Vybrané kapitoly zo štatistickej fyziky
Príklady z cvičenia

cviko bolo 16.3.2021 *fázové prechody, matica hustoty, klasická štatistická fyzika*

Akékoľvek otázky smelo smerujte na `juraj(a)tekel(b)gmail(c)com`

Kritické koeficienty v Landauovej teórii

Príklad 1 (■ Landauove kritické koeficienty)**.** Pre voľnú energiu v tvare

$$F(M) = a_0 + \frac{1}{2}a_2M^2 + \frac{1}{4}a_4M^4 \ , \tag{1}$$

kde $a_4 > 0$ nájdite všetky kritické koeficienty[1]?

Príklad 2 (Zložitejší Landau)**.** Ako vyzerá fázový diagram pre voľnú energiu v tvare

$$F(M) = \frac{1}{2}a_2(T)M^2 - \frac{1}{4}a_4M^4 + \frac{1}{6}a_6M^6 \ , \tag{2}$$

kde $a_6 > 0, a_4 > 0$? Ako vyzerajú kritické koeficienty pre tento model?

Matica hustoty

Príklad 3 (Matica hustoty pre dvoj hladinový systém.)**.** Majme dvoj hladinový systém, v ktorom bázové stavy označíme ako $|1\rangle$ a $|0\rangle$. Okrem toho zaveďme označenie

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + |0\rangle\right) \ , \ |b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |0\rangle\right) \ . \tag{3}$$

a. ■ Ako vyzerá matica hustoty pre ensambel, ktorý obsahuje

- iba stavy $|1\rangle$,
- iba stavy $|a\rangle$,
- stav $|1\rangle$ s pravdepodobnosťou p a stav $|0\rangle$ s pravdepodobnosťou $1-p$,
- stav $|1\rangle$ s pravdepodobnosťou $1/2$ a stav $|a\rangle$ s pravdepodobnosťou $1/2$.

b. ■ Vypočítajte $\mathrm{Tr}\,(\rho)$ a $\mathrm{Tr}\left(\rho^2\right)$ pre matice z predchádzajúcej úlohy a overte, že pre strednú energiu dostaneme zo vzťahu $\mathrm{Tr}\,(\rho H)$ očakávaný výsledok.

c. Stavy $|a\rangle\,, |b\rangle$ tvoria tiež bázu. Vyjadrite matice hustoty z úlohy a. v tejto báze a zopakujte pre ne časť b.

Príklad 4 (O matici hustoty.)**.** Ukážte, že pre maticu hustoty

$$\rho = \sum_x |x\rangle\, p_x\, \langle x| \tag{4}$$

platí

$$\mathrm{Tr}\,(\rho) = 1 \tag{5}$$
$$\bar{A} = \mathrm{Tr}\,(\rho A) \tag{6}$$
$$■\ \mathrm{Tr}\left(\rho^2\right) \leq 1 \tag{7}$$
$$■\ \mathrm{Tr}\left(\rho^2\right) = 1 \Leftrightarrow \rho \text{ reprezentuje čistý stav.} \tag{8}$$

Príklad 5 (Entropia kanonického súboru a matica hustoty.)**.** Entropia sa pomocou matice hustoty ρ počíta ako

$$S = -k\mathrm{Tr}\,(\rho \log \rho) \ . \tag{9}$$

Pre maticu hustoty kanonického súboru

$$\rho = \frac{1}{Z}e^{-\beta H} = \frac{1}{Z}\sum_n |n\rangle\, e^{-\beta E_n}\, \langle n| \tag{10}$$

ukážte, že platí vzťah $S = (E-F)/T$.

[1] Pre niektoré bude treba doplniť člen $-BM$.

Klasická štatistická fyzika

Príklad 6 (Gibbsov paradox revisited). Pripomeňte si, čo presne robí faktor $1/N!$ v zápise ako napríklad $Z_N = Z_1^N/N!$ a prečo zodpovedá nerozlíšiteľnosti častíc. Rozmyslite si, že to ale platí iba v limite veľmi veľkého počtu častíc.

Môže pomôcť vypočítať Z_N v jednoduchých systémoch pre nejaké malé N. Napríklad zoberte dvojhladinový systém s energiami 0 a E. Z_2 pre rozlíšiteľné častice je triviálne $(1 + e^{-\beta E})^2$, dá sa aké dopočítať aj explicitným sumovaním cez mikrostavy dvojčasticového systému. Pre nerozlíšiteľné častice už jednoduchá cesta nie je, treba zapísať všetky mikrostavy a počítať $\sum_n e^{-\beta E_n}$. Ukážte, že v tomto prípade $Z_2 \neq Z_1^2/2!$.

Skúste vypisovať povolené mikrostavy pre $N = 3, 4, \ldots$ v prípade rozlíšiteľných a nerozlíšiteľných častíc a na základe toho si rozmyslite, že v limite $N \to \infty$ už ale faktor $N!$ bude ozaj robiť to, čo má. A teda eliminovať zo sumy tie mikrostavy, ktoré sú rôzne pre rozlíšiteľné častice, ale identický mikrostav pre nerozlíšiteľné častice.

Príklad 7 (■ Viriálový rozvoj). V skriptách Vlada Černého a/alebo Davida Tonga si pozrite odvodenie van der Waalsovej rovnice. Rozmyslite si, že je to príkladom viriálového rozvoja, ktorý je rozvojom stavovej rovnice do hustoty častíc

$$\frac{p}{kT} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n(T) \left(\frac{N}{V}\right)^n . \tag{11}$$

Čomu sa rovná prvý viriálový koeficient?

Príklad 8 (Druhý viriálový koeficient 1). Rozmyslite si, že pri odvodení sme dokázali, že

$$B_2(T) = -\frac{1}{2V} \int f_{12} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 , \tag{12}$$

kde $f(r)$ je Mayerova f funkcia daná ako

$$f_{ij} = f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \ , \ f(r) = e^{-\beta V(r)} - 1 \tag{13}$$

a $V(r)$ je dvojčasticový potenciál. Pre akú asymptotiku $V \sim r^n$ ked $r \to \infty$ je tento koeficient konečný?

Príklad 9 (■ Nečakaný faktor 2 pre biliardové gule). Majme interakčný potenciál v tvare

$$V(R) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} . \tag{14}$$

a. Rozmyslite si, o akú interakciu ide.

b. Ukážte, že v takom prípade $B_2 = 2\pi\sigma^3/3$.

c. Rozmyslite si, že to je o faktor 2 inak, ako by ste čakali.

Príklad 10 (■ Druhý viriálový koeficient 2). Majme interakčný potenciál v tvare

$$V(R) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ -V_0 & \sigma < r < 2\sigma \\ 0 & r > 2\sigma \end{cases} . \tag{15}$$

a. Rozmyslite si, o akú interakciu ide.

b. Vypočítajte B_2 pre takýto potenciál.

c. Ako vyzerá B_2 pre vysoké teploty?

Príklad 11 (Tretí viriálový koeficient). Nájdite tretí viriálový koeficient pre potenciál (14) a pre potenciál (15). Pre koeficient B_3 sa dá ukázať

$$B_3(T) = -\frac{1}{3V} \int f_{12} f_{13} f_{23} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 . \tag{16}$$

Príklad 12 (Viriálny Mayerov vzťah). Nájdite viriálový rozvoj rozdielu tepelných kapacít $C_p - C_V$.