Date: 1402/09/23

In the name of God

Advanced Statistical Mechanics I, Second Midterm exam, (Time allowed: 3 hours)

1. We simulated the behavior of a thermodynamic system. Each time we ran the program, we obtained a different energy for the energy of the whole system, which data can be seen in the list below. In the simulation, we assumed the temperature of the system to be $T = 27°\mathrm{C}$. What is the approximate amount of heat capacity in constant volume for this system? (10 points)

$$data = [-5, -4, 2, 1, 3, 4, -1, -3, 5, -2]$$

2. The molecule of an ideal gas consists of two atoms, of mass m, rigidly separated by a distance d. The atoms of each molecule carry charges q and $-q$ respectively, therefore have P as electric dipole, and the gas is placed in an electric field $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\hat{k}$.

A: Find the mean polarization as (10 points)

$$\langle P_N \rangle = N\langle P \rangle = N \int d\phi \, d\theta \, \sin(\theta) \, \rho_{canonic}(\theta, \phi) \, P$$

B: Compute the specific heat per molecule for kinetic and electric degrees of freedoms, namely $C_V = C_V^{kinetic} + C_V^{electric}$, if quantum effects can be neglected. (10 points)

3. Consider a system consisting of $3N$ ultra-relativistic particles moving in one dimension in the L which is the length of the space available, whose Hamiltonian is given by $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{3N} |p_i|c$.

A: Show that the partition function in this case is given by: (10 points)

$$Z_{3N}(L, \beta) = \frac{1}{(3N)!}\left[2L\left(\frac{k_B T}{hc}\right)\right]^{3N}$$

B: Consider $\beta = \beta' + i\beta'' = 1/k_B T + i\beta''$, show that the density of states of this system is given by: (5 points)

$$g(\epsilon) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\beta' - i\infty}^{\beta' + i\infty} d\beta \, e^{\beta\epsilon} \, Z_{3N}(L, \beta) = \frac{[2L\epsilon/(hc)]^{3N}}{\epsilon\Gamma(3N+1)\Gamma(3N)}$$

Hint: $\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \, \frac{e^{\beta\epsilon}}{\beta^K} = 2\pi i b_{-1}(\beta = 0) = \frac{1}{(K-1)!}\left(\frac{d}{d\beta}\right)_{\beta=0}^{K-1} [\beta^K e^{\beta\epsilon}/\beta^K]$

4. For the Grand-Canonical ensemble show that the probability of finding a micro-state is given by: (10 points)

$$\rho(\vec{q}, \vec{p}) d^{3N}q d^{3N}p \sim e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)} d^{3N}q d^{3N}p$$

5. Equipartition theorem: Suppose that for a system in D-dimension with N particles, the Hamiltonian is given by:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{DN}\left(\frac{p_i^{\xi}}{2m} + m q_i^{\gamma}\right) - \sum_{i=1}^{N}(Bm_i + EP_i)$$

here, B is an external magnetic field and m is intrinsic magnetic moment, also E is external electric field and P is intrinsic dipole moment. Using equipartition theorem, show that: (5 points)

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{DN}{\xi} k_B T + \frac{DN}{\gamma} k_B T - NB\langle m \rangle - NE\langle P \rangle$$

Good luck, Movahed

« پاسخنامه »

امتحان میانترم دوم مکانیک آماری پیشرفته

1

$$\langle(\Delta E)^2\rangle \equiv \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = k_B T^2 C_v$$

$$C_v = \frac{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}{k_B T^2} \qquad T = 27c^\circ = 300k^\circ$$

$$\langle E\rangle = \frac{-5-4-3-2-1+1+2+3+4+5}{10} = 0$$

$$\langle E^2\rangle = \frac{2(5)^2+2(4)^2+2(3)^2+2(2)^2+2(1)^2}{10} = 11$$

$$C_v = \frac{11}{k_B \times (300)^2} = 8.86\times 10^{18}$$

---

2 A)

$$E = -E_0 \cos\theta \quad , \quad E_0 = dq\varepsilon \rightarrow$$ انرژی دوقطبی الکتریکی در حضور میدان خارجی

$$\langle P_N\rangle = N\langle P\rangle = N\left(\frac{\int qd\cos\theta\, e^{\beta E_0\cos\theta - \beta\frac{P^2}{2m}} d\Omega \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}}{\int e^{\beta E_0\cos\theta - \beta\frac{P^2}{2m}} d\Omega \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}}\right)$$

$$= N\left(\frac{\cancel{\int e^{-\beta\frac{P^2}{2m}} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}} \times \int qd\cos\theta\, e^{\beta E_0\cos\theta} d\Omega}{\cancel{\int e^{-\beta\frac{P^2}{2m}} \frac{d^3p\, d^3q}{h^3}} \times \int e^{\beta E_0\cos\theta} d\Omega}\right)$$

$$= N\left(\frac{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} qd\cos\theta \, e^{\beta E_0 \cos\theta}\sin\theta \, d\theta \, d\phi}{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} e^{\beta E_0\cos\theta}\sin\theta \, d\theta \, d\phi}\right) = N\left(\frac{qd\int_0^{\pi}\cos\theta \, e^{\beta E_0\cos\theta}\sin\theta \, d\theta}{\int_0^{\pi} e^{\beta E_0\cos\theta}\sin\theta \, d\theta}\right)$$

$$\int_0^{\pi}\cos\theta \, e^{\alpha\cos\theta}\sin\theta \, d\theta = -\int_1^{-1} x e^{\alpha x} dx \qquad x = \cos\theta$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\int_1^{-1} e^{\alpha x} dx\right) = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{1}{\alpha} e^{\alpha x}\Big]_1^{-1}\right) = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{e^{-\alpha} - e^{\alpha}}{\alpha}\right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial\alpha}\left(2\frac{\sinh\alpha}{\alpha}\right) = \frac{2\cosh\alpha \cdot \alpha - 2\sinh\alpha}{\alpha^2} = \frac{2\cosh\alpha}{\alpha} - \frac{2\sinh\alpha}{\alpha^2}$$

$$\int_0^{\pi} e^{\alpha\cos\theta}\sin\theta \, d\theta = -\frac{1}{\alpha} e^{\alpha\cos\theta}\Big]_0^{\pi} = \frac{e^{\alpha} - e^{-\alpha}}{\alpha} = \frac{2\sinh\alpha}{\alpha}$$

$$\frac{\frac{2\cosh\alpha}{\alpha} - \frac{2\sinh\alpha}{\alpha^2}}{\frac{2\sinh\alpha}{\alpha}} = \coth\alpha - \frac{1}{\alpha}$$

$$\langle P_N\rangle = Nqd\left(\coth(\beta q d\varepsilon) - \frac{1}{\beta q d\varepsilon}\right)$$

مشاهده می‌کنیم که بخش انرژی جنبشی تأثیری بر قطبش ندارد و تنها بخشی از هامیلتونی که حاصل برهمکنش ذره با میدان الکتریکی است در ایجاد قطبش مؤثر است.

B) برخلاف بخش قبل که جمله انرژی جنبشی نقشی ایفا نمی‌کرد. اینجا برای محاسبه C_v نیاز به حساب کردن انرژی درونی داریم که انرژی درونی نیز از یک بخش برهمکنش با میدان الکتریکی خارجی و یک بخش انرژی جنبشی تشکیل می‌شود.

$$U = \frac{3}{2}Nk_BT - \langle P\rangle \varepsilon = \frac{3}{2}Nk_BT - N\varepsilon q d\left[\coth(\beta E_0) - \frac{1}{\beta E_0}\right]$$

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_v = \frac{-1}{k_BT^2}\left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_v = \underbrace{\frac{3}{2}Nk_B}_{C_v^{kinetic}} + \underbrace{Nk_B\left[1 - \frac{(E_0\beta)^2}{\sinh^2(E_0\beta)}\right]}_{C_v^{electric}}$$

---

3 A)

$$Z_{3N} = \frac{1}{(3N)!\,h^{3N}}\int e^{-\beta c\sum_{i=1}^{3N}|p_i|}\prod_{i=1}^{3N} dq_i\,dp_i$$

$$= \frac{1}{(3N)!\,h^{3N}}\left[\int_0^L dq\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta c|p|}\,dp\right]^{3N}$$

$$= \frac{L^{3N}}{(3N)!\,h^{3N}}\left[2\int_0^{\infty} e^{-\beta c p}\,dp\right]^{3N} = \frac{L^{3N}}{(3N)!\,h^{3N}}\left[\frac{-2}{\beta c}\left(e^{-\beta c p}\right)_0^{\infty}\right]^{3N}$$

$$= \frac{L^{3N}}{(3N)!\,h^{3N}}\left[2\,\frac{k_BT}{c}\right]^{3N}$$

$$Z_{3N} = \frac{1}{(3N)!}\left[2L\,\frac{k_BT}{ch}\right]^{3N}$$

(B) برای محاسبه $g(\varepsilon)$ از حساب مانده ها استفاده می کنیم :

$$\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \frac{e^{\beta\varepsilon}}{\beta^K} = 2\pi i\, b_{-1}(\beta=0) = \frac{2\pi i}{(K-1)!}\left(\frac{d}{d\beta}\right)^{K-1}_{\beta=0}\left[\frac{\beta^k e^{\beta\varepsilon}}{\beta^k}\right]$$

در راهنمایی سوال نحوه محاسبه آن قید شده است :

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta\, e^{\beta\varepsilon}\left(\frac{1}{(3N)!}\left(2L\left(\frac{k_B T}{hc}\right)\right)^{3N}\right)$$

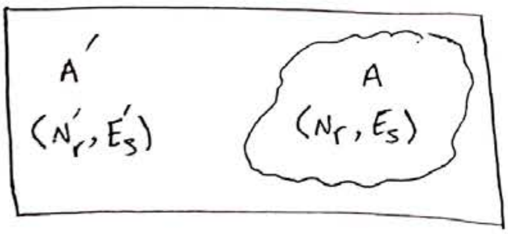
$$= \frac{1}{2\pi i}\frac{1}{(3N)!}\left(\frac{2L}{hc}\right)^{3N}\int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta\, \frac{e^{\beta\varepsilon}}{\beta^{3N}}$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\frac{1}{(3N)!}\left(\frac{2L}{hc}\right)^{3N}\left(\frac{2\pi i}{(3N-1)!}\left(\frac{d}{d\beta}\right)^{3N-1}_{\beta=0}\left[\frac{\beta^k e^{\beta\varepsilon}}{\beta^k}\right]\right)$$

$$= \frac{1}{(3N)!}\left(\frac{2L}{hc}\right)^{3N}\frac{1}{(3N-1)!}\,\varepsilon^{3N-1} = \frac{\left[\frac{2L\varepsilon}{hc}\right]^{3N}}{\varepsilon\,\Gamma(3N+1)\,\Gamma(3N)}$$

---

(4) یک سیستم را در حال تبادل ذره و انرژی با یک منبع گرمایی در نظر می گیریم.



می دانیم که مجموع تعداد ذرات و انرژی سیستم + منبع گرمایی مقداری ثابت است .

$$N_r + N'_r = N^{(0)} = \text{Constant}$$

$$E_s + E'_s = E^{(0)} = \text{Constant}$$

چون تعداد ذرات و انرژی سیستم در مقابل منبع گرمایی قابل چشم پوشی است ، پس داریم :

$$\frac{N_r}{N^{(0)}} = \left(1 - \frac{N'_r}{N^{(0)}}\right) \lll 1 \quad , \quad \frac{E_s}{E^{(0)}} = \left(1 - \frac{E'_s}{E^{(0)}}\right) \lll 1$$

احتمال پیدا کردن سیستم در حالت (N_r, E_s) مطابق زیر است:

$$P_{r,s} \propto \Omega'(N^{(0)} - N_r \,,\, E^{(0)} - E_s)$$

$$\ln \Omega'(N^{(0)} - N_r \,,\, E^{(0)} - E_s) = \ln \Omega'(N^{(0)}, E^{(0)}) + \left(\frac{\partial \ln \Omega'}{\partial N'}\right)_{N' = N^{(0)}} (-N_r)$$

$$+ \left(\frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'}\right)_{E' = E^{(0)}} (-E_s) + \cdots$$

$$\simeq \ln \Omega'(N^{(0)}, E^{(0)}) + \frac{\mu'}{kT'} - \frac{1}{kT'} E_s$$

$$P_{r,s} \propto \exp(-\beta(E_s - \mu N_r))$$

در اینجا N_r همان N یا تعداد ذرات در حالتی است که می‌خواهیم سیستم را بررسی کنیم و E_s همان H انرژی یا هامیلتونی سیستم است.

$$\rho(\vec{p}, \vec{q})\, d^{3N}p\, d^{3N}q \sim e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)}\, d^{3N}p\, d^{3N}q$$

در خط بالا چون از یک فضای گسسته به یک فضای پیوسته می‌رویم احتمال را با چگالی احتمال عوض می‌کنیم و در دیفرانسیل فضای حالت ضرب می‌کنیم.

روش دوم

$\mathcal{N}$ سیستم یکسان را به عنوان تعداد آنسامبل های مورد نظرمان فرض می‌کنیم:

$$\sum_{r,s} n_{r,s} = \mathcal{N} \quad , \quad \sum_{r,s} n_{r,s} N_r = \mathcal{N} \bar{N} \quad \text{و} \quad \sum_{r,s} n_{r,s} E_s = \mathcal{N} \bar{E}$$

توزیع انرژی و ذرات در میان آنسامبل ها را به صورت زیر می‌توانیم بنویسیم:

$$W\{n_{r,s}\} = \frac{\mathcal{N}!}{\prod_{r,s} (n_{r,s}!)}$$

با استفاده از روش ضرائب نامعین لاگرانژ احتمال آمدن یک حالت مورد نظر از میان آنسامبل های مختلف را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$\frac{n^*_{r,s}}{\mathcal{N}} = \frac{\exp(-\alpha N_r - \beta E_s)}{\sum_{r,s} \exp(-\alpha N_r - \beta E_s)}$$

5

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{DN} \frac{p_i^{\xi}}{2m} + m q_i^{\gamma} \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^{N} B m_i + E P_i \right\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{DN} \left\langle \frac{p_i^{\xi}}{2m} + m q_i^{\gamma} \right\rangle - \sum_{i=1}^{N} \left(B \langle m \rangle + E \langle P \rangle \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{DN} \left(\left\langle \frac{1}{\xi} p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{\gamma} q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\rangle \right) - NB\langle m \rangle - NE\langle P \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{DN} \left(\frac{1}{\xi} \left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle + \frac{1}{\gamma} \left\langle q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\rangle \right) - NB\langle m \rangle - NE\langle P \rangle$$

از رابطه $\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle = k_B T$ استفاده می‌کنیم :

$$= \frac{DN}{\xi} k_B T + \frac{DN}{\gamma} k_B T - NB\langle m \rangle - NE\langle P \rangle$$

Scanned by CamScanner