Στατιστική Μηχανική, Εξεταστική Ιουνίου, 26/06/2010

1. (*Βαθμοί 2*) Η συνάρτηση διαμερισμού του μονοδιάστατου μοντέλου *Ising* χωρίς εξωτερικό πεδίο δίνεται από την έκφραση $Q = \left(e^{\beta J} + e^{-\beta J}\right)^N$.

(α) Να εκφραστεί η εντροπία (S/N) και η θερμοχωρητικότητα (C/N) ανά *spin* συναρτήσει της θερμοκρασίας *T* και της παραμέτρου *J*.
(β) Να αποδοθούν με πρόχειρα γραφήματα οι θερμοκρασιακές εξαρτήσεις των S/N και C/N για σταθερό *J>0*.

2. (*Βαθμοί 2.5*) Αν το ανάπτυγμα Landau της διαφοράς ελεύθερης ενέργειας *Helmholtz* συστήματος που παρουσιάζει μετατροπή τάξης-αταξίας είναι $\Delta F \approx \frac{a}{2}(T - T_c)\eta^2 + \frac{b}{4}\eta^4$, με a, b, T_c θετικές σταθερές, (**α**) να βρεθεί η διαφορά εντροπίας ΔS και η διαφορά εσωτερικής ενέργειας ΔU, (**β**) να αποδοθούν με πρόχειρα γραφήματα οι εξαρτήσεις των ΔS και ΔU από την θερμοκρασία στην περιοχή της τιμής T_c και (**γ**) για ένα σύστημα για το οποίο ισχύει $b/a = 3T_c$, να υπολογισθεί η παράμετρος τάξης του συστήματος σε θερμοδυναμική ισορροπία στις θερμοκρασίες $T_1 = 0.95T_c$, $T_2 = T_c$ και $T_3 = 1.2T_c$.

3. (*Βαθμοί 2.5*) Ένας κρύσταλλος αποτελείται από *N* μη αλληλεπιδρώντα άτομα με σπιν 1 και βρίσκεται εντός μαγνητικού πεδίου *H*. Η ενέργεια κάθε ατόμου σε αυτή την περίπτωση είναι $\sigma H, 0$ ή $-\sigma H$. Αν το υλικό βρίσκεται σε θερμοκρασία *T*, (α) να υπολογισθεί η συνάρτηση επιμερισμού και η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος (β) να αποδοθεί σε πρόχειρο γράφημα η (μέση) μαγνήτιση ανά άτομο ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, (γ) Δείξτε ότι για πολύ ασθενή μαγνητικά πεδία η μέση μαγνήτιση είναι γραμμική με το πεδίο *H*.

4. (*Βαθμοί 2*) Μια γραφιτική επιφάνεια βρίσκεται σε περιβάλλον αερίου αργού (το θεωρούμε ως ιδανικό αέριο) θερμοκρασίας *T* και πίεσης *P*. Ορισμένα από τα άτομα αργού προσροφούνται πάνω στην επιφάνεια του γραφίτη. Η ενέργεια προσρόφησης κάθε ατόμου είναι $-E_b$, ($E_b > 0$). Θεωρούμε ότι τα προσροφημένα άτομα συμπεριφέρονται ως ιδανικό αέριο σε δύο διαστάσεις. Υπολογίστε τη συγκέντρωση (άτομα ανά μονάδα επιφάνειας) του αργού στην επιφάνεια του γραφίτη ως συνάρτηση της θερμοκρασίας *T* και της πίεσης *P*.

5. (*Βαθμοί 1*) Θεωρούμε ότι ένα μακρομόριο σε διάλυμα μπορεί να βρεθεί σε δύο μόνο μορφές. Είτε ως εκτεταμένο του με βαθμό εκφυλισμό g_1 ή ως συρρικνωμένο με βαθμό εκφυλισμού g_2. Αν από πειραματικές μετρήσεις γνωρίζουμε ότι σε ένα πολύ αραιό διάλυμα τέτοιων μορίων οι δύο αυτές καταστάσεις βρίσκονται σε αναλογία 1:1 όταν η θερμοκρασία είναι T_0 να υπολογίσετε πόσο διαφέρουν ενεργειακά οι δύο καταστάσεις.

$$k_B = 1.38066\times10^{-23}\ \mathrm{JK}^{-1} = 8.617\times10^{-5} eVK^{-1},\ h = 6.626\times10^{-34}\ \mathrm{Js},\ \ln N! \simeq N\ln N - N$$

$$F = E - TS,\ \ S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{kT^2}\frac{\partial F}{\partial \beta},\ C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -k\beta^2\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)_V,\ \ P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,$$

$$Q_{id} = \Lambda^{-3N}V^N,\quad \Lambda = \frac{h}{\left(2\pi mkT\right)^{1/2}}$$

ΔΙΑΡΚΕΙΑ ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ 2,5 ώρες
Καλή Επιτυχία

4. (*Βαθμοί 2*) Μια γραφιτική επιφάνεια βρίσκεται σε περιβάλλον αερίου αργού (το θεωρούμε ως ιδανικό αέριο) θερμοκρασίας *T* και πίεσης *P*. Ορισμένα από τα άτομα αργού προσροφούνται πάνω στην επιφάνεια του γραφίτη. Η ενέργεια προσρόφησης κάθε ατόμου είναι $-E_b$, ($E_b > 0$). Θεωρούμε ότι τα προσροφημένα άτομα συμπεριφέρονται ως ιδανικό αέριο σε δύο διαστάσεις. Υπολογίστε τη συγκέντρωση (άτομα ανά μονάδα επιφάνειας) του αργού στην επιφάνεια του γραφίτη ως συνάρτηση της θερμοκρασίας *T* και της πίεσης *P*.

Για το περιβάλλον αργού

$$Q_{id}^{(3d)} = \frac{1}{N!}\Lambda^{-3N}V^N$$

$$\begin{aligned} F_{id}^{(3d)} &= -kT\ln\left(\frac{1}{N!}\Lambda^{-3N}V^N\right) = -kT\left[N\ln\left(\Lambda^{-3}V\right) - N\ln N + N\right] \\ &= -NkT\left(1 - \ln\frac{N\Lambda^3}{V}\right) \end{aligned} \tag{1}$$

$$\mu_{Ar}^{(3d)} = -\frac{\partial F_{id}^{(3d)}}{\partial N} = kT\left(1 - \ln\frac{N\Lambda^3}{V}\right) - kT = -kT\ln\frac{N\Lambda^3}{V}$$

Για το αργό στην επιφάνεια. Έστω n άτομα σε επιφάνεια A

$$Q_{id}^{(2d)} = \frac{1}{n!}\Lambda^{-2n}A^n e^{\beta nE_b}$$

$$F_{id}^{(2d)} = -kT\ln\left(\frac{1}{n!}\Lambda^{-2n}A^n e^{\beta nE_b}\right) = -nkT\left(1 - \ln\frac{n\Lambda^2}{Ae^{\beta E_b}}\right) \tag{2}$$

$$\mu_{Ar}^{(2d)} = -\frac{\partial F_{id}^{(2d)}}{\partial n} = kT\left(1 - \ln\frac{n\Lambda^2}{Ae^{\beta E_b}}\right) + kT = -kT\ln\frac{n\Lambda^2}{Ae^{\beta E_b}}$$

Στην ισορροπία

$$\mu_{Ar}^{(2d)} = \mu_{Ar}^{(3d)} \Rightarrow \frac{N\Lambda^3}{V} = \frac{n\Lambda^2}{Ae^{\beta E_b}} \Rightarrow \boxed{\frac{n}{A} = \frac{N}{V}\Lambda e^{\beta E_b} \overset{PV=NkT}{=} P\frac{\Lambda}{kT}e^{\beta E_b}} \tag{3}$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\Lambda = \dfrac{h}{\left(2\pi mkT\right)^{1/2}}$ έχουμε

$$\frac{n}{A} = P\frac{h}{\left(2\pi m\right)^{1/2}}\frac{1}{\left(kT\right)^{3/2}}e^{\beta E_b} \propto PT^{-3/2}e^{\beta E_b} \tag{4}$$

Επίσης έχουμε

$$\frac{n}{A} = \frac{1}{\Lambda^2}\frac{N\Lambda^3}{V}e^{\beta E_b} = \frac{1}{\Lambda^2}e^{-\beta\mu_{Ar}^{(3d)}}e^{\beta E_b} = \frac{1}{\Lambda^2}e^{-\beta\left(\mu_{Ar}^{(3d)} - E_b\right)} \tag{5}$$

5. (*Βαθμοί 1*) Θεωρούμε ότι ένα μακρομόριο σε διάλυμα μπορεί να βρεθεί σε δύο μόνο μορφές. Είτε ως εκτεταμένο του με βαθμό εκφυλισμό g_1 ή ως συρρικνωμένο με βαθμό εκφυλισμού g_2. Αν από πειραματικές μετρήσεις γνωρίζουμε ότι σε ένα πολύ αραιό διάλυμα τέτοιων μορίων οι δύο αυτές καταστάσεις βρίσκονται σε αναλογία 1:1 όταν η θερμοκρασία είναι T_0 υπολογίστε πόσο διαφέρουν ενεργειακά οι δύο καταστάσεις.

$$\begin{aligned} \frac{N_1}{N} &= q^{-1} g_1 e^{-\beta\varepsilon_1} = q^{-1} e^{-\beta\varepsilon_1}\left(g_1 + g_2 e^{-\beta\delta\varepsilon}\right) \\ \frac{N_2}{N} &= q^{-1} g_2 e^{-\beta\varepsilon_2} = q^{-1} e^{-\beta\varepsilon_1}\left(g_1 + g_2 e^{-\beta\delta\varepsilon}\right) \\ \frac{N_1}{N_2} &= \frac{g_1 e^{-\beta\varepsilon_1}}{g_2 e^{-\beta\varepsilon_2}} = \frac{g_1}{g_2} e^{-\beta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \end{aligned} \tag{6}$$

Σε T_0 έχουμε

$$\frac{g_1}{g_2} e^{-(\varepsilon_1-\varepsilon_2)/kT_0} = 1 \Rightarrow -(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/kT_0 = \ln(g_2/g_1) \Rightarrow \varepsilon_2 - \varepsilon_1 = kT_0 \ln(g_2/g_1) \tag{7}$$

2. (*Βαθμοί 2.5*) Αν το ανάπτυγμα Landau της διαφοράς ελεύθερης ενέργειας *Helmholtz* συστήματος που παρουσιάζει μετατροπή τάξης-αταξίας είναι $\Delta F \approx \frac{a}{2}(T-T_c)\eta^2 + \frac{b}{4}\eta^4$, με a,b,T_c θετικές σταθερές, (**α**) να βρεθεί η διαφορά εντροπίας ΔS και η διαφορά εσωτερικής ενέργειας ΔU, (**β**) να αποδοθούν με πρόχειρα γραφήματα οι εξαρτήσεις των ΔS και ΔU από την θερμοκρασία στην περιοχή της τιμής T_c και (**γ**) για ένα σύστημα για το οποίο ισχύει $b/a = 3T_c$, να υπολογισθεί η παράμετρος τάξης του συστήματος σε θερμοδυναμική ισορροπία στις θερμοκρασίες $T_1 = 0.95T_c$, $T_2 = T_c$ και $T_3 = 1.2T_c$.

(α) Η ελεύθερη ενέργεια κάθε συστήματος σε θερμοδυναμική ισορροπία είναι η ελάχιστη δυνατή. Έτσι για το σύστημα σε θερμοκρασία T θα πρέπει να ισχύει: $\partial\Delta F/\partial\eta = 0$. Η συνθήκη αυτή δίνει τη θερμοκρασιακή εξάρτηση της παραμέτρου τάξης $\eta(T)$. Έχουμε

$$\partial\Delta F/\partial\eta = 0 \Rightarrow a(T-T_c)\eta + b\eta^3 \Rightarrow \begin{array}{c} \eta = 0 \\ \text{ή} \\ \eta = \pm\sqrt{-\frac{a}{b}(T-T_c)} \end{array}$$

Προφανώς οι λύσεις $\eta = \pm\sqrt{-\frac{a}{b}(T-T_c)}$ έχουν φυσικό νόημα μόνο εφόσον $-\frac{a}{b}(T-T_c) < 0$ ή όταν $T < T_c$ δεδομένου ότι $a,b > 0$.

Συνεπώς για $T > T_0$ έχουμε μία μόνο λύση την $\eta = 0$ ενώ για $T < T_c$ θα πρέπει να εξετασθεί ποια(ες) από τις τρεις λύσεις για την παράμετρο τάξης είναι αυτή(ες) που αντιστοιχεί στην ελάχιστη τιμή της ελεύθερης ενέργειας. Έχουμε

$$\Delta F(\eta = 0) = 0$$

$$\Delta F\left(\eta = \sqrt{-\frac{a}{b}(T-T_c)}\right) = -\frac{a^2}{2b}(T-T_c)^2 + \frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 = -\frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 < 0$$

$$\Delta F\left(\eta = -\sqrt{-\frac{a}{b}(T-T_c)}\right) = -\frac{a^2}{2b}(T-T_c)^2 + \frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 = -\frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 < 0$$

Παρατηρούμε ότι για $T < T_c$ οι λύσεις $\eta = \pm\sqrt{-\frac{a}{b}(T-T_c)}$ αντιστοιχούν σε χαμηλότερη ελεύθερη ενέργεια από τη λύση $\eta = 0$ και ότι και η δύο έχουν την ίδια ελεύθερη ενέργεια.

Έχουμε συνεπώς

$$\Delta F = \begin{cases} 0 & T \ge T_c \\ -\frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 & T < T_c \end{cases}$$

και

$$\eta(T) = \begin{cases} 0 & T \ge T_c \\ \pm\sqrt{-\frac{a}{b}(T-T_c)} & T < T_c \end{cases} \qquad \text{(A)}$$

Έχουμε

$$\Delta S = -\frac{\partial \Delta F}{\partial T} = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \dfrac{a^2}{2b}(T - T_c) & T < T_c \end{cases}$$

Και

$$\Delta U = \Delta F + T\Delta S = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ -\dfrac{a^2}{4b}(T - T_c)^2 + T\dfrac{a^2}{2b}(T - T_c) & T < T_c \end{cases}$$

$$= \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \dfrac{a^2}{4b}(T - T_c)\left(2T - T + T_c\right) & T < T_c \end{cases} = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \dfrac{a^2}{4b}(T^2 - T_c^{\,2}) & T < T_c \end{cases}$$

(γ) Από τη σχέση (Α) έχουμε

$$\eta(0.95T_c) = \sqrt{-\frac{a}{b}(0.95T_c - T_c)} = \sqrt{0.1\frac{aT_c}{b}} = \sqrt{0.05/3} \simeq 0.129,$$

$$\eta(T_c) = 0 \text{ και}$$

$$\eta(1.1T_c) = 0 \text{ καθώς } T > T_c$$

3. (*Βαθμοί 2.5*) Ένας κρύσταλλος αποτελείται από N μη αλληλεπιδρώντα άτομα με σπιν 1 και βρίσκεται εντός μαγνητικού πεδίου H. Η ενέργεια κάθε ατόμου σε αυτή την περίπτωση είναι $\sigma H, 0$ ή $-\sigma H$. Αν το υλικό βρίσκεται σε θερμοκρασία T, (α) να υπολογισθεί η συνάρτηση επιμερισμού και η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος (β) να αποδοθεί σε πρόχειρο γράφημα η (μέση) μαγνήτιση ανά άτομο ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, (γ) Δείξτε ότι για πολύ ασθενή μαγνητικά πεδία η μέση μαγνήτιση είναι γραμμική με το πεδίο H.

Κατάσταση (i)	Ενέργεια (ε_i)	Εκφυλισμός (g_i)	Σπίν (σ_i)
1	$-\sigma H$	1	$+\sigma$
2	0	1	0
3	σH	1	$-\sigma$

(**α**) Η μαγνητική συνάρτηση επιμερισμού του ενός ατόμου

$$q = e^{\beta\sigma H} + 1 + e^{-\beta\sigma H}$$

Εφόσον τα σπιν είναι ανεξάρτητα έχουμε

$$Q = q^N = \left(e^{\beta\sigma H} + 1 + e^{-\beta\sigma H}\right)^N$$

Γνωρίζουμε ότι

(**β**) Γνωρίζουμε ότι

$$\bar{\sigma} = -\frac{1}{N}\frac{\partial F}{\partial H} = kT\,\frac{\beta\sigma e^{\beta\sigma H} + 0 - \beta\sigma e^{-\beta\sigma H}}{e^{\beta\sigma H} + 1 + e^{-\beta\sigma H}} = \sigma\,\frac{e^{\beta\sigma H} - e^{-\beta\sigma H}}{e^{\beta\sigma H} + 1 + e^{-\beta\sigma H}}$$

Η μέση μαγνήτιση ανά σπίν μπορεί να υπολογισθεί επίσης από τον ορισμό της μέσης τιμής

$$\bar{\sigma} = \sum_{i=1}^{3}\sigma_i p_i = +\sigma\frac{e^{\beta\sigma H}}{q} + 0 + (-\sigma)\frac{e^{-\beta\sigma H}}{q} = \sigma\,\frac{e^{\beta\sigma H} - e^{-\beta\sigma H}}{e^{\beta\sigma H} + 1 + e^{-\beta\sigma H}}$$

Για να κάνουμε το γράφημα της $\bar{\sigma}(T)$ υπολογίζουμε τις οριακές περιπτώσεις για πολύ υψηλές και χαμηλές θερμοκρασίες.

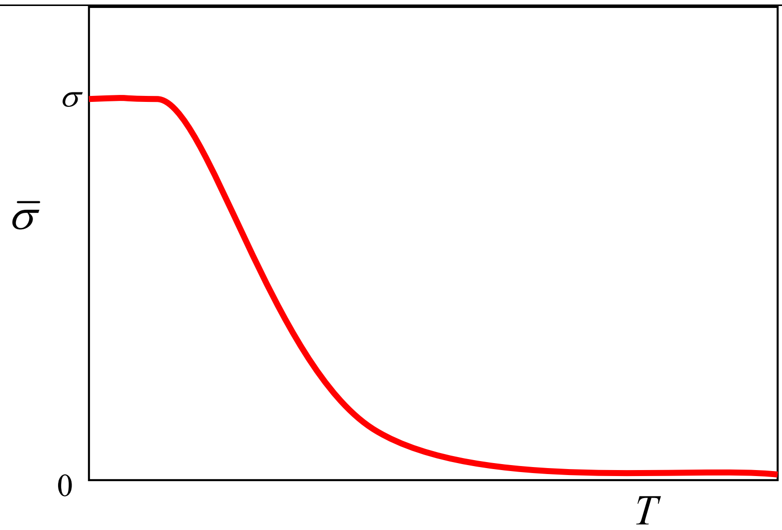
Όταν $\beta >> 1$ (πολύ χαμηλές θερμοκρασίες) έχουμε

$$\bar{\sigma} \overset{\beta\gg1}{\approx} \sigma\,\frac{e^{\beta\sigma H} - 0}{e^{\beta\sigma H} + 1 + 0} \xrightarrow{\beta\gg1} \sigma$$

Όταν $\beta << 1$ (πολύ υψηλές θερμοκρασίες) έχουμε

$$\bar{\sigma} \overset{\beta\ll1}{\approx} \sigma\,\frac{\left(1+\beta\sigma H\right) - \left(1-\beta\sigma H\right)}{\left(1+\beta\sigma H\right) + 1 + \left(1-\beta\sigma H\right)} \approx \sigma\frac{2\beta\sigma H}{3} = \frac{2\sigma^2 H}{3kT}$$

η μέση μαγνήτιση ανά άτομο είναι αντιστρόφως ανάλογη της θερμοκρασίας.



ΔΙΑΡΚΕΙΑ ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ 2,5 ώρες
Καλή Επιτυχία

Στατιστική Μηχανική, Εξεταστική Σεπτεμβρίου, 30/08/*2010*

1. (*Βαθμοί 2.5*) Θεωρείστε ένα σύστημα από N όμοια μη αλληλεπιδρώντα διακρίσημα σωματίδια. Κάθε ένα από αυτά έχει δύο ενεργειακά επίπεδα: 0 και ε, με βαθμό εκφυλισμού 1 και 2 αντίστοιχα. Έστω E/N η μέση ενέργεια ανά σωματίδιο όταν $N \to \infty$. (**α**) Ποια είναι η μέγιστη δυνατή τιμή της ποσότητας E/N για ένα σύστημα που δεν είναι υποχρεωτικά σε θερμοδυναμική ισορροπία; Ποια όταν το σύστημα είναι σε θερμοδυναμική ισορροπία; (**β**) Υπολογίστε την εντροπία ανά σωματίδιο S/N στη θερμοδυναμική ισορροπία. Ποιες είναι η οριακές τιμές της εντροπίας ανά σωματίδιο στα όρια των πολύ χαμηλών και πολύ υψηλών θερμοκρασιών; (**γ**) Σε ποια θερμοκρασία θα πρέπει να είναι το σύστημα ώστε το κατά μέσο όρο το 50% των σωματιδίων να βρίσκονται διεγερμένα στο ενεργειακό επίπεδο ενέργειας ε;

2. (*Βαθμοί 2.5*) Θεωρείστε δύο πολυμερικές αλυσίδες οι οποίες μπορεί να συνδέονται μεταξύ τους, όπως ένα φερμουάρ, μέσω N διαδοχικών κατά το μήκος τους, συνδέσμων. (Αυτό το μοντέλο χρησιμοποιείται σε ορισμένες περιπτώσεις για την περιγραφή μορίων DNA). Κάθε ένας από τους συνδέσμους μπορεί να είναι είτε ανοιχτός με ενέργεια $\varepsilon > 0$ είτε κλειστός με ενέργεια 0. Θεωρούμε ότι η διπλή αλυσίδα ανοίγει μόνο από το ένα άκρο της (έστω το αριστερό) και ότι ένας σύνδεσμος μπορεί να ανοίξει μόνο στην περίπτωση που όλοι οι σύνδεσμοι στα αριστερά του είναι ήδη ανοιχτοί. Να καταγράψετε τις δυνατές καταστάσεις μιας τέτοιας διπλής αλυσίδας και να υπολογίσετε

(**α**) τη συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος

(**β**) πόσες αλυσίδες κατά μέσο όρο είναι τελείως κλειστές σε ένα διάλυμα που περιέχει M αλυσίδες μήκους N και βρίσκεται σε ισορροπία σε θερμοκρασία T; Πόσες τελείως ανοιχτές;

(**γ**) τη μέση τιμή της ενέργειας μιας αλυσίδας μήκους $N=10$, σε θερμοκρασία $T=\varepsilon/k_B$. Κατά μέσο όρο πόσοι δεσμοί είναι ανοιχτοί σε αυτή τη θερμοκρασία;

3. (*Βαθμοί 2.5*) Η συνάρτηση διαμερισμού του μονοδιάστατου μοντέλου *Ising* με εξωτερικό πεδίο B δίνεται από την έκφραση $Q=\left(e^{\beta J}\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-2\beta J}}\right)^N$.

(α) Να εκφραστεί η εντροπία (S/N) και η μαγνήτιση ($\bar{M}/N=-\left(\partial F/\partial B\right)_T/N$) ανά *spin* συναρτήσει της θερμοκρασίας T, της παραμέτρου J και της έντασης B του πεδίου.

(β) Να αποδοθούν με πρόχειρα διαγράμματα οι θερμοκρασιακές εξαρτήσεις των S/N και $\bar{M}/N$ για σταθερό $J>0$ και τις περιπτώσεις (i) $B=0$, (ii) $\mu B \gg J$.

4. (*Βαθμοί 2.5*) Αν το ανάπτυγμα Landau της διαφοράς ελεύθερης ενέργειας *Helmholtz* συστήματος που παρουσιάζει μετατροπή τάξης-αταξίας είναι $\Delta F \approx a_2(T-T_c)\eta^2 + a_4\eta^4$, με a_2, a_4, T_c θετικές σταθερές, να βρεθεί η διαφορά εντροπίας ΔS και η διαφορά εσωτερικής ενέργειας ΔU. Να αποδοθούν με πρόχειρα διαγράμματα οι εξαρτήσεις της παραμέτρου τάξης η και των διαφορών ΔF και ΔU από την θερμοκρασία στην περιοχή της τιμής T_c.

$$k_B = 1.38066\times10^{-23}\ \mathrm{JK}^{-1} = 8.617\times10^{-5} eVK^{-1},\ h = 6.626\times10^{-34}\ \mathrm{Js},\ \ln N! \simeq N\ln N - N$$

$$F = E - TS,\ \ S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{kT^2}\frac{\partial F}{\partial \beta},\ C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -k\beta^2\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)_V,\ \ P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,$$

$$Q_{id} = \Lambda^{-3N}V^N,\quad \Lambda = \frac{h}{\left(2\pi mkT\right)^{1/2}},\ \sum_{i=0}^{N} x^i = \frac{1-x^{N+1}}{1-x}$$

ΔΙΑΡΚΕΙΑ ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ 2,5 ώρες

Καλή Επιτυχία

3. (*Βαθμοί 2.5*) Η συνάρτηση διαμερισμού του μονοδιάστατου μοντέλου *Ising* με εξωτερικό πεδίο B δίνεται από την έκφραση $Q=\left(e^{\beta J}\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-2\beta J}}\right)^N$.

(α) Να εκφραστεί η εντροπία (S/N) και η μαγνήτιση ($\bar{M}/N=-\left(\partial F/\partial B\right)_T/N$) ανά *spin* συναρτήσει της θερμοκρασίας T, της παραμέτρου J και της έντασης B του πεδίου.

(β) Να αποδοθούν με πρόχειρα διαγράμματα οι θερμοκρασιακές εξαρτήσεις των S/N και $\bar{M}/N$ για σταθερό $J>0$ και τις περιπτώσεις (i) $B=0$, (ii) $\mu B \gg J$.

Έχουμε

$$\begin{aligned}\beta F &= -\ln Q = -N\ln\left(e^{\beta J}\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-2\beta J}}\right)\Rightarrow \\ \frac{F}{N} &= -k_B T\ln\underbrace{\left(e^{\beta J}\left(\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}\right)\right)}_{q(B,T)}\end{aligned} \tag{3.1}$$

Θέτοντας

$$q(B,T)=e^{\beta J}\left(\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}\right) \tag{3.2}$$

Έχουμε

$$\begin{aligned}S/N &= -\frac{\partial F/N}{\partial T}=\frac{\partial k_B T\ln q(B,T)}{\partial T} \\ &= k_B\ln q(B,T)+k_B T\frac{1}{q(B,T)}\frac{\partial q(B,T)}{\partial T}\end{aligned} \tag{3.3}$$

και

$$\bar{M}/N=-\left(\partial(F/N)/\partial B\right)_T=k_B T\frac{\partial\ln q(B,T)}{\partial B} \tag{3.4}$$

Για τον υπολογισμό των δύο παραγώγων που εμφανίζονται εργαζόμαστε ως εξής

$$\begin{aligned}\frac{\partial q(B,T)}{\partial T} &= \frac{\partial e^{\beta J}}{\partial T}\frac{\partial q(B,T)}{\partial e^{\beta J}}+\frac{\partial \beta\mu B}{\partial T}\frac{\partial q(B,T)}{\partial \beta\mu B} \\ &= -\frac{J}{k_B T^2}\left(e^{\beta J}\frac{\partial q(B,T)}{\partial e^{\beta J}}\right)-\frac{1}{T}\beta\mu B\frac{\partial q(B,T)}{\partial\beta\mu B}\end{aligned} \tag{3.5}$$

Και

$$\begin{aligned}\frac{\partial q(B,T)}{\partial B} &= e^{\beta J}\left(\beta\mu\sinh\beta\mu B+\beta\mu\frac{2\sinh(\beta\mu B)\cosh(\beta\mu B)}{2\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}}\right) \\ &= \beta\mu e^{\beta J}\sinh\beta\mu B\left(1+\frac{\cosh(\beta\mu B)}{\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}}\right)\end{aligned} \tag{3.6}$$

Έχουμε όμως

$$\begin{aligned}\frac{\partial q(B,T)}{\partial e^{\beta J}} &= \left(\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}\right)+e^{\beta J}\frac{-4e^{-5\beta J}}{2\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}} \\ &= \left(\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}\right)-2\frac{e^{-4\beta J}}{\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}}\end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\frac{\partial q(B,T)}{\partial \beta\mu B}=\frac{1}{\beta\mu}\frac{\partial q(B,T)}{\partial B}=e^{\beta J}\sinh(\beta\mu B)\left(1+\frac{\cosh(\beta\mu B)}{\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}}\right) \tag{3.8}$$

Συνεπώς

$$\begin{aligned}S(B,T)/N &= k_B\left(\ln q(B,T)+T\frac{1}{q(B,T)}\frac{\partial q(B,T)}{\partial T}\right) \\ &= k_B\left(\ln q(B,T)+\frac{1}{q(B,T)}\left(\beta J\left(e^{\beta J}\frac{\partial q(B,T)}{\partial e^{\beta J}}\right)+\beta\mu B\frac{\partial q(B,T)}{\partial \beta\mu B}\right)\right)\end{aligned} \tag{3.9}$$

Όπου οι παράγωγοι δίνονται από τις εξισώσεις (3.7) και (3.8).

Όταν $B=0$

$$\begin{aligned}q(B=0,T) &= e^{\beta J}\left(1+\sqrt{e^{-4\beta J}}\right)=e^{\beta J}+e^{-\beta J} \\ e^{\beta J}\frac{\partial q(B=0,T)}{\partial e^{\beta J}} &= e^{\beta J}\left(1+\sqrt{e^{-4\beta J}}\right)+\frac{-2e^{-\beta J}}{\sqrt{+e^{-4\beta J}}}=e^{\beta J}-e^{-\beta J}\end{aligned} \tag{3.10}$$

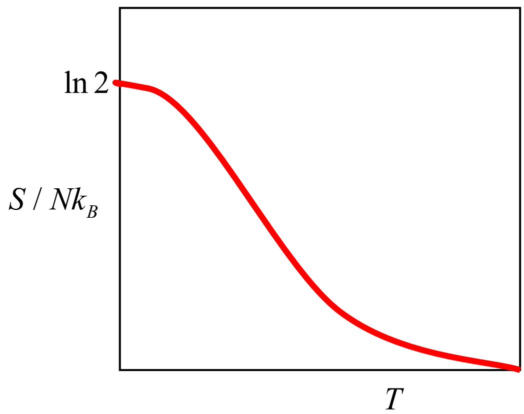
οπότε

$$S/N\big|_{B=0}=k_B\left(\ln\left(e^{\beta J}+e^{-\beta J}\right)+\beta J\frac{e^{-\beta J}-e^{\beta J}}{e^{\beta J}+e^{-\beta J}}\right) \tag{3.11}$$

Και από τις εξ. (3.4) και (3.6) έχουμε

$$\bar{M}/N=0 \tag{3.12}$$

Για σταθερό J όταν $\beta\to 0$ (πολύ υψηλές θερμοκρασίες) έχουμε $S/N\to k_B\ln 2$ και όταν $\beta\to\infty$ πολύ χαμηλές θερμοκρασίες $S/N\to 0$



Όταν $\mu B \gg J$

$$\begin{aligned} q(B,T) &= e^{\beta J}\left(\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)+e^{-4\beta J}}\right) \\ &\approx e^{\beta J}\left(\cosh(\beta\mu B)+\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B)}\right) \\ &= e^{\beta J}\left(\cosh(\beta\mu B)+\sinh(\beta\mu B)\right) \\ &= e^{\beta J}e^{\beta\mu B} \end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\frac{F}{N} = -k_B T\left(\beta\mu B+\beta J\right) = -\mu B\left(1+\frac{J}{\mu B}\right) \tag{3.14}$$

Οπότε στην περίπτωση των πολύ ισχυρών πεδίων έχουμε ότι η εντροπία είναι πρακτικά 0 καθώς όλα τα σπιν έχουν προσανατολιστεί με το πεδίο και κάθε σπίν έχει πρακτικά μία μόνο κατάσταση και η μαγνήτιση ανά σπίν είναι πρακτικά η μαγνητική ροπή του σπίν, $\overline{M}/N=\mu$. Και οι δύο ποσότητες στην περίπτωση των πολύ ισχυρών μαγνητικών πεδίων δεν εξαρτώνται από τη θερμοκρασία.

Στατιστική Μηχανική, Πτυχιακή Εξέταση Φεβρουαρίου, 21/02/ *2011*

1. (*Βαθμοί 2.5*) Θεωρούμε μια μοριακή γραμμική αλυσίδα που οι πρώτοι γείτονες συνδέονται μεταξύ τους με χημικό δεσμό. Κάθε δεσμός μπορεί να βρίσκεται σε δύο καταστάσεις: στη θεμελιώδη, με ενέργεια ε_0 και μήκος l_0, ή στην διεγερμένη με ενέργεια ε_1 και μήκος l_1. Η κατάσταση στην οποία βρίσκεται ένας τυχαίος δεσμός δεν εξαρτάται από την κατάσταση των υπολοίπων.
Αν η αλυσίδα αποτελείται από M τέτοιους δεσμούς υπολογίστε (ως συνάρτηση των M, $\varepsilon_0, \varepsilon_1$, l_0, l_1 και της θερμοκρασίας T):
Α) Τη συνάρτηση επιμερισμού και την ελεύθερη ενέργεια μιας αλυσίδας.
Β) Το μέσο μήκος (από άκρο σε άκρο απόσταση) της αλυσίδας ως συνάρτηση της θερμοκρασίας. Σχεδιάστε την εξάρτηση σε ένα πρόχειρο γράφημα.
Γ) Σε ποια θερμοκρασία το πλήθος των δεσμών στη θεμελιώδη κατάσταση είναι ίσο με το πλήθος των δεσμών στη διεγερμένη κατάσταση;

2. (*Βαθμοί 2.5*) Έστω ότι το ανάπτυγμα Landau της διαφοράς ελεύθερης ενέργειας για σύστημα που παρουσιάζει μετάβαση τάξης-αταξίας είναι $\Delta F = a(T - T_0)\eta^2 + b\eta^4$, όπου *η* είναι η παράμετρος τάξης, *T* η θερμοκρασία και *a, b, T₀* θετικές παράμετροι, ανεξάρτητες της θερμοκρασίας. Από την πειραματική μελέτη του συστήματος γνωρίζουμε ότι η θερμοκρασιακή εξάρτηση της παραμέτρου τάξης είναι της μορφής $\eta = A(1 - T/T^*)^{1/2}$ για $T < T^*$ και 0 για $T > T^*$, καθώς και ότι η μεταβολή της θερμοχωρητικότητας κατά τη μετατροπή (δηλ. στη θερμοκρασία T^*) έχει τιμή *Δ*.
Α. Να υπολογισθούν η θερμοκρασία μετατροπής φάσης και οι συντελεστές a,b του αναπτύγματος της ελεύθερης ενέργειας συναρτήσει των πειραματικών δεδομένων A, *Δ* και T^*.
Β. Να υπολογισθεί, συναρτήσει των πειραματικών δεδομένων, η θερμοκρασιακή εξάρτηση της μεταβολής της εντροπίας *ΔS*(*T*).

3. (*Βαθμοί 2.5*) Περιγράψτε τις βασικές παραδοχές του μοντέλου του Einstein για τον υπολογισμό της θερμοχωρητικότητας κρυσταλλικών στερεών. Με βάση αυτές τις παραδοχές υπολογίστε τη θερμοχωρητικότητα και τη μέση ενέργεια ενός γραμμομορίου του κρυσταλλικού υλικού σε θερμοκρασία T καθώς και σε πολύ χαμηλές και πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Αποδώστε τα αποτελέσματα σε ένα πρόχειρο γράφημα.

4. (*Βαθμοί 2.5*) Θεωρείστε ένα σύστημα από τέσσερα (4) spin $1/2$ τα οποία βρίσκονται στις κορυφές ενός τετραγώνου. Το κάθε σπιν αλληλεπιδρά με τους πρώτους γείτονές του με το δυναμικό $u(i,j) = -Js_is_j$ ($J > 0$ και $s = \pm 1/2$, μοντέλο του Ising). Καταγράψτε όλες τις δυνατές ενεργειακές καταστάσεις του συστήματος, και τον αντίστοιχο εκφυλισμό τους. Υπολογίστε α) τη συνάρτηση επιμερισμού και β) για $J/k_B = 200K$ υπολογίστε τη μέση μαγνήτιση και τη μέση ενέργεια ενός τέτοιου συστήματος σε θερμοκρασία $T = 100K$.

$$k_B = 1.38066\times 10^{-23}\ \mathrm{JK}^{-1} \approx 8.617\quad 10^{-5} eVK^{-1},\ h = 6.626\times 10^{-34}\ \mathrm{Js},\ \ln N! \simeq N\ln N - N$$

$$F = E - TS\,,\quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \quad \frac{1}{kT^2}\frac{\partial F}{\partial \beta},\ C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -k\beta^2\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)_V,\quad P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,$$

$$Q_{id} = \Lambda^{-3N}V^N,\quad \Lambda = \frac{h}{(2\pi mkT)^{1/2}},\ \sum_{i=0}^{N} x^i = \frac{1-x^{N+1}}{1-x}$$

ΔΙΑΡΚΕΙΑ ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ 2,5 ώρες
Καλή Επιτυχία

1. (*Βαθμοί 2.5*) Θεωρούμε μια μοριακή γραμμική αλυσίδα που οι πρώτοι γείτονες συνδέονται μεταξύ τους με χημικό δεσμό. Κάθε δεσμός μπορεί να βρίσκεται σε δύο καταστάσεις: στη θεμελιώδη, με ενέργεια ε_0 και μήκος l_0, ή στην διεγερμένη με ενέργεια ε_1 και μήκος l_1. Η κατάσταση στην οποία βρίσκεται ένας τυχαίος δεσμός δεν εξαρτάται από την κατάσταση των υπολοίπων.
Αν η αλυσίδα αποτελείται από M τέτοιους δεσμούς υπολογίστε (ως συνάρτηση των M , $\varepsilon_0, \varepsilon_1$, l_0, l_1 και της θερμοκρασίας T):
Α) Τη συνάρτηση επιμερισμού και την ελεύθερη ενέργεια μιας αλυσίδας.
Β) Το μέσο μήκος (από άκρο σε άκρο απόσταση) της αλυσίδας ως συνάρτηση της θερμοκρασίας. Σχεδιάστε την εξάρτηση σε ένα πρόχειρο γράφημα.
Γ) Σε ποια θερμοκρασία το πλήθος των δεσμών στη θεμελιώδη κατάσταση είναι ίσο με το πλήθος των δεσμών στη διεγερμένη κατάσταση;

Έχουμε ένα σύστημα δύο καταστάσεων χωρίς εκφυλισμό οπότε
Α) Η συνάρτηση επιμερισμού της αλυσίδας είναι $Q = q^N$, με

$$q = e^{-\beta\varepsilon_0} + e^{-\beta\varepsilon_1} = e^{-\beta\varepsilon_0}\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_1-\varepsilon_0)}\right) \qquad (0.1)$$

Και

$$\begin{aligned} \beta F &= \quad \ln Q \quad M\left(\beta\varepsilon_0 \quad \ln\left(1 \quad e^{-\beta(\varepsilon_1-\varepsilon_0)} \Rightarrow\right)\right) \\ F &= M\varepsilon_0 \quad MkT\ln\left(1 \quad e^{-\beta(\varepsilon_1-\varepsilon_0)}\right) \end{aligned} \qquad (0.2)$$

Β)

$$\langle L\rangle = M\langle l\rangle = M\left(l_0\frac{e^{-\beta\varepsilon_0}}{q} + l_1\frac{e^{-\beta\varepsilon_1}}{q}\right) = M\left(\frac{l_0 + l_1 e^{-\beta(\varepsilon_0-\varepsilon_1)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_0-\varepsilon_1)}}\right) = Ml_0\left(\frac{1+(l_1/l_0)e^{-\beta(\varepsilon_0-\varepsilon_1)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_0-\varepsilon_1)}}\right)$$

Γ) Για να συμβαίνει αυτό θα πρέπει

$$p_0 = p_1 \Rightarrow \frac{e^{-\beta\varepsilon_0}}{q} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_1}}{q} \Rightarrow e^{-\beta(\varepsilon_1-\varepsilon_0)} = 1$$

Η τελευταία συνθήκη εφόσον $\varepsilon_0 \neq \varepsilon_1$ ικανοποιείται μόνο όταν $\beta \to 0$ ή όταν $T \to \infty$ κάτι που είναι αναμενόμενο για ένα σύστημα δύο καταστάσεων.

2. (*Βαθμοί 2.5*) Έστω ότι το ανάπτυγμα Landau της διαφοράς ελεύθερης ενέργειας για σύστημα που παρουσιάζει μετάβαση τάξης-αταξίας είναι $\Delta F = a(T - T_0)\eta^2 + b\eta^4$, όπου *η* είναι η παράμετρος τάξης, *T* η θερμοκρασία και *a, b, T₀* θετικές παράμετροι, ανεξάρτητες της θερμοκρασίας. Από την πειραματική μελέτη του συστήματος γνωρίζουμε ότι η θερμοκρασιακή εξάρτηση της παραμέτρου τάξης είναι της μορφής $\eta = A(1 - T/T^*)^{1/2}$ για $T < T^*$ και 0 για $T > T^*$, καθώς και ότι η μεταβολή της θερμοχωρητικότητας κατά τη μετατροπή (δηλ. στη θερμοκρασία T^*) έχει τιμή *Δ*.
Α. Να υπολογισθούν η θερμοκρασία μετατροπής φάσης και οι συντελεστές a, b του αναπτύγματος της ελεύθερης ενέργειας συναρτήσει των πειραματικών δεδομένων A , *Δ* και T^*.
Β. Να υπολογισθεί, συναρτήσει των πειραματικών δεδομένων, η θερμοκρασιακή εξάρτηση της μεταβολής της εντροπίας *ΔS*(*T*).

Σε θερμοδυναμική ισορροπία έχουμε $\partial\Delta F/\partial\eta = 0$ οπότε

$$\eta^2 = \begin{cases} -\dfrac{a}{2b}(T - T_0) & T \le T_0 \\ 0 & T > T_0 \end{cases} \quad \begin{cases} \dfrac{aT_0}{2b}(1 - T/T_0) & T \le T_0 \\ 0 & T > T_0 \end{cases} \qquad (0.3)$$

με T_0 η θερμοκρασία μετατροπής φάσης. Από τα δεδομένα έχουμε ότι

$$\eta = A(1-T/T^*)^{1/2} \Rightarrow \eta^2 = A^2(1-T/T^*) \qquad (0.4)$$

Συγκρίνοντας τις δύο σχέσεις έχουμε ότι $T_0 = T^*$ και

$$A^2 = \frac{aT^*}{2b} \qquad (0.5)$$

.

Η θερμοκασιακή εξάρτηση της ελεύθερης ενέργειας είναι

$$\Delta F(T) = \begin{cases} -\dfrac{a^2}{2b}(T-T_0)^2 + b\dfrac{a^2}{4b^2}(T-T_0)^2 & T \le T_0 \\ 0 & T > T_0 \end{cases} = \begin{cases} -\dfrac{a^2}{4b}(T-T_0)^2 & T \le T_0 \\ 0 & T > T_0 \end{cases} \qquad (0.6)$$

Οπότε έχουμε

$$\Delta S(T) = -\frac{\partial \Delta F}{\partial T} = \begin{cases} \dfrac{a^2}{2b}(T-T_0) & T_0 < T \\ 0 & T_0 > T \end{cases} \qquad (0.7)$$

Και

$$\Delta C_V = T\frac{\partial \Delta S}{\partial T} = \begin{cases} \dfrac{a^2}{2b}T & T \le T_0 \\ 0 & T > T_0 \end{cases} \qquad (0.8)$$

Έχουμε όμως ότι

$$\Delta C_V(T^*) = \Delta \Rightarrow \frac{a^2}{2b}T^* = \Delta \qquad (0.9)$$

Από τις εξ. (0.5) και (0.9) έχουμε

$$\begin{aligned} &A^2 a = \Delta \Rightarrow \boxed{a = \Delta / A^2} \\ &A^2 = \frac{aT^*}{2b} = \frac{\Delta}{2bA^2}T^* \Rightarrow \boxed{b = \frac{\Delta}{2A^4}T^*} \end{aligned} \qquad (0.10)$$

Και από την εξ. (0.7) παίρνουμε

$$\Delta S(T) = \begin{cases} \dfrac{\Delta}{T^*}(T-T^*) & T \le T^* \\ 0 & T > T^* \end{cases} = \begin{cases} -\Delta(1-T/T^*) & T \le T^* \\ 0 & T > T^* \end{cases} \qquad (0.11)$$

4. (*Βαθμοί 2.5*) Θεωρείστε ένα σύστημα από τέσσερα (4) spin $1/2$ τα οποία βρίσκονται στις κορυφές ενός τετραγώνου. Το κάθε σπιν αλληλεπιδρά με τους πρώτους γείτονές του με το δυναμικό $u(i,j) = -Js_i s_j$ ($J > 0$ και $s = \pm 1/2$, μοντέλο του Ising). Καταγράψτε όλες τις δυνατές <u>ενεργειακές</u> καταστάσεις του συστήματος, και τον αντίστοιχο εκφυλισμό τους. Υπολογίστε α) τη συνάρτηση επιμερισμού και β) για $J/k_B = 200K$ υπολογίστε τη μέση μαγνήτιση και τη μέση ενέργεια ενός τέτοιου συστήματος σε θερμοκρασία $T = 100K$.

Κατάσταση	Ολική μαγνήτιση	Ενέργεια	Εκφυλισμός
$++++$	$+2$	$-4J(1/4)$	2
$----$	-2		

$-+++$ $+-++$ $++-+$ $+++-$ $+---$ $-+--$ $--+-$ $---+$	$+1$ $+1$ $+1$ $+1$ -1 -1 -1 -1	0	8
$--++$ $+--+$ $++--$ $-++-$	0 0 0 0	0	4
$+-+-$ $-+-+$	0 0	$4J(1/4)$	2

Συνάρτηση επιμερισμού

$$q = \sum_{\varepsilon_i} g(\varepsilon_i) e^{-\beta\varepsilon_i} = 2e^{\beta J} + 12 + 2e^{-\beta J}$$

Η μέση μαγνήτιση είναι ίση με 0

Και η μέση ενέργεια

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \sum_{\varepsilon_i} \varepsilon_i g(\varepsilon_i) \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{q} = \frac{(-J)2e^{\beta J} + 0\times 12 + (+J)2e^{-\beta J}}{q} \\ &= 2J\frac{e^{-\beta J} - e^{\beta J}}{q}\end{aligned} \quad (0.12)$$

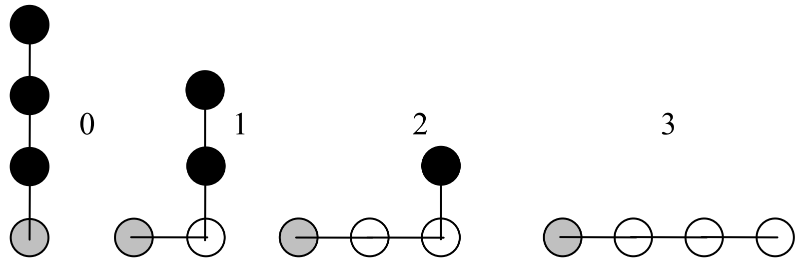
Για $J/k_B = 200K$ και $T = 100K$ έχουνε $\beta J = 2$ οπότε

$$q = 2e^{2} + 12 + 2e^{-2} = 27.049 \text{ και}$$

$$\langle E\rangle = 400\times 8.617\times 10^{-5}\text{eV}\times\left(\frac{e^{-2} - e^{2}}{2e^{2} + 12 + 2e^{-2}}\right) = \ 0.092\text{eV}$$

Εξετάσεις Στατιστικής Μηχανικής, 22/06/*2011*

1. Ένα κρυσταλλικό υλικό που αποτελείται από N μη αλληλεπιδρόντα άτομα με spin 1 βρίσκεται εντός μαγνητικού πεδίου έντασης H. Η ενέργεια ενός οποιουδήποτε ατόμου μπορεί να είναι σH, 0, ή $-\sigma H$ όπου σ το μέτρο της μαγνητικής διπολικής ροπής των ατόμων. Το σύστημα βρίσκεται σε θερμική ισορροπία σε θερμοκρασία T. Υπολογίστε (**α**) την συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος και την ελεύθερη ενέργεια του συστήματος, (**β**) τη μέση μαγνήτιση ανά άτομο ως συνάρτηση της θερμοκρασίας καθώς και τις οριακές τιμές της μαγνήτισης για πολύ υψηλές και πολύ χαμηλές θερμοκρασίες. (2M)



2. Θεωρείστε ένα σύστημα από εύκαμπτα γραμμικά ολιγομερή, βαθμού πολυμερισμού M, με το ένα άκρο τους ισχυρά προσδεμένο πάνω σε μια επιφάνεια. Τα υπόλοιπα (πέραν του δεμένου άκρου) μονομερή της αλυσίδας βρίσκονται είτε μακριά από την επιφάνεια είτε σε επαφή (προσροφημένα) με ενέργεια προσρόφησης $-\varepsilon < 0$ σε σχέση με την ενέργεια των ελεύθερων μονομερών. Στο σχήμα απεικονίζονται οι καταστάσεις ενός τετραμερούς υποθέτοντας ότι ένα μονομερές είναι δυνατό να προσροφηθεί στην επιφάνεια μόνο εάν και το προηγούμενό του είναι προσροφημένο. Ο βαθμός εκφυλισμού κάθε μιας από τις καταστάσεις είναι $g_0 = 10$, $g_1 = 2$ και $g_2 = g_3 = 1$. Αν η επιφανειακή πυκνότητα των προσδεμένων αλυσίδων είναι αρκετά χαμηλή ώστε να οι αλυσίδες να μην αλληλεπιδρούν μεταξύ τους: (**α**) να υπολογισθεί τη συνάρτηση επιμερισμού ενός συστήματος N αλυσίδων σε θερμοκρασία T, (**β**) ποια η μέση ενέργεια ανά μόριο και ποιος ο μέσος αριθμός των προσροφημένων μονομερών ανά μόριο σε θερμοκρασία T; (**γ**) υποθέτοντας ότι το μήκος κάθε δεσμού είναι ℓ (ανεξάρτητο της θερμοκρασίας) να υπολογισθεί η μέση απόσταση του ελεύθερου άκρου από την επιφάνεια ως συνάρτηση της θερμοκρασίας. (2.5M).

3. Εφαρμόστε το μοντέλο του αρμονικού ταλαντωτή για τον υπολογισμό της δονητικής συνάρτησης επιμερισμού του μορίου του I_2. Για το ιώδιο η χαρακτηριστική δονητική θερμοκρασία είναι $\theta_V = 308K$. Υπολογίστε και καταγράψτε τις πιθανότητες των τριών πρώτων δονητικών καταστάσεων σε θερμοκρασία $T = 400K$ (1M)

4. Το ανάπτυγμα Landau της ελεύθερης ενέργειας για την μετάβαση από την παραμαγνητική στην σιδηρομαγνητική κατάσταση είναι

$$\Delta F = \frac{1}{2}a_0(T - T_C)M^2 + \frac{1}{4}bM^4 - \gamma MH$$

όπου a_0, b, γ θετικές παράμετροι ανεξάρτητες της θερμοκρασίας, T_C η θερμοκρασία Curie, M το μέτρο της μαγνήτισης (η «παράμετρος τάξης» του αναπτύγματος) και H το μέτρο εξωτερικά εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου το οποίο στη συγκεκριμένη περίπτωση θεωρείται συγγραμμικό με το διάνυσμα της μαγνήτισης. (**α**) Να βρεθεί η σχέση που συνδέει τα M και H και να αποδοθεί σε πρόχειρο διάγραμμα η εξάρτηση του M από το H για σταθερή θερμοκρασία στην σιδηρομαγνητική κατάσταση. (**β**) Να βρεθεί η έκφραση του αντίστροφου της επιδεκτικότητας $\chi(T) = (\partial M / \partial H)_{H\to 0}$ και να αποδοθεί σε πρόχειρο διάγραμμα η εξάρτησή του από τη θερμοκρασία στην περιοχή της μετάβασης από την παραμαγνητική στην σιδηρομαγνητική κατάσταση. (2.5M)

5. Η συνάρτηση διαμερισμού στο απλό μοντέλο Ising για σύστημα από N spin σε μονοδιάστατη αλληλουχία (i = 1, 2, … N) που το καθένα μπορεί να βρεθεί σε δύο καταστάσεις, $s = \pm 1$, και αλληλεπιδρά μόνο με τους γείτονές του είναι $Q = \left(e^{\beta J} + e^{-\beta J}\right)^N$. Να βρεθούν (**α**) η μέση τιμή της ενέργειας ανά spin ($\overline{E}/N$) του συστήματος και (**β**) η εντροπία (S/N) ως συναρτήσεις της μεταβλητής βJ και να αποδοθούν με πρόχειρα διαγράμματα (2.0M)

$$k_B = 1.38066\times 10^{-23}\ \mathrm{JK}^{-1} = 8.617\times 10^{-5} eVK^{-1},\ h = 6.626\times 10^{-34}\ \mathrm{Js}$$

$$F = E - TS\ ,\ \ S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{kT^2}\frac{\partial F}{\partial \beta},\ C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -k\beta^2\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)_V,\ \ P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,$$

$$Q_{id} = \Lambda^{-3N}V^N\ ,\quad \Lambda = \frac{h}{\left(2\pi mkT\right)^{1/2}},\ \sum_{j=0}^{N} x^j = \frac{1-x^{N+1}}{1-x},\ (a+b)^N = \sum_{n=0}^{N}\binom{N}{n}a^i b^{N-i}$$

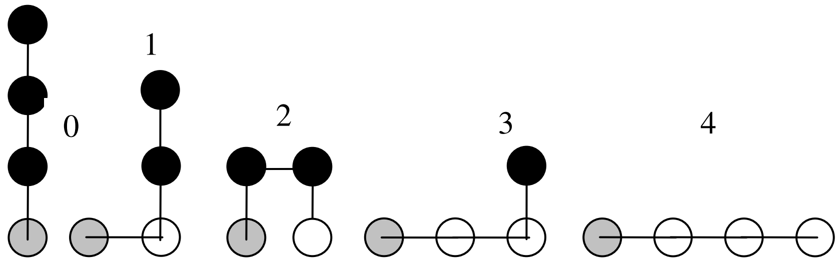
Διάρκεια 2,5ώρες ------ Καλή Επιτυχία

Τμ. Επιστήμης των Υλικών

Ειδική Πτυχιακή Στατιστικής Μηχανικής, 16/ 11/ *2011*

1. Περιγράψτε τις βασικές παραδοχές του μοντέλου του Einstein για τον υπολογισμό της θερμοχωρητικότητας κρυσταλλικών στερεών. Με βάση αυτές τις παραδοχές υπολογίστε τη θερμοχωρητικότητα και τη μέση ενέργεια ενός γραμμομορίου του κρυσταλλικού υλικού σε θερμοκρασία T καθώς και σε πολύ χαμηλές και πολύ υψηλές θερμοκρασίες. Αποδώστε τα αποτελέσματα σε ένα πρόχειρο γράφημα. (2.5Μ)

2. Θεωρείστε ένα σύστημα από εύκαμπτα γραμμικά ολιγομερή, βαθμού πολυμερισμού M, με το ένα άκρο τους ισχυρά προσδεμένο πάνω σε μια επιφάνεια. Τα υπόλοιπα (πέραν του δεμένου άκρου) μονομερή της αλυσίδας βρίσκονται είτε μακριά από την επιφάνεια είτε σε επαφή (προσροφημένα) με ενέργεια προσρόφησης $-\varepsilon < 0$ σε σχέση με την ενέργεια των ελεύθερων μονομερών. Στο σχήμα απεικονίζονται υποθετικές καταστάσεις ενός τετραμερούς. Ο βαθμός εκφυλισμού κάθε μιας από τις καταστάσεις είναι $g_0 = 10$, $g_1 = 2$ και $g_2 = g_3 = g_4 = 1$. Αν η επιφανειακή πυκνότητα των προσδεμένων αλυσίδων είναι αρκετά χαμηλή ώστε να οι αλυσίδες να μην αλληλεπιδρούν μεταξύ τους: (**α**) να υπολογισθεί τη συνάρτηση επιμερισμού ενός συστήματος N αλυσίδων σε θερμοκρασία T, (**β**) ποια η μέση ενέργεια ανά μόριο και ποιος ο μέσος αριθμός των προσροφημένων μονομερών ανά μόριο σε θερμοκρασία T ; (γ) υποθέτοντας ότι το μήκος κάθε δεσμού είναι ℓ (ανεξάρτητο της θερμοκρασίας) να υπολογισθεί η μέση απόσταση του ελεύθερου άκρου από την επιφάνεια ως συνάρτηση της θερμοκρασίας. (2.5Μ).

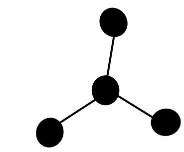


3. Έστω ότι το ανάπτυγμα Landau της διαφοράς ενέργειας για σύστημα που παρουσιάζει μετάβαση τάξης-αταξίας είναι $\Delta F = a(T - T_0)\eta^2 + b\eta^4$, όπου η είναι η παράμετρος τάξης, T η θερμοκρασία και a, b, T_0 θετικές σταθερές.

(i) Ποια είναι η παράμετρος τάξης του συστήματος όταν $T_1 / T_0 = 0.8$, $T_2 / T_0 = 1$ και $T_3 / T_0 = 1.1$; .

(ii) Υπολογίστε τη θερμοκρασιακή εξάρτηση της διαφοράς εντροπίας ΔS και της διαφοράς ειδικής θερμότητας ΔC_V.. (2.5Μ)

4. Έστω ένα σύστημα από τέσσερα (4) spin $1/2$ τα οποία βρίσκονται στις κορυφές της δομής που δίνεται στο σχήμα. Το κάθε σπιν αλληλεπιδρά με τους κοντινότερους γείτονές του με το δυναμικό $u(i, j) = -Js_i s_j$ ($J > 0$ και $s = \pm 1/2$, μοντέλο του Ising). Καταγράψτε όλες τις δυνατές <u>ενεργειακές</u> καταστάσεις του συστήματος, και τον αντίστοιχο εκφυλισμό τους (δώστε πρόχειρα γραφήματα). Υπολογίστε **α**) τη συνάρτηση επιμερισμού και **β**) για $J / k_B = 200K$ υπολογίστε τη μέση μαγνήτιση και τη μέση ενέργεια ενός τέτοιου συστήματος σε θερμοκρασία $T = 100K$. (2.5Μ)



$$k_B = 1.38066 \times 10^{-23}\ \mathrm{JK}^{-1} \approx 8.617\ \ 10^{-5} eVK^{-1},\ h = 6.626 \times 10^{-34}\ \mathrm{Js}$$

$$F = E - TS\ ,\ \ S = \left(-\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \quad \frac{1}{kT^2}\frac{\partial F}{\partial \beta},\ C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = -k\beta^2\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)_V,\ \ P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,$$

$$Q_{id} = \Lambda^{-3N} V^N\ ,\quad \Lambda = \frac{h}{\left(2\pi mkT\right)^{1/2}},\ \ \sum_{j=0}^{N} x^j = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x},\ (a+b)^N = \sum_{n=0}^{N}\binom{N}{n} a^i b^{N-i}$$

Διάρκεια 2,5ώρες ------ Καλή Επιτυχία