{-\frac{N\beta J}{2}\mu^2 + N \log\left[2\cosh(\beta(H + \mu J))\right]\right\}$$

Bereken de functie $f(\mu, H, \beta)$. *(0.5 punt)*

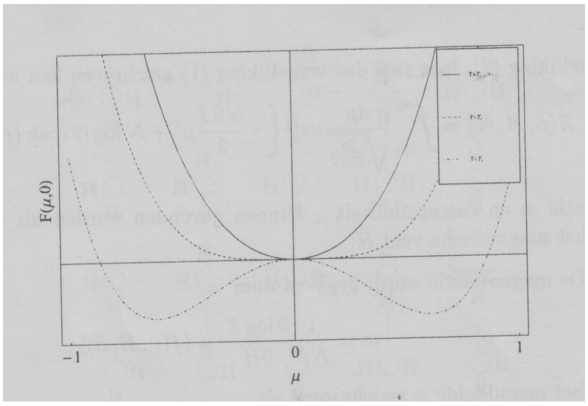
d) Bereken de susceptibiliteit in de limiet $N \to \infty$. De susceptibiliteit is gedefinieerd

$$\chi = \frac{1}{\beta N}\frac{\partial m}{\partial H}.$$

Laat zien dat

$$\chi = \langle \tanh^2(\beta(J\mu + H))\rangle - \langle \tanh(\beta(J\mu + H))\rangle^2.$$

Hint: De limiet $N \to \infty$ moet pas in de laatste stap genomen worden. *(0.5 punt)*



Figuur 2: De Landau vrije energie tegen μ voor $H = 0$.

e) Had u de vorm die u voor de susceptibiliteit gevonden hebt vooraf kunnen verwachten? Verklaar uw antwoord in termen van een bekend theorema.

Het is nuttig om de functie $\mathcal{F}(\mu, H)$ te definiëren als

$$\mathcal{F}(\mu, H) \equiv \frac{J}{2}\mu^2 - \frac{1}{\beta}\log\left[2\cosh(\beta(J\mu + H))\right],$$

zo dat

$$Z(\beta, H, N) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{\frac{2\pi}{N\beta J}}} e^{-\beta N \mathcal{F}(\mu, H)}.$$

In de therrnodynamische limiet, $N \to \infty$, geeft de methode van stationaire fase, toegepast op de partitiefunctie Z, een exact resultaat (voor dit model). De conditie van stationariteit is

$$\frac{\partial}{\partial\mu}\mathcal{F}\mu, H = 0. \tag{3}$$

De minima μ_i, waar $i \in 1, ..., n$ en n de hoeveelheid minima is, die gevonden zijn met bovenstaande conditie, geven de dominante bijdragen aan de partitiefunctie. Omdat voor dit model de methode van stationaire fase exact is in de thermodynamische limiet $N \to \infty$, kunnen we de partitiefunctie schrijven als

$$Z(\beta, H, N) = \sum_{i=1}^{n} e^{-\beta N \mathcal{F}(\mu_i, H)}.$$

Let op dat we nu niet meer over het veld μ hoeven te integreren! Wanneer er slechts één absoluut minimum μ_0 is dan zal in de 'thermodynamische limiet de magnetisatie corresponderen met $m = \mu_0$. Dit betekent dat het geïntroduceerde veld μ nu de echte magnetisatie is.

f) Laat zien dat de stationariteitsconditie in vergelijking 3 geeft dat

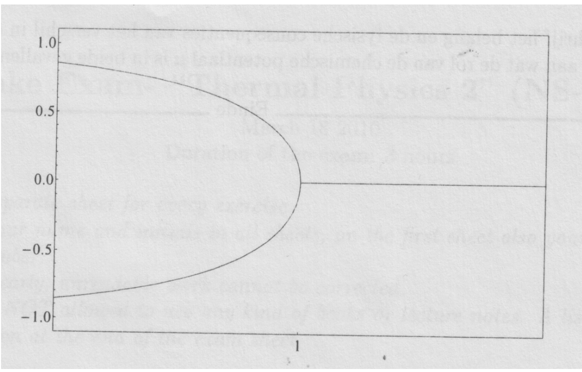
$$\mu = \tanh[\beta(J\mu + H)] \tag{4}$$

(0.5 punt)

g) In figuur 2 is de Landau vrije energie tegen μ geplot. Wat is de orde van deze faseovergang? Verklaar uw antwoord. *(0.8 punt)*

h) Nu willen we de susceptibiliteit berekenen wanneer er geen magnetisch veld is, $H = 0$, door de methode van stationaire fase te gebruiken. Laat zien dat de susceptibiliteit, die gevonden kan worden door vergelijking 4 te differentiëren naar H, gelijk is aan

$$\chi_0 = \frac{1}{\beta}\left.\frac{\partial\mu}{\partial H}\right|_{H=0} = \frac{1 - m^2}{1 - \beta J(1 - m^2)},$$



Figuur 3: Iets tegen iets ...

waarin de magnetisatie voldoet aan $m = \tanh(\beta J m)$. Hint: Realiseert U zich dat de magnetisatie is een functie van het magneetveld aan beide kanten van het gelijkheids teken, $\mu = \mu(H)$. *(0.7 punt)*

Voor $T > T_c$ is er slechts een minimum μ_0 die met het verdwijnen van de magnetisatie correspondeert, $m = 0$, deze toestand wordt de paramagnetische toestand genoemd. De susceptibiliteit wordt nu gegeven door

$$\chi_0^{para} = \frac{k_b T}{k_b T - J},$$

i) Bereken de kritische temperatuur van deze faseovergang. Had u het gedrag van de susceptibiliteit dichtbij de kritische temperatuur T_c kunnen verwachten door naar figuur 2 te kijken? Verklaar uw antwoord in termen van de orde van de faseovergang. *(1.0 punt)*

j) Wetende dat figu11r 2 en 3 gerelateerd zijn, wat is er horizontaal en verticaal geplot in figuur 3? Verklaar uw antwoord. *(0.5 punt)*

k) Dichtbij de kritische temperatuur T_c, kunnen we de expansie $tanh(x) \approx x - x^3/3$ maken. Geef de waarde van de kritische exponent ν, die gedefinieerd is als

$$\mu \overset{T \to T_c}{\sim} \left(\frac{T_c - T}{T} \right)^{\nu}$$

Opgave 3 Een belangrijk minteken

a) De Fermi-Dirac en Bose-Einstein distributiefuncties zijn respectievelijk gegeven door

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1},$$

en

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - 1}.$$

Beschrijf het belang en de fysische consequenties van het verschil in teken tussen de twee. Geef aan wat de rol van de chemische potentiaal μ is in beide gevallen. Noem voorbeelden!

Formules

- Maxwell-Boltzmanndistributie: $g(\epsilon) \propto \exp(-\epsilon/k_B T)$
- Planckdistributie: $f(E) = \frac{1}{e^{\beta E} - 1}$
- Fermi-Dirac- en Bose-Einsteindistributie: $f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} \pm 1}$, waar het teken + voor fermio- nen staat en − voor bosonen.

- Gaussische integraal: $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$
- Stirlingbenadering: $\log(n!) \approx n \log n - n$