

MIT Açık Ders Malzemeleri

<http://ocw.mit.edu>

8.333 İstatistiksel Mekanik I: Parçacıkların İstatistiksel Mekaniği

2007 Güz

Bu materyallerden alıntı yapmak veya Kullanım Şartları hakkında bilgi almak için

<http://ocw.mit.edu/terms> ve <http://tuba.acikders.org.tr>

sitesini ziyaret ediniz.

Gözden Geçirme Problemleri

Geçmiş yıllara ait ekteki sınavlar (ve çözümleri), ders içeriğini gözden geçirmenize yardımcı olmaya yöneliktir.

Her problemin ilk kısımlarının son kısımlarından daha kolay olduğuna dikkat ediniz. Bu yüzden, takıldığınızda sonraki soruya geçmeyi unutmayınız.

Aşağıdaki bilgileri yararlı bulabilirsiniz:

Fiziksel Sabitler

Elektron kütlesi	$m_e \approx 9.1 \times 10^{-31} kg$	Proton kütlesi	$m_p \approx 1.7 \times 10^{-27} kg$
Elektron Yüğü	$e \approx 1.6 \times 10^{-19} C$	Planck sab./ 2π	$\hbar \approx 1.1 \times 10^{-34} Js^{-1}$
Işık Hızı	$c \approx 3.0 \times 10^8 ms^{-1}$	Stefan sabiti	$\sigma \approx 5.7 \times 10^{-8} Wm^{-2}K^{-4}$
Boltzmann sabiti	$k_B \approx 1.4 \times 10^{-23} JK^{-1}$	Avogadro sayısı	$N_0 \approx 6.0 \times 10^{23} mol^{-1}$

Çevrim Çarpanları

$$1 atm \equiv 1.0 \times 10^5 Nm^{-2}$$

$$1 \text{Å} \equiv 10^{-10} m$$

$$1 eV \equiv 1.1 \times 10^4 K$$

Termodinamik

$$dE = TdS + dW$$

$$\text{Gaz için: } dW = -PdV$$

$$\text{Film için: } dW = \sigma dA$$

Matematiksel Formüller

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \coth x = 1 + 2e^{-2x} + \mathcal{O}(e^{-4x})$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \mathcal{O}(x^2)$$

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-\alpha x} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\left(\frac{1}{2}\right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\int_{-\infty}^\infty dx \exp\left[-ikx - \frac{x^2}{2\sigma^2}\right] = \sqrt{2\pi\sigma^2} \exp\left[-\frac{\sigma^2 k^2}{2}\right]$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \ln N! = N \ln N - N$$

$$\langle e^{-ikx} \rangle = \sum_{n=1}^\infty \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle$$

$$\ln \langle e^{-ikx} \rangle = \sum_{n=1}^\infty \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle_c$$

$$f_m^\eta(z) = \frac{1}{(m-1)!} \int_0^\infty dx \frac{x^{m-1}}{z^{-1}e^x - \eta} = \sum_{\alpha=1}^\infty \eta^{\alpha+1} \frac{z^\alpha}{\alpha^m}$$

$$\frac{df_m^\eta}{dz} = \frac{1}{z} f_{m-1}^\eta$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} f_m^-(z) = \frac{(\ln z)^m}{m!} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} m(m-1)(\ln z)^{-2} + \dots \right] \quad f_2^-(1) = \frac{\pi^2}{12} \quad f_4^-(1) = \frac{7\pi^4}{720}$$

$$\zeta_m \equiv f_m^+(1) \quad \zeta_{3/2} \approx 2.612 \quad \zeta_2 = \frac{\pi^2}{6} \quad \zeta_{5/2} \approx 1.341 \quad \zeta_3 \approx 1.202 \quad \zeta_4 = \frac{\pi^4}{90}$$

8.333: İstatistiksel Mekanik I**Güz 1998 Final Sınavı**

1. Bir yarıiletkende eksiton ayrışması: Bir yarıiletken üzerine yoğun bir lazer ışını göndermek, yığında, elektron ($-e$ yüklü ve m_e etkin kütleli) ve boşlukların ($+e$ yüklü ve m_h etkin kütleli) yarıkararlı bir topluluğunu oluşturabilir. Zıt yüklü parçacıklar (bir hidrojen atomunda olduğu gibi) çiftlenerek bir *eksiton* gazı, veya ayrışıp bir plazma oluşturabilir. Bu işlemin çok daha basitleştirilmiş bir modelini inceleyeceğiz.

(a) m_e ve m_h kütleli, etkileşmeyen klasik parçacıklar gibi ele alarak, T sıcaklığında N_e tane elektron ve N_h tane boşluktan oluşan bir gazın serbest enerjisini hesaplayınız.

• Aralarında etkileşmeyen elektron ve boşluklardan oluşan gazın kanonik üleşim fonksiyonu elektron gazı ve boşluk gazının katkılarının çarpımıdır;

$$Z_{e-h} = Z_e Z_h = \frac{1}{N_e!} \left(\frac{V}{\lambda_e^3} \right)^{N_e} \cdot \frac{1}{N_h!} \left(\frac{V}{\lambda_h^3} \right)^{N_h},$$

burada $\lambda_\alpha = h/\sqrt{2\pi m_\alpha k_B T}$ ($\alpha = e, h$) dır. Faktöröyllere Stirling yaklaşımının uygulanmasıyla serbest enerjiyi aşağıdaki gibi buluruz;

$$F_{e-h} = -k_B T \ln Z_{e-h} = N_e k_B T \ln \left(\frac{N_e}{eV} \lambda_e^3 \right) + N_h k_B T \ln \left(\frac{N_h}{eV} \lambda_h^3 \right).$$

(b) Bir eksiton oluşturan elektron boşluk çifti enerjisini ϵ kadar düşürür. [Hidrojen benzeri bir eksitonun bağlanma enerjisi, ϵ dielektrik sabiti ve $m^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$ iken, $\epsilon \approx me^4/(2\hbar^2\epsilon^2)$ 'dir.] $m = m_e + m_h$ kütleli, etkileşmeyen klasik parçacıklar gibi ele alarak, N_p tane eksitondan oluşan bir gazın serbest enerjisini hesaplayınız.

• Benzer şekilde, eksiton gazının üleşim fonksiyonu aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$Z_p = \frac{1}{N_p!} \left(\frac{V}{\lambda_p^3} \right)^{N_p} e^{-\beta(-N_p\epsilon)},$$

Bu da bize serbest enerjiyi verir;

$$F_p = N_p k_B T \ln \left(\frac{N_p}{eV} \lambda_p^3 \right) - N_p \epsilon,$$

burada $\lambda_p = h/\sqrt{2\pi(m_e + m_h)k_B T}$ 'dir.

(c) Elektron, boşluk ve eksiton durumlarının, sırasıyla, μ_e , μ_h , ve μ_p kimyasal potansiyellerini hesaplayınız.

• Kimyasal potansiyeller serbest enerjilerden aşağıdaki gibi türetilir;

$$\mu_e = \left. \frac{\partial F_{e-h}}{\partial N_e} \right|_{T,V} = k_B T \ln (n_e \lambda_e^3),$$

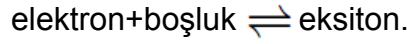
$$\mu_h = \left. \frac{\partial F_{e-h}}{\partial N_h} \right|_{T,V} = k_B T \ln (n_h \lambda_h^3),$$

$$\mu_p = \left. \frac{\partial F_p}{\partial N_p} \right|_{T,V} = k_B T \ln (n_p \lambda_p^3) - \epsilon,$$

burada $n_\alpha = N_\alpha/V$ ($\alpha = e, h, p$) dır.

(d) Eksitonlar ve elektron/boşluklar arasındaki denge koşulunu, kimyasal potansiyelleri cinsinden ifade ediniz.

- Denge koşulu, eksitonun elektron ve boşluktan oluşmasından dolayı elektron ve boşluk gazının kimyasal potansiyellerinin eksiton gazıninkine eşitlenmesiyle elde edilir;



Böylece, denge durumunda

$$\mu_e(n_e, T) + \mu_h(n_h, T) = \mu_p(n_p, T),$$

üst alma işlemiyle aşağıdakine eşittir;

$$n_e \lambda_e^3 \cdot n_h \lambda_h^3 = n_p \lambda_p^3 e^{-\beta \epsilon}$$

(e) Yüksek bir T sıcaklığında, eksitonların n_p yoğunluğunu, uyarımların $n \approx n_e + n_h$ toplam yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak bulunuz.

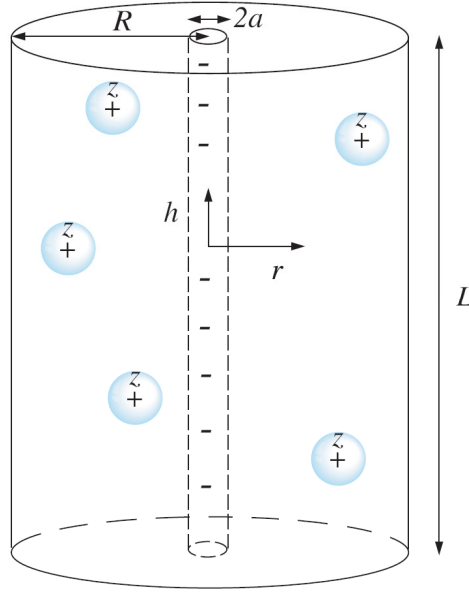
- Denge şartından dolayı

$$n_p = n_e n_h \frac{\lambda_e^3 \lambda_h^3}{\lambda_p^3} e^{\beta \epsilon}.$$

Yüksek sıcaklıkta, $n_p \ll n_e = n_h \approx n/2$, ve

$$n_p = n_e n_h \frac{\lambda_e^3 \lambda_h^3}{\lambda_p^3} e^{\beta \epsilon} = \left(\frac{n}{2}\right)^2 \frac{h^3}{(2\pi k_B T)^{3/2}} \left(\frac{m_e + m_h}{m_e m_h}\right)^{3/2} e^{\beta \epsilon}.$$

2. Manning geçişi: DNA gibi iyonik polimerler (polielektrolitler) suya batırıldığında negatif yüklü ters iyonlar, geride pozitif yüklü bir polimer bırakarak çözeltiye karışır. Geride bırakılan yüklerin elektrostatik itmesi yüzünden, aşağıdaki şekilde görüldüğü gibi polimer a yarıçaplı bir silindir biçiminde uzar. Termal dalgalanmalar iyonların çözelti içinde dolaşmalarını desteklerken, elektrostatik çekmeler dönüp polimer üzerinde yoğunlaşmalarını tercih eder. Eğer karşı-iyonların sayısı N ise, çubuk üzerinde kalan N tane pozitif yük $\varphi(r) = -2(Ne/L) \ln(r/L)$ potansiyeliyle etkileşir, burada r



silindirik geometride radyal koordinattır. Eğer karşı-iyonlar arasındaki Coulomb itmesini gözardı edersek, şu klasik Hamiltonyen ile tanımlanabilirler,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + 2e^2 n \ln \left(\frac{r}{L} \right) \right],$$

burada $n = N/L$ 'dir.

(a) Yarıçapı R olan silindirik bir kap için, kanonik üleşim fonksiyonu Z 'yi sıcaklık T , yoğunluk n , ve yarıçaplar R ve a cinsinden hesaplayınız.

- Kanonik üleşim fonksiyonu

$$\begin{aligned} Z &= \int \frac{\prod_i d^3 p_i d^3 q_i}{N! h^{3N}} \exp \left\{ -\beta \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + 2e^2 n \ln \left(\frac{r}{L} \right) \right] \right\} \\ &= \left(\frac{2\pi L e}{N \lambda^3} \right)^N L^{N \cdot \beta 2e^2 n} \left[\int_a^R r dr \cdot r^{-2e^2 n / k_B T} \right]^N \\ &= \left(\frac{2\pi e}{n \lambda^3} \right)^N L^{2N e^2 n \beta} \left[\frac{R^{2(1-e^2 n / k_B T)} - a^{2(1-e^2 n / k_B T)}}{2(1-e^2 n / k_B T)} \right]^N. \end{aligned}$$

(b) Bir karşı-iyonun radyal konumu ve birinci momenti $\langle r \rangle$ için olasılık dağılım fonksiyonu $p(r)$ 'yi hesaplayınız.

- Kanonik dağılımdan N adet belirsiz moment ve $N-1$ tane pozisyonun integralinin alınmasıyla dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibi elde edilir;

$$p(r) = \frac{r e^{-(2e^2 n / k_B T) \ln(r/L)}}{\int_a^R dr r e^{-(2e^2 n / k_B T) \ln(r/L)}} = 2 \left(1 - \frac{e^2 n}{k_B T} \right) \frac{r^{1-2e^2 n / k_B T}}{R^{2(1-e^2 n / k_B T)} - a^{2(1-e^2 n / k_B T)}}.$$

(Normalleştirme koşulu: $\int_a^R dr p(r) = 1$.) Böylece ortalama konum;

$$\langle r \rangle = \int_a^R r p(r) dr = \left(\frac{2k_B T - 2e^2 n}{3k_B T - 2e^2 n} \right) \left(\frac{R^{3-2e^2 n/k_B T} - a^{3-2e^2 n/k_B T}}{R^{2-2e^2 n/k_B T} - a^{2-2e^2 n/k_B T}} \right).$$

(c) Yukarıda $R \gg a$ limitinde hesaplanan sonuçların davranışı, yüksek ve düşük sıcaklıklarda çok farklıdır. Geçiş sıcaklığını belirleyiniz ve bu iki fazın doğasını tanımlayınız. Özellikle, her iki durumda $\langle r \rangle$ 'nin R ve a bağımlılığı nasıldır?

• Öncelikle $e^2 n/k_B T > 1$ gibi düşük sıcaklıkları göz önünde bulundurun. $R \gg a$ limitinde, dağılım fonksiyonu

$$p(r) = 2 \left(1 - \frac{e^2 n}{k_B T} \right) \frac{r^{1-2e^2 n/k_B T}}{a^{2(1-e^2 n/k_B T)}},$$

olur ve $\langle r \rangle \propto a$. Bunu görmek için ya yukarıda hesaplanan ortalama, $\langle r \rangle$, $R \gg a$ limitinde incelenmeli ya da dikkat edilirse

$$p(r) dr = 2 \left(1 - \frac{e^2 n}{k_B T} \right) x^{1-2e^2 n/k_B T} dx,$$

burada $x = r/a$ dır ve $\langle r \rangle \propto a$ olduğu hemen farkedilir (eğer $e^2 n/k_B T > 1$ ise $\int_1^\infty dx x^{1-2e^2 n/k_B T} < \infty$) Diğer yandan yüksek sıcaklıklarda ($e^2 n/k_B T < 1$) dağılım fonksiyonu aşağıdakine dönüşür

$$p(r) = 2 \left(1 - \frac{e^2 n}{k_B T} \right) \frac{r^{1-2e^2 n/k_B T}}{R^{2(1-e^2 n/k_B T)}},$$

ve benzer argümanlarla $\langle r \rangle \propto R$ olur. Bu şekilde, $T_c = e^2 n/k_B$ sıcaklığında, karşı iyonların polimere yapıştığı “yoğun” bir halden, karşı iyonların, polimerden tipik uzaklıklığı kap ölçüleri tarafından belirlenen, su içinde salındığı bir “gaz” faza geçiş vardır.

(d) Karşı-iyonların kabın duvarlarına uyguladığı basıncı $r = R$ 'de, $R \gg a$ limitinde, tüm sıcaklıklar için hesaplayınız.

• Karşı iyonların kabın yarıçapını R den $R + dR$ 'ye genişletmek için yaptığı iş:

$$dW = dF = (\text{kuvvet}) dR = -P (2\pi RL) dR,$$

buradan basınç;

$$P = -\frac{1}{2\pi RL} \frac{\partial F}{\partial R} = \frac{k_B T}{2\pi RL} \frac{\partial \ln Z}{\partial R}.$$

Düşük sıcaklıklarda, $T < T_c$, üleşim fonksiyonu $R \gg a$ limitinde R 'den bağımsız olduğu için basınç sıfıra gider. $T > T_c$ 'de yukarıdaki sonuç şu hali alır;

$$P = \frac{k_B T}{2\pi R L} 2N \left(1 - \frac{e^2 n}{k_B T} \right) \frac{1}{R},$$

yani,

$$PV = N k_B T \left(1 - \frac{e^2 n}{k_B T} \right).$$

(e) Karşı-iyonlar arasındaki Coulomb etkileşmesi hesaba katılırsa, (d) şikkında incelenen geçişin karakteri değişir. Etkileşimli probleme yaklaşık bir yöntem, karşı-iyonların N_1 'lik bir bölümünün polimer çubuk boyunca yoğunlaşmasına izin vermektir, geri kalan $N_2 = N - N_1$ tanesi ise çözücünde dalgalanır. Serbest karşı-iyonlar yine etkileşmeyen, aşağıdaki Hamiltonyene tabi parçacıklar gibi ele alınır

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + 2e^2 n_2 \ln \left(\frac{r_i}{L} \right) \right],$$

burada $n_2 = N_2/L$ 'dir. Etkileşmeyen iyonların dengedeki sayısı N_2^* 'yi tahmin ediniz, ve tahmininizi, sistemin N_2^* 'den küçük sapmalara verdiği tepkiyi tartışarak doğrulayınız. (Bu yeni hesaplamalar gerektirmeyen nitel bir sorudur.)

- T_c 'den düşük sıcaklıkta (yani $e^2 n/k_B T > 1$) gerçekleşen, $n_2^* \equiv N_2^*/V \equiv k_B T/e^2$ 'den bir sapma (n_2) düşünün. Eğer $n_2 > n_2^*$ ise karşı iyonlar yoğunlaşma eğiliminde olur ($e^2 n/k_B T > 1$ olduğundan) ve bu da n_2 'yi azaltır. Diğer yandan, eğer $n_2 < n_2^*$ ise ($e^2 n/k_B T < 1$ olduğundan) karşı iyonlar “buharlaşıma” eğiliminde olur. Her iki durumda da, sistem yoğunluk n_2 'yi $n_2^* = k_B T/e^2$ 'nin (denge) değerine gelmeye zorlar. Eğer sıcaklık T_c 'den yüksekse $n_2^* = n$ olur ve yoğunlaşma yoktur.

3. d boyutlu Bose gazı: Enerji spektrumu $\epsilon = p^2/2m$ olan, d boyutta $V = L^d$ “hacimli” bir kutuya konmuş, etkileşmeyen (spinsiz) bozonların bir gazını düşünelim.

(a) μ kimyasal potansiyelinde büyük potansiyel $\mathcal{G} = -k_B T \ln \mathcal{Q}$ ve yoğunluk $n = N/V$ 'yi hesaplayınız. Yanıtınızı d ve $f_m^+(z)$ cinsinden ifade ediniz, burada $z = e^{\beta\mu}$ ve

$$f_m^+(z) = \frac{1}{\Gamma(m)} \int_0^\infty \frac{x^{m-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx.$$

(İpucu: $\ln \mathcal{Q}$ ifadesinde kısmi integral alımını kullanınız)

- Aşağıda;

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{N\beta\mu} \sum_{\{n_i\}}^{\sum_i n_i = N} \exp \left(-\beta \sum_i n_i \epsilon_i \right), \\ &= \prod_i \sum_{\{n_i\}} e^{\beta(\mu - \epsilon_i)n_i} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_i)}} \end{aligned}$$

olduğundan, $\ln Q = -\sum_i \ln(1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_i)})$ bulunur. $\sum_i$ toplamı bir d boyutlu integrale, $\int V d^d k / (2\pi)^d = [VS_d / (2\pi)^d] \int k^{d-1} dk$, değiştirilirse ki burada $S_d = 2\pi^{d/2} / (d/2 - 1)!$ 'dir, bize şunu verir,

$$\ln Q = -\frac{VS_d}{(2\pi)^d} \int k^{d-1} dk \ln(1 - ze^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m}).$$

$x = \beta \hbar^2 k^2 / 2m (\Rightarrow k = \sqrt{2mx} / \beta \hbar$ ve $dk = dx \sqrt{2m} / \beta \hbar$) değişken dönüşümüyle

$$\ln Q = -\frac{VS_d}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta} \right)^{d/2} \int x^{d/2-1} dx \ln(1 - ze^{-x}).$$

Son olarak kısmi integral olarak,

$$\ln Q = \frac{VS_d}{(2\pi)^d} \frac{1}{d} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta} \right)^{d/2} \int x^{d/2} dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = V \frac{S_d}{d} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta} \right)^{d/2} \int dx \frac{x^{d/2}}{z^{-1}e^x - 1},$$

ve

$$\mathcal{G} = -k_B T \ln Q = -V \frac{S_d}{d} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta} \right)^{d/2} k_B T \Gamma \left(\frac{d}{2} + 1 \right) f_{\frac{d}{2}+1}^+(z),$$

bulunur. Burada $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ özelliği kullanılarak aşağıdaki sonuç bulunur;

$$\mathcal{G} = -\frac{V}{\lambda^d} k_B T f_{\frac{d}{2}+1}^+(z).$$

Parçacıkların ortalama değeri aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$\begin{aligned} N &= \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)} \ln Q = V \frac{S_d}{d} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta} \right)^{d/2} \int x^{d/2-1} dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}}, \\ &= V \frac{S_d}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta} \right)^{d/2} \Gamma \left(\frac{d}{2} \right) f_{\frac{d}{2}}^+(z) = \frac{V}{\lambda^d} f_{\frac{d}{2}}^+(z) \end{aligned}$$

yani,

$$n = \frac{1}{\lambda^d} f_{\frac{d}{2}}^+(z).$$

(b) PV/E oranını hesaplayınız ve klasik değeriyle karşılaştırınız.

- Biliyoruz ki $PV = -\mathcal{G}$, ve

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q = +\frac{d}{2} \frac{\ln Q}{\beta} = -\frac{d}{2} \mathcal{G}.$$

Buradan $PV/E = 2/d$ buluruz ki bu da klasik değeriyle aynıdır.

(c) Bose-Einstein yoğuşması için kritik sıcaklık $T_c(n)$ 'yi bulunuz.

- $T_c(n)$ kritik sıcaklığı $d > 2$ için aşağıdaki gibi verilir;

$$n = \frac{1}{\lambda^d} f_{\frac{d}{2}}^+(1) = \frac{1}{\lambda^d} \zeta_{\frac{d}{2}}$$

buradan,

$$T_c = \frac{h^2}{2mk_B} \left(\frac{n}{\zeta_{\frac{d}{2}}} \right)^{2/d}.$$

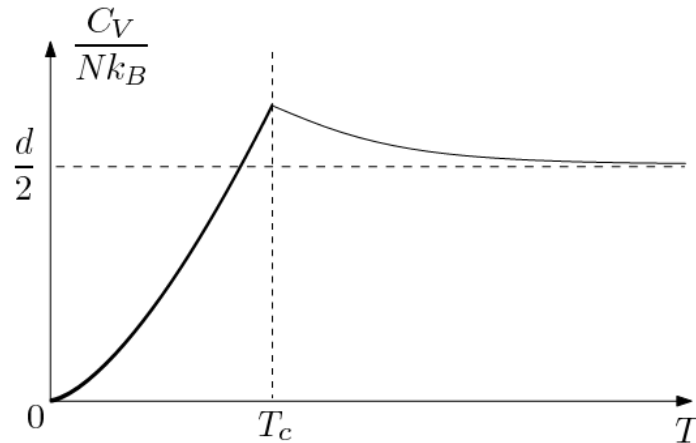
(d) Isı kapasitesi $C(T)$ 'yi $T < T_c(n)$ için hesaplayınız.

- $T < T_c$ 'de, $z = 1$ ve

$$C(T) = \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_{z=1} = -\frac{d}{2} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial T} \Big|_{z=1} = -\frac{d}{2} \left(\frac{d}{2} + 1 \right) \frac{\mathcal{G}}{T} = \frac{d}{2} \left(\frac{d}{2} + 1 \right) \frac{V}{\lambda^d} k_B \zeta_{\frac{d}{2}+1}.$$

(e) Isı kapasitesini bütün sıcaklıklar için çiziniz.

•



(f) Isı sığasının maksimum değerinin klasik limitine oranı, $C_{\max}/C(T \rightarrow \infty)$ 'yi bulunuz ve $d = 3$ için değerini bulunuz.

- Isı sığasının maksimum değeri geçiş noktasında olduğundan,

$$C_{\max} = C(T_c) = \frac{d}{2} \left(\frac{d}{2} + 1 \right) \frac{V}{\left(\zeta_{\frac{d}{2}}/n \right)} k_B f_{\frac{d}{2}+1}^+(1) = \frac{d}{2} N k_B \left(\frac{d}{2} + 1 \right) \frac{\zeta_{\frac{d}{2}+1}}{\zeta_{\frac{d}{2}}}.$$

Böylece,

$$\frac{C_{\max}}{C(T \rightarrow \infty)} = \left(\frac{d}{2} + 1 \right) \frac{\zeta_{\frac{d}{2}+1}}{\zeta_{\frac{d}{2}}},$$

$d = 3$ için 1.283 bulunur.

(g) Yukarıda hesaplanan oran $d \rightarrow 2$ limitinde nasıl davranır? Sonuçlarınız hangi boyutlarda geçerlidir? Açıklayınız.

- Maksimum ısı sığası *yukarıda görüldüğü gibi* $d \rightarrow 2$ durumunda sıfıra gider!. Eğer $m \leq 2$ ise $f_m^+(x \rightarrow 1) \rightarrow \infty$ olduğundan fugasite z her zaman 1'den küçüktür. En düşük sıcaklıklarda dahi taban durumunda hiçbir makroskopik doluluk olmadığından $d \leq 2$ 'de Bose-Einstein yoğuşması olmaz. Dolayısıyla yukarıdaki sonuçlar sadece $d \leq 2$ için geçerlidir.

8.333: İstatistiksel Mekanik I**Güz 1999 Final Sınavı**

1. Elektron Manyetizması: Bir metaldeki iletkenlik elektronları spinini $\frac{1}{2}$ (yukarı ve aşağı yozlaşmasıyla), ve yoğunluğu ve $n = N/V$ olan fermiyonların gazı olarak düşünebilir.

(a) Elektronlar arasındaki etkileşimi göz ardı ederek taban durumlarını söyle anlatınız. Fermi dalga sayısı k_F ve taban durum enerji yoğunluğu E_0/V 'yi yoğunluk n cinsinden hesaplayınız.

• Taban durumda fermi denizi k_F 'ye kadar spin yukarı ve spin aşağı parçacıklarla simetrik olarak doludur. k_F yoğunlukla aşağıdaki gibi ilişkilidir;

$$\frac{N}{2} = V \int_{k < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = V \int_0^{k_F} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} k^2 dk = \frac{V k_F^3}{6\pi^2},$$

ve

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}.$$

Taban durum enerjisi aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$E_0 = 2V \int_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 2V \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{5 (2\pi)^3} k_F^5,$$

ve enerji yoğunluğu da;

$$\frac{E_0}{V} = \frac{3}{5} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{5/3}.$$

Elektronlar ayrıca Coulomb itmesi *üzerinden* etkileştiklerinden konum uzayında antisimetrik bir dalga fonksiyonunu tercih eder, ki bu da onları ayrı tutar. Bu etkileşim fermiyonik dalga fonksiyonlarının tam (konum ve spin) antisimetrisinden dolayı etkin bir spin-spin çiftlenimi olarak tarif edilebilir, ki bu da paralel spinli durumları önerir. Basit bir yaklaşımda, etkileşimin etkisi

$$U = \alpha \frac{N_+ N_-}{V},$$

potansiyel teriminin Hamiltonyene eklenmesiyle gösterilir. Burada N_+ ve $N_- = N - N_+$ yukarı ve aşağı spinli elektronların sayıları ve V ise hacimdir. (α parametresi saçılma uzunluğu a ile $\alpha = 4\pi k^2 a/m$ şeklinde ilişkilidir.) Öğrenmek istediğimiz şey, manyetize olmamış gazın $N_+ = N_- = N/2$ ile hala enerjiyi minimum mu yaptığı yoksa gazın kendiliğinden manyetize mi olduğudur.

(b) Değişen Fermi dalga sayıları k_{F+} ve k_{F-} 'yi yoğunluklar $n_+ = N_+/V$ ve $n_- = N_-/V$ cinsinden ifade ediniz.

- (a)'nın çözümünden şunu çıkarabiliriz;

$$k_{F\pm} = (6\pi^2 n_{\pm})^{1/3}.$$

(c) Simetrik durumdan küçük sapmalar için, $n_+ = n/2 + \delta$ ve $n_- = n/2 - \delta$, sistemin kinetik enerjisindeki değişimi δ 'nın ikinci derecesine kadar hesaplayınız.

- (a) şıkkındaki enerji hesaplarını şimdi spin yukarı ve spin aşağı gazları için tekrar ederek;

$$\frac{E_{kin}}{V} = \frac{1}{10\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} (k_{F+}^5 + k_{F-}^5) = \frac{3}{5} (6\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} (n_+^{5/3} + n_-^{5/3}).$$

bulunur. $n_{\pm} = n/2 \pm \delta$ kullanılarak ve yukarıdaki sonucu δ 'nın ikinci derecesine kadar açarak;

$$\frac{E_{kin}}{V} = \frac{E_0}{V} + \frac{4}{3} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 n^{-1/3}}{2m} \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^4).$$

(d) Spin-spin etkileşim yoğunluğunu δ cinsinden ifade ediniz. Öyle bir kritik α_c değeri bulunuz ki $\alpha > \alpha_c$ için elektron gazı toplam enerjisini kendiliğinden bir manyetizasyon geliştirerek düşürebilsin. (Bu *Stoner* kararsızlığı olarak bilinir.)

- Etkileşim enerji yoğunluğu;

$$\frac{U}{V} = \alpha n_+ n_- = \alpha \left(\frac{n}{2} + \delta \right) \left(\frac{n}{2} - \delta \right) = \alpha \frac{n^2}{4} - \alpha \delta^2.$$

Toplam enerji yoğunluğu ise;

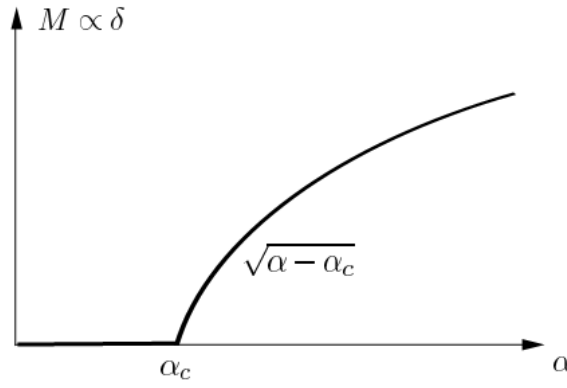
$$\frac{E}{V} = \frac{E_0 + \alpha n^2/4}{V} + \left[\frac{4}{3} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 n^{-1/3}}{2m} - \alpha \right] \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^4).$$

δ cinsinden ikinci derece terim eksi olduğunda, elektron gazının enerjisi sonlu δ için daha düşüktür, yani gaz kendiliğinden bir manyetizasyon kazanır. Bunun için;

$$\alpha > \alpha_c = \frac{4}{3} (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 n^{-1/3}}{2m}.$$

(e) α 'nın kendiliğinden oluşan manyetizasyonunun davranışını nitel olarak anlatın ve çizerek belirtin.

- $\alpha > \alpha_c$ için δ 'nın ideal değeri, enerji yoğunluğunun δ 'nın dördüncü terimine kadar açılmasıyla elde edilir. Dördüncü terimin katsayısı pozitifdir ve minimum enerji, $\delta^2 \propto (\alpha - \alpha_c)$ biçiminde bir değer için elde edilir. Manyetizasyon δ ile orantılıdır ve α_c 'ye göre $\sqrt{\alpha - \alpha_c}$ şeklinde değişir.



2. Bozon manyetizması: Spini 1 ve birbiriyle etkileşmeyen bozonlardan oluşan bir gazın Hamiltonyeni aşağıdaki gibidir;

$$\mathcal{H}_1(\vec{p}, s_z) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \mu_0 s_z B, \quad ,$$

burada $\mu_0 = e\hbar/mc$ 'dir ve s_z üç muhtemel değer alabilir (-1, 0, +1). (Yörüngesel $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ etkisi ihmal edilmiştir).

(a) μ kimyasal potansiyelli bir büyük kanonik toplulukta, dalga sayısı $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ olan tek parçacık durumlarının ortalama doluluk sayıları $\{\langle n_+(\vec{k}) \rangle, \langle n_0(\vec{k}) \rangle, \langle n_-(\vec{k}) \rangle\}$ nedir?

• Kimyasal potansiyeli μ olan bir grand kanonik toplulukta tek parçacık durumlarının doluluk sayısı Bose-Einstein dağılımıyla verilir;

$$\begin{aligned} n_s(\vec{k}) &= \frac{1}{e^{\beta[\mathcal{H}(s)-\mu]} - 1}, \quad (s = -1, 0, 1) \\ &= \frac{1}{\exp \left[\beta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_0 s B \right) - \beta \mu \right] - 1} \end{aligned}$$

(b) Bozonların s_z değerinin üç muhtemel durumu için ortalama toplam sayıları $\{N_+, N_0, N_-\}$ 'i $f_m^+(z)$ fonksiyonları cinsinden hesaplayınız.

• Spini s olan parçacıkların toplam sayısı;

$$N_s = \sum_{\{\vec{k}\}} n_s(\vec{k}), \quad \Rightarrow \quad N_s = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{\exp \left[\beta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_0 s B \right) - \beta \mu \right] - 1}.$$

$k \equiv x^{1/2} \sqrt{2mk_B T}/\hbar$ değişken dönüşümüyle;

$$N_s = \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}^+(z e^{\beta \mu_0 s B}),$$

burada

$$f_m^+(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(m)} \int_0^\infty \frac{dx x^{m-1}}{z^{-1} e^x - 1}, \quad \lambda \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}, \quad z \equiv e^{\beta \mu}.$$

(c) Manyetizasyon ifadesini, $M(T, \mu) = \mu_0(N_+ - N_-)$, yazın, ve küçük B değerleri için sonucu açarak sıfır alan alinganlığını, $\chi(T, \mu) = \partial M / \partial B|_{B=0}$, bulun.

- *Manyetizasyon;*

$$\begin{aligned} M(T, \mu) &= \mu_0 (N_+ - N_-) \\ &= \mu_0 \frac{V}{\lambda^3} \left[f_{3/2}^+(ze^{\beta\mu_0 B}) - f_{3/2}^+(ze^{-\beta\mu_0 B}) \right]. \end{aligned}$$

Sonucu küçük B değerleri için açarsak;

$$f_{3/2}^+(ze^{\pm\beta\mu_0 B}) \approx f_{3/2}^+(z[1 \pm \beta\mu_0 B]) \approx f_{3/2}^+(z) \pm z \cdot \beta\mu_0 B \frac{\partial}{\partial z} f_{3/2}^+(z).$$

$z df_m^+(z)/dz = f_{m-1}^+(z)$, kullanılarak aşağıdakiler elde edilir;

$$M = \mu_0 \frac{V}{\lambda^3} (2\beta\mu_0 B) \cdot f_{1/2}^+(z) = \frac{2\mu_0^2}{k_B T} \frac{V}{\lambda^3} \cdot B \cdot f_{1/2}^+(z),$$

ve

$$\chi \equiv \left. \frac{\partial M}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{2\mu_0^2}{k_B T} \frac{V}{\lambda^3} \cdot f_{1/2}^+(z).$$

$n = N/V$ toplam yoğunluk olmak üzere, $\chi(T, n)$ 'in davranışını bulmak için, şöyle devam ediniz:

(d) $B = 0$ olduğunda, n 'de ikinci dereceye kadar doğru, yüksek sıcaklık açılımını $z(\beta, n) = e^{\beta\mu}$ için bulun. Bu şekilde $\chi(T, n)$ 'ye yüksek sıcaklıklarda kuantum istatistiğinden ilk düzeltmeyi elde ediniz.

- *Yüksek sıcaklık limitinde*, z küçüktür. $f_m^+(z)$ için Taylor açılımını kullanarak toplam yoğunluğu $n(B = 0)$ yazarsak;

$$\begin{aligned} n(B = 0) &= \left. \frac{N_+ + N_0 + N_-}{V} \right|_{B=0} = \frac{3}{\lambda^3} f_{3/2}^+(z) \\ &\approx \frac{3}{\lambda^3} \left(z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} + \dots \right). \end{aligned}$$

Yukarıdaki denklemi ters çevirerek;

$$z = \left(\frac{n\lambda^3}{3} \right) - \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{n\lambda^3}{3} \right)^2 + \dots$$

Alinganlık aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{2\mu_0^2}{k_B T} \frac{V}{\lambda^3} \cdot f_{1/2}^+(z), \\ \chi/N &= \frac{2\mu_0^2}{k_B T} \frac{1}{n\lambda^3} \left(z + \frac{z^2}{2^{1/2}} + \dots \right) \\ &= \frac{2\mu_0^2}{3k_B T} \left[1 + \left(-\frac{1}{2^{3/2}} + \frac{1}{2^{1/2}} \right) \left(\frac{n\lambda^3}{3} \right) + O(n^2) \right]. \end{aligned}$$

(e) Bose-Einstein yoğunlaşmasının sıcaklığını, $T_c(n, B = 0)$, bulunuz. Yüksek sıcaklık tarafından $T_c(n)$ 'ye yaklaştığımızda $\chi(T, n)$ 'ye ne olur?

- *Bose-Einstein yoğunlaşması* $z = 1$ iken,

$$n = \frac{3}{\lambda^3} f_{3/2}^+(1),$$

yoğunluğunda ya da

$$T_c(n) = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{n}{3 \zeta_{3/2}} \right)^{2/3},$$

sıcaklığında olur. Burada $\zeta_{3/2} \equiv f_{3/2}^+(1) \approx 2.61$ 'dir. $\lim_{z \rightarrow 1} f_{1/2}^+(z) = \infty$ olduğundan alınganlık $\chi(T, n)$, $T_c(n)$ 'ye yüksek sıcaklık tarafından yaklaştığımızda ıraksar.

(f) B 'nin küçük sonlu bir değerinde $T < T_c(n)$ için kimyasal potansiyel μ nedir? Hangi tek parçacık durumu makroskopik doluluk sayısına sahiptir?

- $T < T_c$ için kimyasal potansiyel: $n_s(\vec{k}, B) = [z^{-1} e^{\beta \epsilon_s(\vec{k}, B)} - 1]^{-1}$ bütün $\vec{k}$ ve s_z için pozitif olduğundan, μ 'nun değeri minimum muhtemel enerjiyle yukarıdan sınırlanmıştır, yani;

$$T < T_c \text{ ve } B \text{ sonlu olarak, } z e^{\beta \mu_0 B} = 1, \Rightarrow \mu = -\mu_0 B.$$

Bu yüzden makroskopik olarak doldurulmuş tek parçacık durumu için $\vec{k} = 0$, ve $s_z = +1$ olur.

(g) (f) 'deki sonuçları kullanarak kendiliğinden oluşan manyetizasyonu bulun,

$$\overline{M}(T, n) = \lim_{B \rightarrow 0} M(T, n, B).$$

- *Kendiliğinden oluşan manyetizasyon*: Uyarılmış durumların manyetizasyona katkısı $B \rightarrow 0$ limitinde sıfıra gider. Bu yüzden $T < T_c$ için toplam manyetizasyon ($k = 0$, $s_z = +1$) durumunun makroskopik doluluğundandır ve

$$\begin{aligned} \overline{M}(T, n) &= \mu_0 V n_+(k=0) \\ &= \mu_0 V (n - n_{excited}) = \mu_0 \left(N - \frac{3V}{\lambda^3} \zeta_{3/2} \right). \end{aligned}$$

3. Virial teoremi N (klasik ya da kuantum) parçacıktan oluşan bir sistem için faz uzayının ölçek değişimi gibi kanonik dönüşümler altında değişmez kalmasının bir sonucudur. Sorunun devamında genelleştirilmiş koordinatları ve momentumları ve ($i = 1, \dots, N$) olan N parçacığın Hamiltonyenini $\mathcal{H}(\{\vec{p}_i\}, \{\vec{q}_i\})$ olarak düşününüz.

(a) *Klasik model*: Klasik üleşim fonksiyonunun, $Z \equiv Z[\mathcal{H}]$, ifadesini yazınız ve $\vec{q}_1 \rightarrow \lambda \vec{q}_1$, $\vec{p}_1 \rightarrow \vec{p}_1/\lambda$ değişimi gibi bir çift eşlenik değişkenin yeniden ölçeklendirilmesi

altında değişmez olduğunu gösteriniz. Örneğin $Z[\mathcal{H}_\lambda]$ λ 'dan bağımsızdır, ki burada $\mathcal{H}_\lambda$ yukarıdaki ölçeklendirmeden sonra elde edilen Hamiltonyendir.

- Klasik üleşim fonksiyonu faz uzayı üzerinde uygun integraller alınarak elde edilir;

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \left(\prod_i d^3 p_i d^3 q_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}}.$$

Yeniden ölçeklendirilmiş Hamiltonyen, $\mathcal{H}_\lambda = \mathcal{H}(\vec{p}_1/\lambda, \{\vec{p}_{i \neq 1}\}, \lambda \vec{q}_1, \{\vec{q}_{i \neq 1}\})$, yeniden ölçeklendirilmiş üleşim fonksiyonunu verir;

$$Z[\mathcal{H}_\lambda] = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \left(\prod_i d^3 p_i d^3 q_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}_\lambda},$$

bu da $\vec{q}_1' = \lambda \vec{q}_1$, $\vec{p}_1' = \vec{p}_1/\lambda$ değişken dönüşümleriyle aşağıdaki denkleme indirgenir;

$$Z[\mathcal{H}_\lambda] = \frac{1}{N!h^{3N}} \int (\lambda^3 d^3 p_1') (\lambda^{-3} d^3 q_1') \left(\prod_i d^3 p_i d^3 q_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}} = Z,$$

(b) *Kuantum mekaniksel model*: Kuantum üleşim fonksiyonunu veren ifadeyi yazınız. $\vec{q}_1 \rightarrow \lambda \vec{q}_1$, $\vec{p}_1 \rightarrow \vec{p}_1/\lambda$ dönüşümleri altında bu üleşim fonksiyonunun da değişmez olduğunu gösteriniz. Burada $\vec{p}_i$ ve $\vec{q}_i$ artık kuantum mekaniksel operatörlerdir. (İpucu: zamandan bağımsız Schrödinger denkleminle başlayın.)

- Enerji bazını kullanarak

$$Z = \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right) = \sum_n e^{-\beta E_n},$$

E_n özdeğerleri aşağıdaki Schrödinger denkleminde elde edilir;

$$\mathcal{H}(\{\vec{p}_i\}, \{\vec{q}_i\}) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle,$$

burada $|\psi_n\rangle$ öz durumlarıdır. Yeniden ölçeklendirme dönüşümünden sonra Hamiltonyen;

$$\mathcal{H}(\vec{p}_1/\lambda, \{\vec{p}_{i \neq 1}\}, \lambda \vec{q}_1, \{\vec{q}_{i \neq 1}\}) |\psi_n^{(\lambda)}\rangle = E_n^{(\lambda)} |\psi_n^{(\lambda)}\rangle.$$

Koordinat gösteriminde momentum operatörü $\vec{p}_i = -i\hbar \partial / \partial \vec{q}_i$ 'dir ve bu yüzden $\psi_\lambda(\{\vec{q}_i\}) = \psi(\{\lambda \vec{q}_i\})$, $E_n^{(\lambda)} = E_n$ özdeğerli yeniden ölçeklendirilmiş denklemin çözümüdür. Özenerjiler dönüşüm altında değişmez olduğundan, ilgili üstlerin toplamı olan üleşim fonksiyonu da değişmeden kalır.

(c) Aşağıdaki biçimde bir Hamiltonyen varsayalım

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\{\vec{q}_i\}).$$

$Z[\mathcal{H}_\lambda]$ 'nin λ 'dan bağımsız olduğu sonucunu kullanarak *virial* ilişkisini kanıtlayınız,

$$\left\langle \frac{\vec{p}_1^2}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_1} \cdot \vec{q}_1 \right\rangle,$$

burada parantezler termal ortalamaları gösterir. (Cevabınızı, muhtemel bir kuantum mekaniksel çıkarım da benzer olduğu için klasik olarak formüle edebilirsiniz.)

- Serbest enerjinin λ 'ya göre $\lambda = 1$ 'de türevini alarak

$$0 = \left. \frac{\partial \ln Z_\lambda}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=1} = -\beta \left\langle \left. \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=1} \right\rangle = -\beta \left\langle -\frac{\vec{p}_1^2}{m} + \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_1} \cdot \vec{q}_1 \right\rangle,$$

buradan da,

$$\left\langle \frac{\vec{p}_1^2}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \vec{q}_1} \cdot \vec{q}_1 \right\rangle.$$

(d) Yukarıdaki ilişki bazen uzak galaksilerin kütlelerini tahmin etmek için kullanılır.

G-8.333 galaksisinin dış sınırındaki yıldızların $v \approx 200$ km/s hızla hareket ettiği ölçülmüştür. G-8.333 'ün kütlelerinin boyutuna oranını sayısal olarak tahmin ediniz.

- Virial ilişkisi kütleçekimsel sistemlere uygulandığında

$$\langle mv^2 \rangle = \left\langle \frac{GMm}{R} \right\rangle.$$

Galaksideki yıldızların kinetik ve potansiyel enerjilerinin bir çeşit dengeye ulaştığını düşünürsek aşağıdaki sonucu elde ederiz;

$$\frac{M}{R} \approx \frac{v^2}{G} \approx 6 \times 10^{20} \text{ kg/m}.$$

1. He^3 'ün donması: Düşük sıcaklıklarda basınç uygulanarak He^3 sıvıdan katıya çevrilebilir. Bunun faz sınırının tuhaf bir özelliği ise $(dP/dT)_{erime}$ 'nin 0.3K'den düşük sıcaklıklarda negatif olmasıdır. $[(dP/dT)_{erime} \approx -30 \text{ atm}^\circ K^{-1}, T \approx 0.1^\circ K]$. Bu özelliği açıklamak için He^3 'ün katı ve sıvı fazları için basit bir model kullanacağız.

(a) Katı halde, He^3 atomları bir kristal örgü oluştururlar. Her atom 1/2 nükleer spinine sahiptir. Spinler arasındaki etkileşimi göz ardı edersek, spin serbestlik derecesinden dolayı oluşan parçacık başına entropi s_s nedir?

- Katı He^3 'ün entropisi nükleer spin yozlaşmasından dolayı oluşur ve;

$$s_s = \frac{S_s}{N} = \frac{k_B \ln(2^N)}{N} = k_B \ln 2.$$

(b) Sıvı He^3 , atom başına 46 Å^3 hacimle ideal Fermi gazı olarak modellenir. Kelvin cinsinden Fermi sıcaklığı T_F nedir?

- Sıvı He^3 için, Fermi sıcaklığı yoğunluktan aşağıdaki gibi elde edilebilir;

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} = \frac{h^2}{2mk_B} \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3} \\ \approx \frac{(6.7 \times 10^{-34})^2}{2 \cdot (6.8 \times 10^{-27})(1.38 \times 10^{-23})} \left(\frac{3}{8\pi \times 46 \times 10^{-30}} \right)^{2/3} \approx 9.2^\circ K.$$

(c) Sıvı He^3 'ün ısı sığası düşük sıcaklıklarda nasıl davranır? C_V 'yi N , T , k_B , T_F cinsinden *sayısal bir sabite kadar* $T \ll T_F$ durumunda geçerli olacak şekilde ifade edin.

- Isı sığası Fermi yüzeyindeki uyarılmış durumlardan gelir ve;

$$C_V = k_B \frac{\pi^2}{6} k_B T D(\varepsilon_F) = \frac{\pi^2}{6} k_B^2 T \frac{3N}{2k_B T_F} = \frac{\pi^2}{4} N k_B \frac{T}{T_F}.$$

(d) (c) şıkkındaki sonucu kullanarak düşük sıcaklıktaki sıvı için parçacık başına düşen entropi s_ℓ 'yi hesaplayın. $T \ll T_F$ için hangi faz (katı ya da sıvı) daha fazla entropiye sahiptir?

- Entropi ısı sığasından aşağıdaki gibi elde edilir;

$$C_V = \frac{TdS}{dT}, \Rightarrow s_\ell = \frac{1}{N} \int_0^T \frac{C_V dT}{T} = \frac{\pi^2}{4} k_B \frac{T}{T_F}.$$

$T \rightarrow 0$ giderken, $s_\ell \rightarrow 0$ 'a gider fakat s_s sonlu kalır. Katının sıvıdan daha fazla entropiye sahip olması alışılmadık bir durumdur! (Sonlu entropinin nedeni nükleer spinlerin bağımsız olarak ele alınmasıdır. Aslında spinler arasında zayıf bir bağlaşım

vardır ki bu da sonlu entropiyi ortadan kaldırarak çok daha düşük sıcaklıklarda manyetik düzenlemeye sebep olur.)

(e) Kimyasal potansiyelleri eşitleyerek ya da başka bir teknikle Clausius-Clapeyron denklemini kanıtlayın: $(dP/dT)_{\text{erime}} = (s_\ell - s_s)/(v_\ell - v_s)$, burada v_ℓ ve v_s sırasıyla sıvı ve katı fazlarda parçacık başına düşen hacimlerdir.

- Faz sınırında kimyasal potansiyeller eşitlenerek Clausius-Clapeyron denklemi elde edilebilir;

$$\mu_\ell(T, P) = \mu_s(T, P), \quad \text{ve} \quad \mu_\ell(T + \Delta T, P + \Delta P) = \mu_s(T + \Delta T, P + \Delta P).$$

İkinci denklemi açarak ve termodinamik tanımları kullanarak;

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = S, \quad \text{ve} \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = -V,$$

olur bu da

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\text{erime}} = \frac{s_\ell - s_s}{v_\ell - v_s}.$$

(f) Atom başına $v_\ell - v_s = 3 \text{ \AA}^3$ olduğu deneysel olarak bulunmuştur. Bu bilgiyi ve önceki şıklarda elde edilen sonuçları kullanarak $T \ll T_F$ için $(dP/dT)_{\text{erime}}$ 'yi yaklaşık olarak bulunuz.

- Katının sıvıdan daha fazla entropiye sahip olması faz sınırındaki negatif eğime neden olur ve bu da Clausius-Clapeyron denkleminde hesaplanabilir.

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\text{erime}} = \frac{s_\ell - s_s}{v_\ell - v_s} \approx k_B \frac{\frac{\pi^2}{4} \left(\frac{T}{T_F}\right) - \ln 2}{v_\ell - v_s}.$$

$T = 0.1^\circ K$, $T_F = 9.2^\circ K$, ve $v_\ell - v_s = 3$ değerlerini kullanarak;

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\text{erime}} \approx -27 \times 10^6 \text{ Pa}^\circ K^{-1},$$

bulunur ki bu da gözlemlerle mantıklı bir uyum içindedir.

2. Etkileşmeyen bozonlar: Kimyasal potansiyeli μ olan etkileşmeyen bozonların bir büyük kanonik topluluğunu düşünün. Tek parçacık durumları, bir $\vec{q}$ dalga vektörü ile etiketlenmiştir ve $\mathcal{E}(\vec{q})$ enerjileri vardır.

(a) Tek parçacık durumlarının bir $\{n_{\vec{q}}\}$ doluluk sayıları kümesini bulmanın birleşik olasılığı $P(\{n_{\vec{q}}\})$, fugasiteler $z_{\vec{q}} \equiv \exp[\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{q}))]$ cinsinden nedir?

- Kimyasal potansiyeli μ olan büyük kanonik toplulukta $\mathcal{E}(\vec{q})$ enerjili tek parçacık durumları için doluluk sayılarının bir seti $\{n_{\vec{q}}\}$ 'yi bulmanın birleşik olasılığı normalleştirilmiş Bose dağılımıyla verilir;

$$P(\{n_{\vec{q}}\}) = \prod_{\vec{q}} \{1 - \exp[\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{q}))]\} \exp[\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{q}))n_{\vec{q}}]$$

$$= \prod_{\vec{q}} (1 - z_{\vec{q}}) z_{\vec{q}}^{n_{\vec{q}}}, \quad \text{burada } n_{\vec{q}} = 0, 1, 2, \dots, \quad \text{her bir } \vec{q}.$$

(b) Belli bir $\vec{q}$ için, karakteristik fonksiyon $\langle \exp[ikn_{\vec{q}}] \rangle$ 'u hesaplayınız.

- $(z_{\vec{q}} e^{ik})^{n_{\vec{q}}}$ biçiminde büyüyen terimleri olan geometrik serinin toplanmasıyla;

$$\langle \exp[ikn_{\vec{q}}] \rangle = \frac{1 - \exp[\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{q}))]}{1 - \exp[\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{q})) + ik]} = \frac{1 - z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}} e^{ik}}.$$

(c) (b) şıkkının sonucunu kullanarak veya başka türlü, doluluk sayısı $n_{\vec{q}}$ 'nin ortalama değer ve varyansının ifadelerini veriniz.

- Kümülanlar, karakteristik fonksiyonun logaritmasının k 'nın kuvvetleri cinsinden açılmasıyla türetilir. $\ln(1+x)$ açılım formülüyle

$$\begin{aligned} \ln \langle \exp[ikn_{\vec{q}}] \rangle &= \ln(1 - z_{\vec{q}}) - \ln[1 - z_{\vec{q}}(1 + ik - k^2/2 + \dots)] \\ &= -\ln \left[1 - ik \frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}} + \frac{k^2}{2} \frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}} + \dots \right] \\ &= ik \frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}} - \frac{k^2}{2} \left[\frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}} + \left(\frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}} \right)^2 \right] + \dots \\ &= ik \frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}} - \frac{k^2}{2} \frac{z_{\vec{q}}}{(1 - z_{\vec{q}})^2} + \dots \end{aligned}$$

elde edilir. Açılımdaki katsayılardan ortalama ve varyans değerlerini alabiliriz;

$$\langle n_{\vec{q}} \rangle = \frac{z_{\vec{q}}}{1 - z_{\vec{q}}}, \quad \text{burada} \quad \langle n_{\vec{q}}^2 \rangle_c = \frac{z_{\vec{q}}}{(1 - z_{\vec{q}})^2}.$$

(d) (c) şıkkındaki varyansı ortalama doluluk sayısı $\langle n_{\vec{q}} \rangle$ cinsinden ifade ediniz.

- $n_{\vec{q}}$ 'yu $z_{\vec{q}}$ 'ya bağlayan bağıntıyı tersine çevirirsek;

$$z_{\vec{q}} = \frac{\langle n_{\vec{q}} \rangle}{1 + \langle n_{\vec{q}} \rangle}.$$

Varyansı veren ifadede bunu yerine koyduğumuzda;

$$\langle n_{\vec{q}}^2 \rangle_c = \frac{z_{\vec{q}}}{(1 - z_{\vec{q}})^2} = \langle n_{\vec{q}} \rangle (1 + \langle n_{\vec{q}} \rangle).$$

(e) (a) şıkkındaki yanıtınızı $\{n_{\vec{q}}\}$ doluluk sayıları cinsinden ifade ediniz.

- $z_{\vec{q}}$ ve $n_{\vec{q}}$ arasındaki ilişki kullanılarak birleşik olasılık aşağıdaki gibi tekrar düzenlenebilir;

$$P(\{n_{\vec{q}}\}) = \prod_{\vec{q}} \left[(\langle n_{\vec{q}} \rangle)^{n_{\vec{q}}} (1 + \langle n_{\vec{q}} \rangle)^{-1-n_{\vec{q}}} \right].$$

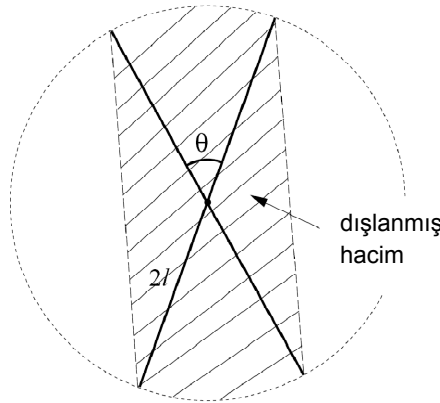
(f) Bozonların olasılık dağılımının entropisini $\{\langle n_{\vec{q}} \rangle\}$ cinsinden hesaplayınız ve sıfır sıcaklık limiti üzerine yorum yapınız.

- Oldukça genel olarak bir P olasılık dağılımının entropisi $S = -k_B \langle \ln P \rangle$ olarak verilir. Farklı tek parçacık durumlarının doluluk sayıları bağımsız olduğundan, ilgili entropiler toplanabilir;

$$S = -k_B \sum_{\vec{q}} [\langle n_{\vec{q}} \rangle \ln \langle n_{\vec{q}} \rangle - (1 + \langle n_{\vec{q}} \rangle) \ln (1 + \langle n_{\vec{q}} \rangle)].$$

Sıfır sıcaklık limitinde bütün doluluk sayıları ya 0 (uyarılmış durumlar) ya da sonsuzdur (taban durumlar). Her iki durumda da entropiye katkı sıfırdır ve dolayısıyla $T = 0$ 'da, sistem sıfır entropiye sahiptir.

3. Sert çubuklar. İki boyutta, N tane asimetrik molekül topluluğu, herbirinin uzunluğu $2l$ olan ve bir düzlemde uzanan çubuklardan oluşan bir gaz gibi modellenenebilir. Başka bir çubukla karşılaşmadıkça, bir çubuk kütle merkezinin ötelenmesiyle ve eksen etrafında dönüşüyle hareket edebilir. Sert çekirdek etkileşmesini tam olarak uygulamadan, çubukların dönел hareketinin bir θ açısıyla kısıtlandığını (diğer çubuklar tarafından) varsayarak yaklaşık olarak bu etkileşmeyi hesaba katabiliriz. Bu kısıtlama bir dışlanan hacim $\Omega(\theta)$ getirir (her bir çubuk için). Daha sonra θ 'nın değeri, V toplam ulaşılabilir alan olmak üzere, belli bir $n = N/V$ yoğunluğunda entropiyi maksimize ederek öztutarlı olarak hesaplanır.



(a) Böyle bir çubuklar topluluğunun entropisini, N , n , Ω , ve *tek* bir çubuğun dönel serbestliğiyle ilgili faz uzayı hacmi $A(\theta)$ cinsinden yazınız. (Momentumdan gelen katkıları tamamen göz ardı edebilir ve büyük N limitini alabilirsiniz.)

- Öteleme ve dönme entropilerinin birlikte hesaba katılmasıyla

$$S = k_B \ln \left[\frac{1}{N!} \left(V - \frac{N\Omega(\theta)}{2} \right)^N A(\theta)^N \right] \approx N k_B \left[\ln \left(n^{-1} - \frac{\Omega(\theta)}{2} \right) + 1 + \ln A(\theta) \right].$$

(b) θ 'nın fonksiyonu olarak entropinin uç değerlerini bulup, yoğunluğu, Ω , A ve onların türevleri olan Ω' , A' ile ilişkilendiriniz; sonucunuzu $n = f(\Omega, A, \Omega', A')$ biçiminde ifade ediniz.

- Uç değer şartı $\partial S / \partial \theta = 0$ 'nın eşdeğeri;

$$\frac{\Omega'}{2n^{-1} - \Omega} = \frac{A'}{A},$$

dir, burada üsler θ 'ya göre türevi gösterir. Yoğunluk için çözüldüğünde;

$$n = \frac{2A'}{\Omega A' + \Omega' A}.$$

(c) Dışlanmış hacim Ω 'yı θ cinsinden ifade ediniz ve $A \propto \theta$ varsayarak $\theta \in [0, \pi]$ 'nin bir fonksiyonu olarak f 'yi çiziniz.

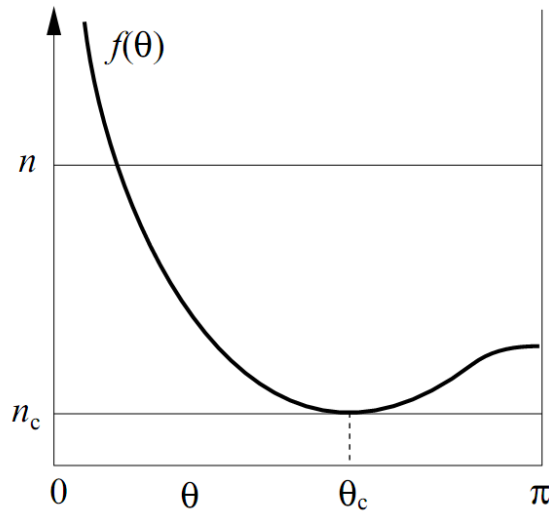
- Temel geometriden

$$\Omega = l^2 (\theta + \sin \theta),$$

bunun sonucunda denge şartı;

$$n = f(\theta) = \frac{2}{l^2} [\theta (2 + \cos \theta) + \sin \theta]^{-1},$$

aşağıda çizilen $f(\theta)$ 'yi içerir:



(d) Yüksek yoğunluklardaki denge durumunu tanımlayınız. Yoğunluk azalırken bir faz geçişi tanımlayabilir misiniz? Çiziminizde ilgili n_c kritik yoğunluğunu gösteriniz. Faz geçişindeki kritik açı θ_c nedir? θ_c 'yi açıkça hesaplamanız gerekmemektedir, ancak onu tanımlayan (kapalı) bir bağıntı veriniz. θ , $n < n_c$ 'de hangi değeri alır?

- Yüksek yoğunluklarda, $\theta \ll 1$ 'dir ve denge koşulu şuna indirgenir

$$N \approx \frac{V}{2\theta l^2};$$

θ açısı “sıkı dizilim”in izin verdiği kadar geniştir. θ 'nın denge değeri yoğunluğun azalmasıyla beraber n_c 'deki optimum değeri θ_c olana kadar artar, ve $\theta(n < n_c) = \theta_c$. Geçiş $f(\theta)$ 'nin minimum değerinde gerçekleşir, dolayısıyla θ_c şunu sağlar;

$$\frac{d}{d\theta} [\theta (2 + \cos \theta) + \sin \theta] = 0,$$

yani;

$$2(1 + \cos \theta_c) = \theta_c \sin \theta_c.$$

Aslında, yukarıdaki argüman, entropideki bir yerel maksimumun kararlılığını (yoğunluk değişimine göre) takip eder, ve bu maksimum noktası θ_c 'de kararsızlaşır. $\theta = \pi$ 'de entropinin başka bir maksimumu mevcuttur ki bu serbest dönen çubuklara karşılık gelir; bu durum θ_c 'nin az altında bir yoğunlukta daha avantajlı bir hale gelir (yani genel denge durumu olur).

1. *Helyum 4*: ^4He düşük sıcaklıklarda, basınç uygulayarak sıvıdan katıya dönüştürülebilir. Faz sınırının ilginç bir özelliği, erime basıncının $T = 0\text{K}$ 'deki değerinden, 20Nm^{-2} kadar hafifçe düşerek $T = 0.8\text{K}$ 'de minimum değer almasıdır. Bu özelliği açıklamak için ^4He 'ün sıvı ve katı fazlarının basit bir modelini kullanacağız.

(a) Kimyasal potansiyeller eşitlenerek ya da herhangi bir teknikle, Clausius-Clapeyron denklemini, $(dP/dT)_{\text{erime}} = (s_\ell - s_s)/(v_\ell - v_s)$, kanıtlayınız. Burada (v_ℓ, s_ℓ) ve (v_s, s_s) sırasıyla sıvı ve katı fazlardaki atom başına düşen hacim ve entropilerdir.

• *Clausius-Clapeyron denklemi* faz sınırında kimyasal potansiyellerin eşitlenmesiyle elde edilebilir;

$$\mu_\ell(T, P) = \mu_s(T, P), \quad \text{ve} \quad \mu_\ell(T + \Delta T, P + \Delta P) = \mu_s(T + \Delta T, P + \Delta P).$$

İkinci denklemi açarak ve termodinamik tanımları kullanarak

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = S, \quad \text{and} \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = -V,$$

sonuçta şunu elde ederiz,

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\text{erime}} = \frac{s_\ell - s_s}{v_\ell - v_s}.$$

(b) Sıvı ^4He 'da $T < 1\text{K}$ için önemli olan uyarımlar c hızındaki fononlardır. Bu modların sıvının parçacık başına düşen ısı sığası C_V^ℓ/N 'ye katkısını hesaplayınız.

• Sıvı ^4He 'da $T < 1\text{K}$ için önemli olan uyarımlar c hızındaki fononlardır. İlgili dağılım ilişkisi $\varepsilon(k) = \hbar ck$ 'dir. $\vec{k}$ modundaki fononların ortalama sayısı $\langle n(\vec{k}) \rangle = [\exp(\beta \hbar ck) - 1]^{-1}$ kullanılarak, net uyarılma enerjisi elde edilir,

$$\begin{aligned} E_{\text{fonon}} &= \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar ck}{\exp(\beta \hbar ck) - 1} \\ &= V \times \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{\hbar ck}{\exp(\beta \hbar ck) - 1} \end{aligned}$$

($x = \beta \hbar ck$ değişken dönüşümüyle)

$$= \frac{V}{2\pi^2} \hbar c \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^4 \frac{6}{3!} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{30} V \hbar c \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^4,$$

burada şunu kullandık,

$$\zeta_4 \equiv \frac{1}{3!} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{90}.$$

İlgili ısı sığası aşağıdaki şekilde elde edilir;

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{2\pi^2}{15} V k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3,$$

böylece, sıvıdaki parçacık başına düşen ısı sığası;

$$\frac{C_V^\ell}{N} = \frac{2\pi^2}{15} k_B v_\ell \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3.$$

(c) Katı ^4He 'da düşük sıcaklıkta parçacık başına ısı sığası C_V^s/N 'yi, boyuna ve enine ses hızları c_L ve c_T cinsinden hesaplayınız.

- Katının temel uyarımları da fononlardır ama bu sefer c_T hızında *iki* enine mod ve c_L hızında *bir* boylamsal mod vardır. Bu modların katkısı toplanır ve herbiri yukardaki gibi hesaplanan sıvı sonucuna benzer katkı yapar, bu da katı ısı sığasını aşağıdaki gibi verir;

$$\frac{C_V^s}{N} = \frac{2\pi^2}{15} k_B v_s \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \left(\frac{2}{c_T^3} + \frac{1}{c_L^3} \right).$$

(d) Yukarıdaki sonuçları kullanarak, tek bir ses hızı $c \approx c_L \approx c_T$, parçacık başına yaklaşık eşit hacimler $v_\ell \approx v_s \approx v$ varsayımlarıyla, entropi farkı $(s_\ell - s_s)$ 'yi hesaplayınız. Hangi faz (katı veya sıvı) daha yüksek entropiye sahiptir?

- Entropiler ısı sığalarından aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$s_\ell(T) = \int_0^T \frac{C_V^\ell(T') dT'}{T'} = \frac{2\pi^2}{45} k_B v_\ell \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3,$$

$$s_s(T) = \int_0^T \frac{C_V^s(T') dT'}{T'} = \frac{2\pi^2}{45} k_B v_s \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \left(\frac{2}{c_T^3} + \frac{1}{c_L^3} \right).$$

Yaklaşık eşit ses hızları $c \approx c_L \approx c_T \approx 300 \text{ m s}^{-1}$ ve özgül hacimler $v_\ell \approx v_s \approx v = 46 \text{ Å}^3$ varsayarak, entropi farkını aşağıdaki gibi buluruz;

$$s_\ell - s_s \approx -\frac{4\pi^2}{45} k_B v \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3.$$

Katı faz sıvı fazdan daha fazla entropiye sahiptir çünkü katı modda iki tane daha fazla fonon uyarılma bandı mevcuttur.

(e) Küçük bir hacim farkı $\delta v = v_\ell - v_s$ olduğunu varsayarak (sıcaklıktan bağımsız), erime eğrisinin biçimini hesaplayınız. Başta belirtilen anomaliyi açıklamak için hangi fazın (katı veya sıvı) yoğunluğu daha yüksek olmalıdır?

- Clausius-Clapeyron denklemini kullanarak ve yukarıdaki entropi farkı hesabından

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\text{erime}} = \frac{s_\ell - s_s}{v_\ell - v_s} = -\frac{4\pi^2}{45} k_B \frac{v}{\delta v} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3.$$

Yukarıdaki denklemin integralinin alınmasıyla erime eğrisi aşağıdaki gibi bulunur;

$$P_{\text{eri}}(T) = P(0) - \frac{\pi^2}{45} k_B \frac{v}{\delta v} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 T.$$

Basıncıdaki düşmeyi açıklamak için $\delta v = v_\ell - v_s > 0$ olması gerekir, yani katı hal beklendiği gibi daha yüksek yoğunluğa sahiptir.

2. Sürfaktan yoğunlaşması: N tane sürfaktan molekülü, bir A alanı içinde su yüzeyine eklenir. İlgili Hamiltonyen şöyledir,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{V}(\vec{r}_i - \vec{r}_j),$$

burada $\vec{r}_i$ ve $\vec{p}_i$, parçacık i 'nin konum ve momentumunu belirten iki boyutlu vektörlerdir.

(a) $Z(N, T, A)$ üleşim fonksiyonunun ifadesini $\vec{r}_i$ ve $\vec{p}_i$ üzerinden integrallerle yazınız ve momentumlar üzerinden olan integralleri alınız.

• Boltzmann ağırlığının faz uzayı üzerinden integrali alınarak üleşim fonksiyonu aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$Z(N, T, A) = \int \frac{\prod_{i=1}^N d^2 \vec{p}_i d^2 \vec{q}_i}{N! h^{2N}} \exp \left[-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} - \beta \sum_{i < j} \mathcal{V}(\vec{q}_i - \vec{q}_j) \right],$$

burada $\beta = 1/(k_B T)$ dir. Moment üzerinden integraller basit Gauss integralleridir ve;

$$Z(N, T, A) = \frac{1}{N!} \frac{1}{\lambda^{2N}} \int \prod_{i=1}^N d^2 \vec{q}_i \exp \left[-\beta \sum_{i < j} \mathcal{V}(\vec{q}_i - \vec{q}_j) \right],$$

burada da $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ termal dalga boyunu temsil etmektedir.

Parçacıklar arası potansiyel $\mathcal{V}(\vec{r})$, $|\vec{r}| < a$ için sonsuz, ve $|\vec{r}| > a$ için $\int_a^\infty 2\pi r dr \mathcal{V}(r) = -u_0$ olmak üzere çekicidir.

(b) N tane parçacık sisteminin konumsal faz uzayında mevcut, toplam dışlanmamış alanı tahmin ediniz

• Dışlanmış alanı olan parçacıkların ortak faz uzayını tahmin etmek için sisteme birer birer ekleyelim. İlki bütün A alanını işgal edebilirken ikinci sadece $A - \Omega$ alanını kullanabilir, ki burada $\Omega = \pi a^2$ 'dir. Üç parçacık etkilerini ihmal ederek (yani seyreltik

limitte), üçüncü parçacığa düşebilecek alan $(A - 2\Omega)$ olur ve n inci parçacık için benzer şekilde $(A - n\Omega)$ alanı olur. Bu seyreltik limitte toplam dışlanmış hacim şöyledir;

$$A(A - \Omega)(A - 2\Omega) \cdots (A - (N - 1)\Omega) \approx (A - N\Omega/2)^N,$$

yukarıdaki son yaklaşıklık m ve $(N - m)$ terimlerinin eşleştirilmesi ve çarpımlarına Ω^2 mertebesindeki katkıların ihmalıyla elde edilmiştir.

(c) *Tekdüze yoğunluk yaklaşımı* $n = N/A$ çerçevesinde, sistemin toplam *potansiyel* enerjisini tahmin ediniz. Bu potansiyel enerjiyi, önceki şıkta izin verilen tüm konfigürasyonlar için kullanarak Z için yaklaşık bir ifade yazınız.

• *Tekdüze yoğunluk*, $n = N/A$, varsayımıyla, ortalama bir çekici potansiyel $\bar{U}$ aşağıdaki gibi tahmin edilebilir

$$\begin{aligned} \bar{U} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathcal{V}_{\text{attr.}}(\vec{q}_i - \vec{q}_j) = \frac{1}{2} \int d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 n(\vec{r}_1) n(\vec{r}_2) \mathcal{V}_{\text{attr.}}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ &\approx \frac{n^2}{2} A \int d^2\vec{r} \mathcal{V}_{\text{attr.}}(\vec{r}) \equiv -\frac{N^2}{2A} u_0. \end{aligned}$$

Önceki sonuçları biraraya getirerek;

$$Z(N, T, A) \approx \frac{1}{N!} \frac{1}{\lambda^{2N}} (A - N\Omega/2)^N \exp \left[\frac{\beta u_0 N^2}{2A} \right].$$

(d) Suyun sürfaktansız yüzey gerilimi σ_0 'dur, ve yaklaşık olarak sıcaklıktan bağımsızdır. Sürfaktanların varlığında yüzey gerilimi $\sigma(n, T)$ 'yi hesaplayınız.

• Yüzey alanını değiştirerek yapılan iş $dW = \sigma dA$ olduğundan $dF = -TdS + \sigma dA + \mu dN$ olur. Burada $F = -k_B T \ln Z$ serbest enerjidir. Sürfaktanların filmin yüzey gerilimine katkısı

$$\sigma_s = - \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial A} \right|_{T,N} = - \frac{Nk_B T}{A - N\Omega/2} + \frac{u_0 N^2}{2A^2},$$

ki bu da van der Waals denkleminin iki boyutlu benzeridir. Sürfaktanların yokluğundaki (sabit) katkısı ekleyerek

$$\sigma(n, T) = \sigma_0 - \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial A} \right|_{T,N} = - \frac{Nk_B T}{A - N\Omega/2} + \frac{u_0 N^2}{2A^2}.$$

(e) Belli bir T_c sıcaklığının altında σ ifadesinin açıkça yanlış olduğunu gösterin. Sizce düşük sıcaklıklarda ne olmaktadır?

• Termodinamik kararlılık $\delta\sigma\delta A \geq 0$ olmasını gerektirir, yani her sıcaklıkta σ A 'nın monotonik olarak artan bir fonksiyonu olmalıdır. σ_s denkleminin ilk teriminin baskın

olduğu yüksek sıcaklıklarda durum budur, fakat bu düşük sıcaklıklarda çekici etkileşimlerden gelen terimin önemli olmaya başlamasıyla bozulur. Kritik sıcaklık her zamanki gibi $\partial\sigma_s/\partial A = \partial^2\sigma_s/\partial A^2 = 0$ koşullarıyla elde edilir;

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial\sigma_s}{\partial A} \right|_T = \frac{Nk_B T}{(A - N\Omega/2)^2} - \frac{u_0 N^2}{A^3} = 0 \\ \left. \frac{\partial^2\sigma_s}{\partial A^2} \right|_T = -\frac{2Nk_B T}{(A - N\Omega/2)^3} + \frac{3u_0 N^2}{A^4} = 0 \end{cases},$$

İki denklemin tutarlı çözümleri $A_c = 3N\Omega/2$ ve

$$T_c = \frac{8u_0}{27k_B\Omega}.$$

sıcaklığını verir. Van der Waals gazında olduğu gibi T_c 'den düşük sıcaklıklarda sürfaktanlar bir yüksek yoğunluklu (sıvı) ve bir düşük yoğunluklu (gaz) faza ayrışırlar.

(f) C_A ısı sığasını hesaplayınız ve açıkça hesaplamadan sürfaktanlardan kaynaklı C_σ için bir ifade yazınız.

- Sürfaktanların filmin enerjisine katkısı aşağıdaki gibi verilir;

$$E_s = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = 2N \times \frac{k_B T}{2} - \frac{u_0 N^2}{2A}.$$

Birinci terim sürfaktanların kinetik enerjisinden ve ikinci terim ise (ortalama alan) çekimlerindenidir. Buradan ısı sığaları aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$C_A = \left. \frac{dQ}{dT} \right|_A = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_A = Nk_B,$$

ve

$$C_\sigma = \left. \frac{dQ}{dT} \right|_\sigma = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_\sigma - \sigma \left. \frac{\partial A}{\partial T} \right|_\sigma.$$

3. Dirac Fermiyonları 1/2 spinli, etkileşmeyen parçacıklardır. Tek parçacık durumları, spinden bağımsız, pozitif ve negatif enerjilerin çiftleri halindedir;

$$\mathcal{E}_\pm(\vec{k}) = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2},$$

(a) μ kimyasal potansiyelli *herhangi* bir fermiyonik sistem için, $\mu + \delta$ enerjili dolu bir durumu bulma olasılığının $\mu - \delta$ enerjili boş bir durumu bulma olasılığıyla aynı olduğunu gösteriniz. (δ herhangi bir sabit enerjidir.)

- Fermi istatistiğine göre $\mathcal{E}$ enerjili bir durumun dolu olma olasılığı;

$$p[n(\mathcal{E})] = \frac{e^{\beta(\mu - \mathcal{E})n}}{1 + e^{\beta(\mu - \mathcal{E})}},$$

burada $n = 0, 1$ olabilir. $\mu + \delta$ enerjili bir durum için

$$p[n(\mu + \delta)] = \frac{e^{\beta\delta n}}{1 + e^{\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu + \delta) = 1] = \frac{e^{\beta\delta}}{1 + e^{\beta\delta}} = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}}.$$

Benzer şekilde $\mu - \delta$ enerjili durum için,

$$p[n(\mu - \delta)] = \frac{e^{-\beta\delta n}}{1 + e^{-\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu - \delta) = 0] = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}} = p[n(\mu + \delta) = 1],$$

buradan da $\mu + \delta$ enerjili dolu bir durumu bulma olasılığı ile $\mu - \delta$ enerjili boş bir durumu bulma olasılığının aynı olduğu görülür.

(b) Sıfır sıcaklıkta bütün negatif enerjili Dirac durumları dolu ve bütün pozitif enerjili olanlar boştur, yani $\mu(T = 0) = 0$. (a) şıkkındaki sonucu kullanarak sonlu bir T sıcaklığında kimyasal potansiyeli hesaplayınız.

- Yukarıdaki sonuç, $\mu = 0$ için $\langle n(\mathcal{E}) \rangle + \langle n - \mathcal{E} \rangle$ değerinin herhangi bir sıcaklık için değişmez kaldığını vurgular; bu da dolu bir negatif enerjili seviyesinden ayrılan bir parçacacığın ilgili pozitif enerjili boş duruma gideceğini gösterir. Bütün bu enerjilerin toplanmasıyla eğer μ sıfır kalırsa parçacık sayısının değişmeyeceği görülür. Bundan dolayı parçacık-boşluk simetrisi $\mu(T) = 0$ olmasını gerektirir.

(c) Sonlu sıcaklıklarda sistemin ortalama uyarılma enerjisinin aşağıdaki denklemi sağladığını gösteriniz;

$$E(T) - E(0) = 4V \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta\mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1}.$$

- $+$ ($-$) işaretlerini pozitif (negatif) enerji durumları için kullanılarak, uyarılma enerjisi aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= \sum_{k, s_z} [\langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) + (1 - \langle n_-(k) \rangle) \mathcal{E}_-(k)] \\ &= 2 \sum_k \langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) = 4V \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta\mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1}. \end{aligned}$$

(d) (c) şıkkındaki integrali *kütleless Dirac parçacıkları* için hesaplayınız (yani $m = 0$).

- $m = 0$ için $\mathcal{E}_+(k) = \hbar c|k|$ olur ve

$$\begin{aligned}
 E(T) - E(0) &= 4V \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{8\pi^3} \frac{\hbar ck}{e^{\beta \hbar ck} + 1} = & (\beta \hbar ck = x) \\
 &= \frac{2V}{\pi^2} k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3 \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x + 1} \\
 &= \frac{7\pi^2}{60} V k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3.
 \end{aligned}$$

Son ifadede için gerekli integral, 3! 'dir ve bunun içinde değeri kullanıldı.

(e) Kütlesiz Dirac parçacıkları için ısı sığası 'yi hesaplayınız.

- Isı sığası aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$C_V = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_V = \frac{7\pi^2}{15} V k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3.$$

(f) Parçacıkların kütleli olması durumunda düşük sıcaklıklarda ısı sığasının nitel bağımlılığını ifade ediniz.

- olduğunda dolu ve boş durumlar arasında bir aralık olur ve bu yüzden üstel olarak aktif olan bir enerji ve ısı kapasitesi bekleriz. Düşük enerjili uyarımlar için,

$$\mathcal{E}_+(k) \approx mc^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \dots,$$

ve bundan dolayı da

$$\begin{aligned}
 E(T) - E(0) &\approx \frac{2V}{\pi^2} mc^2 e^{-\beta mc^2} \frac{4\pi\sqrt{\pi}}{\lambda^3} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} \\
 &= \frac{48}{\sqrt{\pi}} \frac{V}{\lambda^3} mc^2 e^{-\beta mc^2}.
 \end{aligned}$$

olur. Buna karşılık gelen ısı sığası da aşağıdaki gibi davranır;

$$C(T) \propto k_B \frac{V}{\lambda^3} (\beta mc^2)^2 e^{-\beta mc^2}.$$

1. *Nötron yıldızının çekirdeği*: Profesör Rajagopal'ın grubu nötron yıldızlarının çekirdeğinde QCD maddesinin yeni bir fazının olabileceğini önerdi. Bu faz, düşük enerjili uyarımları yaklaşık aşağıdaki gibi olan, bir kuark yoğunluğu gibi görülebilir,

$$\mathcal{E}(\vec{k})_{\pm} = \pm \hbar^2 \frac{(|\vec{k}| - k_F)^2}{2M}.$$

Spinden gelen yozlaşma çarpanı $g = 2$ olmak üzere, bu uyarımlar fermiyoniktir.

(a) Sıfır derecede bütün negatif enerjili durumlar dolu ve bütün pozitif enerjili durumlar boştur yani $\mu(T = 0) = 0$ olur. $\mu + \delta$ ve $\mu - \delta$ enerjili durumların doluluk sayılarını ilişkilendirerek, ya da farklı bir yoldan, sonlu bir T sıcaklığındaki kimyasal potansiyeli bulunuz.

- Fermi istatistiğine göre $\mathcal{E}$ enerjili bir durumun dolu olma olasılığı

$$p[n(\mathcal{E})] = \frac{e^{\beta(\mu - \mathcal{E})n}}{1 + e^{\beta(\mu - \mathcal{E})}}, \quad n = 0, 1.$$

$\mu + \delta$ enerjili bir durum için,

$$p[n(\mu + \delta)] = \frac{e^{\beta\delta n}}{1 + e^{\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu + \delta) = 1] = \frac{e^{\beta\delta}}{1 + e^{\beta\delta}} = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}}.$$

Benzer şekilde $\mu - \delta$ enerjili bir durum için de

$$p[n(\mu - \delta)] = \frac{e^{-\beta\delta n}}{1 + e^{-\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu - \delta) = 0] = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}} = p[n(\mu + \delta) = 1],$$

yani $\mu + \delta$ enerjili dolu bir durumu bulma olasılığı ile $\mu - \delta$ enerjili boş bir durumu bulma olasılığı aynıdır. Bu, $\mu = 0$ için, $\langle n(\mathcal{E}) \rangle + \langle n(-\mathcal{E}) \rangle$ ifadesinin herhangi bir sıcaklık için değişmez kalmasını gerektirir; dolu negatif enerjili bir durumdan ayrılan her parçacık için, ilgili pozitif enerjili boş duruma bir parçacık geçer. Bütün bu enerjileri toplayarak, μ sıfır olarak kalırsa toplam parçacık sayısının değişmeyeceği sonucuna varırız. Dolayısıyla, parçacık-boşluk simetresi, $\mu(T) = 0$ olmasını zorunlu kılar.

(b) $k = k_F$ civarında sabit bir durum yoğunluğu varsayarak yani $q = |\vec{k}| - k_F$ olmak üzere $d^3k \approx 4\pi k_F^2 dq$ alarak, sonlu sıcaklıkta bu sistemin ortalama uyarım enerjisinin şöyle olduğunu gösteriniz:

$$E(T) - E(0) \approx 2gV \frac{k_F^2}{\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{\mathcal{E}_+(q)}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(q)) + 1} \quad .$$

- $+$ ($-$) işaretlerini pozitif (negatif) enerji durumları için kullanarak uyarım enerjisi;

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= \sum_{k,s} [\langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) + (1 - \langle n_-(k) \rangle) \mathcal{E}_-(k)] \\ &= g \sum_k 2 \langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) = 2gV \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1} . \end{aligned}$$

İntegrale en büyük katkı $|\vec{k}| \approx k_F$ olduğunda gelir, ve $q = (|\vec{k}| - k_F)$ olarak ve $d^3 k \approx 4\pi k_F^2 dq$ kullanarak şunu buluruz,

$$E(T) - E(0) \approx 2gV \frac{4\pi k_F^2}{8\pi^3} 2 \int_0^\infty dq \frac{\mathcal{E}_+(q)}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(q)) + 1} = 2gV \frac{k_F^2}{\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{\mathcal{E}_+(q)}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(q)) + 1} \quad .$$

(c) Yukarıdaki integrali hesaplayarak, uyarım enerjisi için kapalı biçimde bir yanıt veriniz.

- $\mathcal{E}_+(q) = \hbar^2 q^2 / (2M)$ olduğu için,

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= 2gV \frac{k_F^2}{\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{\hbar^2 q^2 / 2M}{e^{\beta \hbar^2 q^2 / 2M} + 1} = \quad (\beta \hbar^2 q^2 / 2M = x) \\ &= \frac{gV k_F^2}{\pi^2} k_B T \left(\frac{2M k_B T}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x + 1} \\ &= \frac{gV k_F^2}{\pi^2} k_B T \left(\frac{2M k_B T}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \zeta_{3/2} = \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{\zeta_{3/2}}{\pi} \frac{V k_F^2}{\lambda} k_B T . \end{aligned}$$

Son ifade de $f_m^-(1)$ 'in değerini ve termal dalgaboyu $\lambda = h / \sqrt{2\pi M k_B T}$ 'yi kullandık.

(d) Bu sistemin ısı sığası C_V 'yi hesaplayınız ve düşük sıcaklıktaki davranışını yorumlayınız.

- $E \propto T^{3/2}$ olduğundan,

$$C_V = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_V = \frac{3}{2} \frac{E}{T} = \frac{3\zeta_{3/2}}{2\pi} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \frac{V k_F^2}{\lambda} k_B \propto \sqrt{T} .$$

Bu, tek boyutlu bir bozon sisteminin davranışına benzemektedir. ($d = 1$ için olduğu gibi, durum yoğunluğu q 'ya göre sabit). Elbette, herhangi bir fermiyonik sistem için Fermi yüzeyine yakın durumların yoğunluğu bu özelliktedir. Normal Fermi sistemlerinden farkı ise Fermi yüzeyinin üzerindeki uyarımların kuadratik doğasıdır.

2. *Kritik nokta davranışı*: Bir gazın basıncı P , yoğunluğu $n = N/V$ ve sıcaklık T 'ye şu kesilmiş açılımla bağlıdır,

$$P = k_B T n - \frac{b}{2} n^2 + \frac{c}{6} n^3 ,$$

burada b ve c 'nin *pozitif*, sıcaklıktan bağımsız sabitler oldukları varsayılmıştır.

(a) Bu denklemin daha düşük değerlerde geçersiz olmasının gerektiği T_c kritik sıcaklığını ve kritik noktanın ona karşılık gelen n_c yoğunluğu ve P_c basıncını belirleyiniz. Böylece $k_B T_c n_c / P_c$ oranını bulunuz.

- Gazın mekanik kararlılığı, hacimdeki kendiliğinden değişimlerin basınçtaki bir değişimle dengelenmesini gerektirir. Bu $\delta P \delta V < 0$ 'a karşılık gelir ve $\delta n = -(N/V^2) \delta V$ olduğundan herhangi bir durum denkleminde basınç, yoğunluğun artan bir fonksiyonu olmalıdır. n 'nin tekdüze olarak artan fonksiyonu olan eşıl basınç eğrileri ile bu koşulu sağlamayan (yani açıkça yanlış) eğriler arasındaki geçiş noktası $dP/dn = 0$ ve $d^2P/dn^2 = 0$ koşullarından elde edilir. Kübik durum denkleminden başlayarak aşağıdakileri elde ederiz;

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dn} &= k_B T_c - b n_c + \frac{c}{2} n_c^2 = 0 \\ \frac{d^2P}{dn^2} &= -b + c n_c = 0 \end{aligned}$$

İkinci denklemden $n_c = b/c$ elde edilir ki bununda birinci denklemde yerine konmasıyla $k_B T_c = b^2/(2c)$ bulunur. Sonra, durum denkleminde de $P_c = b^3/(6c^2)$ elde edilir ve boyutsuz oran şöyle bulunur:

$$\frac{k_B T_c n_c}{P_c} = 3.$$

(b) Eşıl sıkıştırılabilirlik $\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T$ 'yi hesaplayınız ve $n = n_c$ için T 'nin fonksiyonu olarak çiziniz.

- $V = N/n$ kullanılarak aşağıdakini elde ederiz;

$$\kappa_T(n) = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \Big|_T = \frac{1}{n} \frac{\partial P}{\partial n} \Big|_T^{-1} = [n (k_B T - b n + c n^2/2)]^{-1}.$$

$n = n_c$ için $\kappa_T(n_c) \propto (T - T_c)^{-1}$, ve T_c 'de ıraksar.

(c) Kritik eşıl eğrisinde $(P - P_c)$ için $(n - n_c)$ 'nin bir fonksiyonu olan bir ifade veriniz.

- Yukarıda kritik nokta için hesaplanan koordinatları kullanarak şunu buluruz;

$$\begin{aligned}
 P - P_c &= -\frac{b^3}{6c^2} + \frac{b^2}{2c}n - \frac{b}{2}n^2 + \frac{c}{6}n^3 \\
 &= \frac{c}{6} \left(n^3 - 3\frac{b}{c}n^2 + 3\frac{b^2}{c^2}n - \frac{b^3}{c^3} \right) \\
 &= \frac{c}{6} (n - n_c)^3.
 \end{aligned}$$

(d) $T < T_c$ için eşışıl eğrilerindeki kararsızlıklar, n_+ yoğunluğunda bir sıvı ve n_- yoğunluğunda bir gaz faz bölünmeyle önlenir. T_c 'ye yakın sıcaklıklarda bu yoğunluklar $n_{\pm} \approx n_c(1 \pm \delta)$ biçiminde davranır. Bir Maxwell yapılanması kullanarak, veya başka yoldan, $\delta(T)$ için kesin bir denklem bulunuz, ve $(T_c - T) \rightarrow 0$ için davranışını belirtiniz. (İpucu: Bir eşışıl eğrisi boyunca kimyasal potansiyelin değişimleri $d\mu = dP/n$ 'e uyar.)

• Gibbs-Duhem bağıntısına göre, yoğun değişkenlerin değişimi $SdT - VdP + Nd\mu = 0$ şeklindedir ve dolayısıyla bir eşışıl eğrisi ($dT = 0$) boyunca $d\mu = dP/n = \partial P / \partial n|_T dn/n$ olur. Sıvı ve gaz durumları birlikte var olduklarından aynı kimyasal potansiyele sahip olmalıdırlar. Yukarıdaki ifadelerin $d\mu$ ile n_- 'den n_+ 'ya integralini almak bizi Maxwell yapılanmasına götürür;

$$0 = \mu(n_+) - \mu(n_-) = \int_{n_-}^{n_+} \frac{dP}{n} = \int_{n_c(1-\delta)}^{n_c(1+\delta)} dn \left(\frac{k_B T - bn + cn^2/2}{n} \right).$$

integralleri alarak şu denklemi elde ederiz;

$$0 = k_B T \ln \left(\frac{1+\delta}{1-\delta} \right) - bn_c(2\delta) + \frac{c}{4}n_c^2 [(1+\delta)^2 - (1-\delta)^2] = k_B T \ln \left(\frac{1+\delta}{1-\delta} \right) - 2k_B T_c \delta,$$

burada son ifadeyi bulmak için $n_c = b/c$ ve $k_B T_c = b^2/(2c)$ kullanıldı. δ için aşağıdaki ifade bulunur

$$\delta = \frac{T}{2T_c} \ln \left(\frac{1+\delta}{1-\delta} \right) \approx \frac{T}{T_c} (\delta - \delta^3 + \dots).$$

$(T_c - T) \rightarrow 0$ durumunda kübik terime kadar olan terimleri alarak aşağıdaki bulunur

$$\delta \approx \sqrt{1 - \frac{T_c}{T}}.$$

3. d boyutlu göreceli Bose gazı: Enerjisi $\varepsilon = c|\vec{p}|$ olan, d boyutta $V = L^d$ "hacimli" bir kutuya konmuş, etkileşmeyen (spinsiz) bozonların bir gazını düşünelim.

(a) Büyük potansiyel $\mathcal{G} = -k_B T \ln \mathcal{Q}$ ve yoğunluk $n = N/V$ 'yi bir μ kimyasal potansiyeli için hesaplayınız. Sonucu d ve $f_m^+(z)$ cinsinden ifade ediniz. Burada $z = e^{\beta\mu}$ ve

$$f_m^+(z) = \frac{1}{(m-1)!} \int_0^\infty \frac{x^{m-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx.$$

(İpucu: $\ln Q$ ifadesi için kısmi integral alma yöntemini kullanınız.)

- Üleşim fonksiyonu

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{N\beta\mu} \sum_{\{n_i\}}^{\sum_i n_i = N} \exp \left(-\beta \sum_i n_i \epsilon_i \right), \\ &= \prod_i \sum_{\{n_i\}} e^{\beta(\mu - \epsilon_i)n_i} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_i)}} \end{aligned}$$

buradan, $\ln Q = -\sum_i \ln (1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_i)})$ olur. $S_d = 2\pi^{d/2}/(d/2 - 1)!$ olmak üzere, $\sum_i$ toplamını bir d boyutlu integral $\int_0^\infty V d^d k / (2\pi)^d = [VS_d/(2\pi)^d] \int_0^\infty k^{d-1} dk$ ile değiştirerek, şunu elde ederiz,

$$\ln Q = -\frac{VS_d}{(2\pi)^d} \int_0^\infty k^{d-1} dk \ln (1 - ze^{-\beta \hbar c k}).$$

$x = \beta \hbar c k$ değişken dönüşümüyle,

$$\ln Q = -\frac{VS_d}{(2\pi)^d} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^d \int_0^\infty x^{d-1} dx \ln (1 - ze^{-x}).$$

Son olarak, kısmi integral alımıyla,

$$\ln Q = \frac{VS_d}{(2\pi)^d} \frac{1}{d} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^d \int_0^\infty x^d dx \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = V \frac{S_d}{d} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^d \int_0^\infty dx \frac{x^d}{z^{-1}e^x - 1},$$

olur, buradan da

$$\mathcal{G} = -k_B T \ln Q = -V \frac{S_d}{d} \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^d k_B T d! f_{d+1}^+(z),$$

bulunur ve daha basit şekilde

$$\mathcal{G} = -k_B T \frac{V}{\lambda_c^d} \frac{\pi^{d/2} d!}{(d/2)!} f_{d+1}^+(z),$$

elde edilir, burada $\lambda_c \equiv \hbar c / (k_B T)$ 'dir. Ortalama parçacık sayısı aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$N = -\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mu} = -\beta z \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial z} = \frac{V}{\lambda_c^d} \frac{\pi^{d/2} d!}{(d/2)!} f_d^+(z),$$

ki burada $z \partial f_{d+1}(z) / \partial z = f_d(z)$ 'yi kullandık. İfadenin hacme bölünmesiyle yoğunluk aşağıdaki gibi elde edilir;

$$n = \frac{1}{\lambda_c^d} \frac{\pi^{d/2} d!}{(d/2)!} f_d^+(z).$$

(b) Gaz basıncı P ve enerjisi E 'yi hesaplayın ve $E/(PV)$ oranını klasik değeriyle karşılaştırın.

- $PV = -\mathcal{G}$ 'dir ve

$$E = - \left. \frac{\partial \ln \mathcal{Q}}{\partial \beta} \right|_z = +d \frac{\ln \mathcal{Q}}{\beta} = -d\mathcal{G}.$$

Dolayısıyla, $E/(PV) = d$ olur ve relativistik gazda klasik değeriyle aynıdır.

(c) Geçişin bulunduğu boyutları belirterek, Bose-Einstein yoğuşması için kritik sıcaklık $T_c(n)$ 'yi bulunuz,.

- Kritik sıcaklık $T_c(n)$ aşağıdaki gibi verilir

$$n = \frac{1}{\lambda_c^d} \frac{\pi^{d/2} d!}{(d/2)!} f_d^+(z = 1) = \frac{1}{\lambda_c^d} \frac{\pi^{d/2} d!}{(d/2)!} \zeta_d.$$

Buradan, kritik sıcaklık,

$$T_c = \frac{hc}{k_B} \left(\frac{n(d/2)!}{\pi^{d/2} d! \zeta_d} \right)^{1/d}.$$

Ancak, ζ_d sadece $d > 1$ için sonludur ve bundan dolayı $d > 1$ için geçiş mevcuttur.

(d) $T < T_c(n)$ için ısı sığası $C(T)$ 'nin sıcaklık bağımlılığı nedir?

- $T < T_c$ için $z = 1$ ve $E = -d\mathcal{G} \propto T^{d+1}$ olur, bu da aşağıdaki sonucu verir

$$C(T) = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_{z=1} = (d+1) \frac{E}{T} = -d(d+1) \frac{\mathcal{G}}{T} = d(d+1) \frac{V}{\lambda_c^d} k_B \frac{\pi^{d/2} d!}{(d/2)!} \zeta_{d+1} \propto T^d.$$

(e) Boyutsuz ısı sığası $C(T)/(Nk_B)$ 'yi kritik sıcaklıkta $T = T_c$ 'de hesaplayınız ve klasik (yüksek sıcaklık) limitteki değeriyle karşılaştırınız.

- Yukarıdaki $C(T \leq T_c)$ formülünü daha önceden bulduğumuz $N(T \geq T_c)$ 'ye bölüp, sonucu $T = T_c(z = 1)$ değerinde hesaplırsak şunu elde ederiz,

$$\frac{C(T_c)}{Nk_B} = \frac{d(d+1)\zeta_{d+1}}{\zeta_d}.$$

Kuantum etkilerinin yokluğunda göreceli gazın ısı sığası $C/(Nk_B) = d$ olur, ki bu da kuantum gazın sonsuz sıcaklıktaki limit değeridir.

1. *Grafın* karbon atomlarının tek bir katmanda birbirine bağlandığı *iki boyutlu* altıgen bir örgüdür. Grafitin katman katman soyulmasıyla elde edilebilir. Grafitin bant yapısında tek parçacık uyarımları göreceli Dirac *fermiyonları* gibi davranır ve düşük enerjilerdeki spektrumu yaklaşık olarak aşağıdaki gibi verilir;

$$\mathcal{E}_{\pm}(\vec{k}) = \pm \hbar v \left| \vec{k} \right| .$$

$g = 2$ ile bir spin yozlaşması vardır ve $v \approx 10^6 \text{ ms}^{-1}$ 'dir. Grafitin alışılmadık taşınım özellikleri üzerine yapılan son deneyler *Nature* **438**, 197 (2005)'de rapor edilmiştir. Bu problemde bu malzemenin ısı sığasını hesaplayacaksınız.

(a) Eğer sıfır derece sıcaklıkta tüm negatif enerji durumları dolu ve tüm pozitif enerji durumlar boşsa kimyasal potansiyel $\mu(T)$ 'yu hesaplayınız.

- Fermi istatistiğine göre $\mathcal{E}$ enerjili bir durumun dolu olma olasılığı;

$$p[n(\mathcal{E})] = \frac{e^{\beta(\mu - \mathcal{E})n}}{1 + e^{\beta(\mu - \mathcal{E})}},$$

burada $n = 0, 1$ olabilir. $\mu + \delta$ enerjili bir durum için

$$p[n(\mu + \delta)] = \frac{e^{\beta\delta n}}{1 + e^{\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu + \delta) = 1] = \frac{e^{\beta\delta}}{1 + e^{\beta\delta}} = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}}.$$

Benzer şekilde $\mu - \delta$ enerjili durum için,

$$p[n(\mu - \delta)] = \frac{e^{-\beta\delta n}}{1 + e^{-\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu - \delta) = 0] = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}} = p[n(\mu + \delta) = 1],$$

buradan da $\mu + \delta$ enerjili dolu bir durumu bulma olasılığı ile $\mu - \delta$ enerjili boş bir durumu bulma olasılığının aynı olduğu görülür.

Sıfır sıcaklıkta bütün negatif enerjili Dirac durumları dolu ve bütün pozitif enerjili olanlar boştur, yani $\mu(T = 0) = 0$. Yukarıdaki sonuç, $\mu = 0$ için $\langle n(\mathcal{E}) \rangle + \langle n - \mathcal{E} \rangle$ değerinin herhangi bir sıcaklık için değişmez kaldığını vurgular; bu da dolu bir negatif enerjili seviyesinden ayrılan bir parçacığın ilgili pozitif enerjili boş duruma gideceğini gösterir. Bütün bu enerjilerin toplanmasıyla eğer μ sıfır kalırsa parçacık sayısının değişmeyeceği görülür. Bundan dolayı parçacık-boşluk simetrisi $\mu(T) = 0$ olmasını gerektirir.

(b) Bu sistemin sonlu sıcaklıklarda ortalama uyarılma enerjisinin aşağıdaki denklemi sağladığını gösteriniz;

$$E(T) - E(0) = 4A \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1}.$$

- $+$ ($-$) işaretlerini pozitif (negatif) enerjili durumlar için kullanarak uyarılma enerjisi aşağıdaki gibi hesaplanır

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= \sum_{k, s_z} [\langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) + (1 - \langle n_-(k) \rangle) \mathcal{E}_-(k)] \\ &= 2 \sum_k 2 \langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) = 4A \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1}. \end{aligned}$$

(c) Yukarıdaki integrali hesaplayarak uyarılma enerjisi için kapalı bir cevap bulunuz.

- $\mathcal{E}_+(\vec{k}) = \hbar v |\vec{k}|$ için ve

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= 4A \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{4\pi^2} \frac{\hbar v k}{e^{\beta \hbar v k} + 1} = \quad (\beta \hbar v k = x) \\ &= \frac{2A}{\pi} k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar v} \right)^2 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x + 1} \\ &= \frac{3\zeta_3}{\pi} A k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar v} \right)^2. \end{aligned}$$

Son ifade için bize gerekli olan integral $2!f_3^-(1)$ 'dir ve $f_3^-(1) = 3\zeta_3/4$ kullanıldı.

$$E(T) - E(0) = A \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta \mathcal{E}_+(\vec{k})) - 1}.$$

(d) Bu tür kütleli Dirac parçacıkları için ısı sığası C_V 'yi hesaplayınız.

- Isı sığası aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$C_V = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_V = \frac{9\zeta_3}{\pi} A k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar v} \right)^2.$$

(e) Fononların (örgü titreşimlerinin) grafinin ısı sığasına katkısını nitel olarak açıklayınız. Grafitteki ses hızının $2 \times 10^4 \text{ ms}^{-1}$ düzeyindedir. Grafinin düşük sıcaklık ısı sığası fonon mu yoksa elektron katkıları tarafından mı kontrol edilmektedir?

- Fononların tek parçacık uyarımları da doğrusal bir spektruma sahiptir; $\mathcal{E}_p = \hbar v_p |\vec{k}|$ ve kimyasal potansiyel $\mu = 0$ 'a karşılık gelir. Bu yüzden enerji ve ısı sığasına aynı tipte katkıda bulunurlar. Fark sadece sayısal ön-çarpanlardadır. Tek bir fonon dalından gelen katkı aşağıdaki gibidir;

$$\begin{aligned}
 E_p(T) - E_p(0) &= A \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{4\pi^2} \frac{\hbar v_p k}{e^{\beta \hbar v_p k} - 1} = (\beta \hbar c k = x) \\
 &= \frac{A}{2\pi} k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar v_p} \right)^2 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x - 1} \\
 &= \frac{\zeta_3}{\pi} A k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar v_p} \right)^2, \quad C_{V,p} = \frac{3\zeta_3}{\pi} A k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar v_p} \right)^2.
 \end{aligned}$$

Buradan da görürüz ki elektron ısı sığasının fonon ısı sığasına oranı $(v_p/v)^2$ şeklindedir. Dirac fermiyonlarının hızı fononlarınkinden oldukça yüksek olduğundan grafinin ısı sığasına olan katkıları ihmal edilebilir.

2. Kuantum Coulomb gazı: $V = L^3$ hacimli bir kutuda N tane pozitif ve N tane negatif yüklü göreceli parçacıktan oluşan bir *kuantum* sistemini ele alın. Hamiltonyen aşağıdaki gibidir;

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{2N} c |\vec{p}_i| + \sum_{i<j}^{2N} \frac{e_i e_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|},$$

burada $i = 1, \dots, N$ ise $e_i = +e_0$, ve $i = N + 1, \dots, 2N$ ise $e_i = -e_0$ parçacıkların yüklerini temsil eder; $\{\vec{r}_i\}$ ve $\{\vec{p}_i\}$ ise ilgili koordinat ve momentlerdir. Bu, çözmek için çok karmaşık bir sistem olmakla beraber yine de bazı kesin sonuçlar elde etmek mümkündür.

(a) Özdeğerler $\varepsilon_n(L)$ ve özfonksiyonlar (konum uzayında) $\Psi_n(\{\vec{r}\})$ için Schrödinger denklemini yazınız. Parçacıkların bozon ya da fermion olmasına göre $\Psi_n(\{\vec{r}\})$ üzerine uygulanacak kısıtları yazınız.

- Konum gösteriminde $\vec{p}_i$ yerine $-i\hbar \vec{\nabla}_i$ alınır ve Schrödinger denklemleri şöyle yazılır,

$$\left[\sum_{i=1}^{2N} c |\vec{p}_i| - i\hbar \nabla_i + \sum_{i<j}^{2N} \frac{e_i e_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \Psi_n(\{\vec{r}_i\}) = \varepsilon_n(L) \Psi_n(\{\vec{r}_i\}).$$

$+e_0$ yüklü N tane özdeş parçacık ve $-e_0$ yüklü N tane özdeş parçacık vardır. Bu iki alt sistem üzerinde permütasyon operatörleri P_+ ve P_- 'nin etkisini inceleyebiliriz. Simetri kısıtları kompakt biçimde aşağıdaki gibi yazılabilir

$$P_+ P_- \Psi_n(\{\vec{r}_i\}) = \eta_+^{P_+} \cdot \eta_-^{P_-} \Psi_n(\{\vec{r}_i\}),$$

burada bozonlar için $\eta = +1$ ve fermiyonlar için $\eta = -1$ 'dir, ve $(-1)^P$ permütasyonun paritesini gösterir. Farklı yüklü parçacıkların değiş tokuşunda kısıtlama olmadığına dikkat ediniz.

(b) $\vec{r}'_i = \vec{r}_i/L$ ölçek değişimiyle özdeğerlerin $\varepsilon_n(L) = \varepsilon_n(1)/L$ ölçek değişimini sağladığını gösteriniz.

• $\vec{r}'_i = \vec{r}_i/L$ ölçek değişimiyle (ve türevde ilgili değişimle: $\nabla'_i = L\nabla_i$), yukarıdaki Schrödinger denklemi aşağıdaki hali alır;

$$\left[\sum_{i=1}^{2N} c \left| -i\hbar \frac{\nabla'_i}{L} \right|^2 + \sum_{i<j}^{2N} \frac{e_i e_j}{L |\vec{r}'_i - \vec{r}'_j|} \right] \Psi_n \left(\left\{ \frac{\vec{r}'_i}{L} \right\} \right) = \varepsilon_n(L) \Psi_n \left(\left\{ \frac{\vec{r}'_i}{L} \right\} \right).$$

Yukarıdaki denklemde koordinatlar birim uzunluktaki bir kutuya sınırlanmıştır. Bunu, böyle bir kutuda, dalga fonksiyonları $\Psi'_n(\{\vec{r}'_i\}) = \Psi_n(\{\vec{r}'_i/L\})$ olan Schrödinger denklemi olarak alınabilir. Karşılık gelen özdeğerler ise $\varepsilon_n(1) = L\varepsilon_n(L)$ 'dir (yukarıdaki denklemin her iki tarafının L ile çarpılmasıyla elde edilir). Dolayısıyla ölçek ilişkisi aşağıdaki gibi elde edilir;

$$\varepsilon_n(L) = \frac{\varepsilon_n(1)}{L}.$$

(c) Üleşim fonksiyonu $Z(N, V, T)$ 'nin, özdeğerler $\{\varepsilon_n(L)\}$ cinsinden olan genel biçimini kullanarak Z 'nin T ve V 'ye ayrı ayrı bağlı olmadığını fakat farklı oranlarda özel bir kombinasyonla bağlı olduğunu gösteriniz.

• Üleşim fonksiyonun genel biçimi şöyledir,

$$\begin{aligned} Z(N, V, T) &= \text{tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right) = \sum_n \exp \left(-\frac{\varepsilon_n(L)}{k_B T} \right) \\ &= \sum_n \exp \left(-\frac{\varepsilon_n(1)}{k_B T L} \right), \end{aligned}$$

burada enerji seviyelerinin ölçeklenmiş biçimini kullanıldık. Açıkça görüldüğü gibi, yukarıdaki toplamda T ve L hep TL çarpımı halindedir. Ve $V = L^3$ olduğundan asıl ölçek değişkeni VT^3 'tür ve

$$Z(N, V, T) = \mathcal{Z}(N, VT^3).$$

(d) Gazın E enerjisini ve P basıncını üleşim fonksiyonunun değişimleriyle ilişkilendiriniz. $E = 3PV$ kesin sonucunu kanıtlayınız.

• Kanonik toplulukta ortalama enerji aşağıdaki gibi verilir

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = k_B T^2 (3VT^2) \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (VT^3)} = 3k_B VT^4 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (VT^3)}.$$

Serbest enerji $F = -k_B T \ln Z$ 'dir ve değişimi $dF = -SdT - PdV + \mu dN$ şeklindedir.

Bundan dolayı gaz basıncı aşağıdaki gibi verilir

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = k_B T^4 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial (VT^3)}.$$

Yukarıdaki ifadelerin oranı $E = 3PV$ kesin eşitliğini verir.

(e) d boyutlu bir uzayda Coulomb etkileşmesi uzaklıkla $e_i e_j / |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{d-2}$ ($d = 2$ 'de logaritmik bir etkileşim vardır.) Hangi d boyutunda *göreceli olmayan* parçacıklar için E ve P arasında kesin bir ilişki kurabilirsiniz (kinetik enerji $\sum_i \vec{p}_i^2 / 2m$)? Enerji ve basınç için karşılık gelen kesin ilişki nasıldır?

• Yukarıdaki kesin sonuç, enerji özdeğerleri $\varepsilon_n(L)$ 'i sistem boyutuyla ilişkilendiren e basit ölçekleme yasasının bir sonucudur. (b) şıkkındaki ölçekleme biçimini, kinetik ve potansiyel enerjiler aynı şekilde ölçeklendiğinden elde edebildik. Göreceli olmayan parçacıklar için kinetik enerji, $\sum_i \vec{p}_i^2 / 2m = -\sum_i \hbar^2 \nabla_i^2 / 2m$, $\vec{r}_i' = \vec{r}_i / L$ ölçek değişimiyle $1/L^2$ olarak ölçeklenir, etkileşim enerjisi $\sum_{i < j}^{2N} e_i e_j / |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{d-2}$ ise d boyutta $1/L^{d-2}$ şeklinde ölçeklenir. Bu iki biçim $d = 4$ olunca aynı şekilde ölçeklenecektir, sonuç olarak,

$$\varepsilon_n(L) = \frac{\varepsilon_n(1)}{L^2}.$$

Artık üleşim fonksiyonu aşağıdaki ölçekleme biçimine sahiptir;

$$Z(N, V = L^d, T) = \mathcal{Z}(N, (TL^2)^2) = \mathcal{Z}(N, VT^2).$$

Bir önceki bölümdeki adımları takip ederek, kesin ilişkiyi $E = 2PV$ olarak buluruz.

(f) Yukarıdaki 'kesin' ölçekleme yasasının neden yoğun (sıvı ya da katı) Colulomb karışımlarında geçerli olması beklenmez?

• Ölçekleme sonuçları, problemin istatistiksel mekaniğiyle ilgili tek bir ölçekleme uzunluğu L 'nin varlığı varsayımıyla elde edildi. Bu, bir gaz fazı için iyi bir yaklaşımdır. Yoğun (sıvı ya da katı) bir fazda, parçacıklar arasındaki kısa mesafeli itmelerin önemli olması beklenir, ve parçacık boyutu a başka bir ilgili uzunluk ölçeği olarak Schrödinger denkleminin çözümüne girecektir ve ölçekleme sonuçlarını geçersiz kılacaktır.

3. Etkileşmeyen Fermiyonlar: μ kimyasal potansiyelli etkileşmeyen *fermiyonlardan* oluşan bir büyük kanonik topluluk düşünün. Tek parçacık durumları $\vec{k}$ dalga vektörüyle etiketlenmiştir ve $\mathcal{E}(\vec{k})$ enerjileri vardır.

(a) Tek parçacık durumlarının doluluk sayılarının bir kümesi $\{n_{\vec{k}}\}$ 'yi bulmanın birleşik olasılığı $P(\{n_{\vec{k}}\})$ nedir?

- Kimyasal potansiyeli μ olan büyük kanonik toplulukta $\mathcal{E}(\vec{q})$ enerjili tek parçacık durumları için doluluk sayılarının bir kümesi $\{n_{\vec{k}}\}$ 'yi bulmanın birleşik olasılığı Fermi dağılımıyla verilir;

$$P(\{n_{\vec{k}}\}) = \prod_{\vec{k}} \frac{\exp [\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{k}))n_{\vec{k}}]}{1 + \exp [\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{k}))]},$$

burada her $\vec{k}$ için $n_{\vec{k}} = 0$ ya da 1'dir.

(b) (a) şıkkındaki cevabınızı ortalama doluluk sayıları $\{\langle n_{\vec{k}} \rangle_-\}$ cinsinden ifade ediniz.

- Ortalama doluluk sayıları aşağıdaki gibi verilir;

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle_- = \frac{\exp [\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{k}))]}{1 + \exp [\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{k}))]},$$

ki buradan da aşağıdaki elde edilir

$$\exp [\beta(\mu - \mathcal{E}(\vec{k}))] = \frac{\langle n_{\vec{k}} \rangle_-}{1 - \langle n_{\vec{k}} \rangle_-}.$$

Bu, birleşik olasılığı aşağıdaki gibi yazmamızı sağlar,

$$P(\{n_{\vec{k}}\}) = \prod_{\vec{k}} \left[\left(\langle n_{\vec{k}} \rangle_- \right)^{n_{\vec{k}}} \left(1 - \langle n_{\vec{k}} \rangle_- \right)^{1-n_{\vec{k}}} \right].$$

(c) Bir rassal değişkenin, $n = 1, 2, \dots, \ell$ olmak üzere, p_n olasılıklarına sahip ℓ tane ayırık sonucu vardır. Bu olasılık dağılımının entropisi nedir? Olası en büyük entropi değeri nedir?

- Bir rassal değişkenin, p_n olasılıklarına sahip ℓ tane ayırık sonucu vardır. Bu dağılımın entropisi aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$S = -k_B \sum_{n=1}^{\ell} p_n \ln p_n.$$

Bütün olasılıkların $p_n = 1/\ell$ 'ye eşit olduğu durumda maksimum entropi elde edilir:

$$S_{\max} = k_B \ln \ell.$$

(d) (b) şıkkındaki fermiyon doluluk sayıları için olasılık dağılımının entropisini hesaplayınız ve sıfır sıcaklık limitinde yorumlayınız.

- Farklı tek parçacık durumlarının doldurma sayısı birbirinden bağımsız olduğundan ilgili entropiler toplanabilir;

$$S = -k_B \sum_{\vec{k}} \left[\langle n_{\vec{k}} \rangle_- \ln \langle n_{\vec{k}} \rangle_- + (1 - \langle n_{\vec{k}} \rangle_-) \ln (1 - \langle n_{\vec{k}} \rangle_-) \right].$$

Sıfır sıcaklık limitinde bütün doluluk sayıları ya 0 ya da 1'dir. Her iki durumda da entropiye katkı sıfırdır ve fermi sistemi $T = 0$ 'da sıfır entropiye sahiptir.

(e) Toplam parçacık sayısının varyansı $\langle N^2 \rangle_c$ 'yi hesaplayınız ve sıfır sıcaklıktaki davranışı hakkında yorum yapınız.

- Toplam parçacık sayısı $N = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}$ olarak verilir. Doluluk sayıları bağımsız olduğundan,

$$\langle N^2 \rangle_c = \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}}^2 \rangle_c = \sum_{\vec{k}} \left(\langle n_{\vec{k}}^2 \rangle_- - \langle n_{\vec{k}} \rangle_-^2 \right) = \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}} \rangle_- (1 - \langle n_{\vec{k}} \rangle_-),$$

çünkü $\langle n_{\vec{k}}^2 \rangle_- = \langle n_{\vec{k}} \rangle_-$, dir. Yine, $T = 0$ 'da $\langle n_{\vec{k}} \rangle_- = 0$ ya da 1 olduğundan $\langle N^2 \rangle_c$ sıfırdır.

(f) Bir gazın sayı dalgalanmaları sıkıştırılabilirliği κ_T ve sayı yoğunluğu $n = N/V$ ile şu şekilde ilişkilidir,

$$\langle N^2 \rangle_c = N n k_B T \kappa_T.$$

$T = 0$ sıcaklığındaki bir fermi gazının sıkıştırılabilirliği için $\text{\AA}^3 eV^{-1}$ cinsinden *tahmini sayısal* bir değer veriniz.

- Sıkıştırılabilirliği $\langle N^2 \rangle_c = N n k_B T \kappa_T$ 'den elde edebilmek için küçük fakat sonlu sıcaklıklardaki davranışını incelemeliyiz. Küçük fakat sonlu bir T sıcaklığında fermi enerjisi civarında durumların küçük bir kesiri 1/2 civarında doldurma sayılarına sahiptir. Bu durumların sayısı kabaca $N k_B T / \epsilon_F$ 'dir ve varyansı aşağıdaki gibi tahmin edebiliriz;

$$\langle N^2 \rangle_c = N n k_B T \kappa_T \approx \frac{1}{4} \times \frac{N k_B T}{\epsilon_F}.$$

Buradan da sıkıştırılabilirlik yaklaşık olarak

$$\kappa_T \approx \frac{1}{4 n \epsilon_F},$$

olur ki burada $n = N/V$ yoğunluktur. Tipik bir metaldeki elektronlar için $n \approx 10^{29} m^{-3} \approx 0.1 \text{\AA}^{-3}$ ve $\epsilon_F \approx 5 eV \approx 5 \times 10^4 K$ 'dir. Sonuç olarak,

$$\kappa_T \approx 0.5 \text{\AA}^3 eV^{-1}.$$

8.333: İstatistiksel Mekanik I**Güz 2006****Final Sınavı**

1. He^4 'ün donması: 4He düşük sıcaklıklarda basınç uygulanarak katıdan sıvıya dönüştürülebilir. Faz sınırının ilginç bir özelliği, erime basıncının $T = 0 K$ 'deki değerinden, $20 Nm^{-2}$ kadar hafifçe düşerek $T = 0.8 K$ 'de minimum değer almasıdır. Bu özelliği açıklamak için 4He 'ün sıvı ve katı fazlarının basit bir modelini kullanacağız.

(a) Kimyasal potansiyelleri eşitleyerek ya da başka herhangi bir teknikle, Clausius-Clapeyron denklemi $(dP/dT)_{erime} = (s_\ell - s_s)/(v_\ell - v_s)$ 'ni kanıtlayınız. Burada (v_ℓ, s_ℓ) ve (v_s, s_s) sıvı ve katı fazlardaki atom başına düşen hacim ve entropilerdir.

• *Clausius-Clapeyron denklemi* faz sınırında kimyasal potansiyellerin eşitlenmesiyle elde edilebilir;

$$\mu_\ell(T, P) = \mu_s(T, P), \quad \text{and} \quad \mu_\ell(T + \Delta T, P + \Delta P) = \mu_s(T + \Delta T, P + \Delta P).$$

İkinci denklemi açarak ve termodinamik tanımları kullanarak

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = S, \quad \text{ve} \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = -V,$$

sonucunda

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{erime} = \frac{s_\ell - s_s}{v_\ell - v_s}.$$

(b) Sıvı 4He 'da $T < 1^o K$ için önemli olan uyarımlar c hızlı fononlardır. Bu modların sıvının parçacık başına düşen ısı sığası C_V^l/N 'ye katkısını hesaplayınız.

• Sıvı 4He 'da $T < 1K$ için önemli olan uyarımlar c hızındaki fononlardır. İlgili dağılım ilişkisi $\varepsilon(k) = \hbar ck$ 'dir. $\vec{k}$ modundaki fononların ortalama sayısı $\langle n(\vec{k}) \rangle = [\exp(\beta \hbar ck) - 1]^{-1}$ kullanılarak, net uyarılma enerjisi elde edilir,

$$\begin{aligned} E_{\text{fonon}} &= \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar ck}{\exp(\beta \hbar ck) - 1} \\ &= V \times \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{\hbar ck}{\exp(\beta \hbar ck) - 1} \end{aligned}$$

($x = \beta \hbar ck$ değişken dönüşümüyle)

$$= \frac{V}{2\pi^2} \hbar c \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^4 \frac{6}{3!} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{30} V \hbar c \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^4,$$

burada şunu kullandık,

$$\zeta_4 \equiv \frac{1}{3!} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{90}.$$

İlgili ısı sığası aşağıdaki şekilde elde edilir;

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{2\pi^2}{15} V k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3,$$

böylece, sıvıdaki parçacık başına düşen ısı sığası;

$$\frac{C_V^\ell}{N} = \frac{2\pi^2}{15} k_B v_\ell \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3.$$

(c) Katı ^4He 'da düşük sıcaklıkta parçacık başına ısı sığası C_V^s/N 'yi, boyuna ve enine ses hızları c_L ve c_T cinsinden hesaplayınız.

- Katının temel uyarımları da fononlardır ama bu sefer c_T hızında *iki* enine mod ve c_L hızında *bir* boylamsal mod vardır. Bu modların katkısı toplanır ve herbiri yukardaki gibi hesaplanan sıvı sonucuna benzer katkı yapar, bu da katı ısı sığasını aşağıdaki gibi verir;

$$\frac{C_V^s}{N} = \frac{2\pi^2}{15} k_B v_s \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \left(\frac{2}{c_T^3} + \frac{1}{c_L^3} \right).$$

(d) Yukarıdaki sonuçları kullanarak, tek bir ses hızı $c \approx c_L \approx c_T$, parçacık başına yaklaşık eşit hacimler $v_\ell \approx v_s \approx v$ varsayımlarıyla, entropi farkı $(s_\ell - s_s)$ 'yi hesaplayınız. Hangi faz (katı veya sıvı) daha yüksek entropiye sahiptir?

- Entropiler ısı sığalarından aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$s_\ell(T) = \int_0^T \frac{C_V^\ell(T') dT'}{T'} = \frac{2\pi^2}{45} k_B v_\ell \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3,$$

$$s_s(T) = \int_0^T \frac{C_V^s(T') dT'}{T'} = \frac{2\pi^2}{45} k_B v_s \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \times \left(\frac{2}{c_T^3} + \frac{1}{c_L^3} \right).$$

Yaklaşık eşit ses hızları $c \approx c_L \approx c_T \approx 300 \text{ m s}^{-1}$ ve özgül hacimler $v_\ell \approx v_s \approx v = 46 \text{ Å}^3$ varsayarak, entropi farkını aşağıdaki gibi buluruz;

$$s_\ell - s_s \approx -\frac{4\pi^2}{45} k_B v \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3.$$

Katı faz sıvı fazdan daha fazla entropiye sahiptir çünkü katı modda iki tane daha fazla fonon uyarılma bandı mevcuttur.

(e) Küçük bir hacim farkı $\delta v = v_\ell - v_s$ olduğunu varsayarak (sıcaklıktan bağımsız), erime eğrisinin biçimini hesaplayınız. Başta belirtilen anomaliyi açıklamak için hangi fazın (katı veya sıvı) yoğunluğu daha yüksek olmalıdır?

- Clausius-Clapeyron denklemini kullanarak ve yukarıdaki entropi farkı hesabından

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\text{erime}} = \frac{s_\ell - s_s}{v_\ell - v_s} = -\frac{4\pi^2}{45} k_B \frac{v}{\delta v} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3.$$

Yukarıdaki denklemin integralinin alınmasıyla erime eğrisi aşağıdaki gibi bulunur;

$$P_{\text{eri}}(T) = P(0) - \frac{\pi^2}{45} k_B \frac{v}{\delta v} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^3 T.$$

Basıncıdaki düşmeyi açıklamak için $\delta v = v_\ell - v_s > 0$ olması gerekir, yani katı hal beklendiği gibi daha yüksek yoğunluğa sahiptir.

2. Sıkıştırılmış zincir. Bir lastik şerit N tane, sabit a uzunluğunda *kütle*siz çubuğun tek zinciri olarak modellenenebilir. Bu zincir dar bir boruya konulduğunda her çubuk boruya paralel ya da anti-paralel yönelimle kısıtlanmış olur.

(a) Çubuklar arası etkileşimler ihmal edilirse, L zincirin uçtan uca uzunluğu olmak üzere, zincirin konfigürasyon sayısı $\Omega(L, N)$ nedir?

• Tipik bir konfigürasyon bir yönde N_+ adım ve diğer yönde N_- adıma sahip olacaktır, böylece;

$$L = (N_+ - N_-)a, \quad \text{ve} \quad N = N_+ + N_-,$$

ya da eşdeğer olarak

$$N_\pm = \frac{N \pm L/a}{2}.$$

Konfigürasyon sayısı binom formülüyle verilir;

$$\Omega(L, N) = \frac{N!}{N_+!N_-!} = \frac{N!}{[(N + L/a)/2]![(N - L/a)/2]!}.$$

(b), Entropi sonucunu N ve $x = L/(Na)$ 'in fonksiyonu olarak ifade etmek için Stirling yaklaşıklığını kullanınız.

• Stirling yaklaşıklığını kullanarak

$$\begin{aligned} \frac{S}{k_B} &= \ln \Omega \approx N \ln N - N_+ \ln N_+ - N_- \ln N_- \\ &= N \ln 2 - \frac{N}{2} [(1+x) \ln(1+x) + (1-x) \ln(1-x)]. \end{aligned}$$

Şimdi, boru düzgün bir şekilde sıkıştırılmıştır ve gerilmiş konfigürasyonlar enerji açısından tercih edilmektedir. Bu problem için, yerel çubuk yoğunluğuna ters olarak bağlı bu enerjinin basit bir biçimini varsayınız; düzgünce gerilmiş bir durumun enerjisi,

$$E(L, N) = -\frac{\sigma}{2}L \times \frac{L}{N} = -\frac{\sigma a^2}{2}Nx^2.$$

(Problemin geri kalanında, L ve N 'si verili tüm durumların enerjisi için bu formülü kullanınız.)

(c) Serbest enerji $F(T, L, N)$ 'yi, ve zincirin uç noktalarına etkiyen kuvvet $J(T, L, N)$ 'yi bulunuz. (Zinciri uzatmak için yapılan iş $dW = JdL$)

- Serbest enerji şöyledir,

$$F = E - TS = -\frac{\sigma}{2} \frac{L^2}{N} + \frac{k_B T}{2} [(N + L/a) \ln(N + L/a) + (N - L/a) \ln(N - L/a) - N \ln 2 - 2N \ln N]$$

L ile eşlenik kuvvet ise,

$$J = \frac{\partial F}{\partial L} = -\sigma \frac{L}{N} + \frac{k_B T}{2a} \ln \frac{Na + L}{Na - L} = -\sigma a x + \frac{k_B T}{2a} \ln \frac{1+x}{1-x}.$$

(d) Eşsıl eğrileri $J(x, T)$ 'yi yüksek ve düşük sıcaklıklarda çiziniz ve davranışın değiştiği sıcaklık T_c 'yi belirleyiniz.

- $J(x)$ eğrileri $x = 0$ 'da $(k_B T/a - \sigma a)$ eğimiyle doğrusal olarak başlar ve $x \rightarrow 1$ limitinde (artı) sonsuza gider. Eğim $T_c = (\sigma a^2)/k_B$ 'de işaret değiştirir, $T < T_c$ için eğriler x 'e göre monotonik değildir.

(e) Zincirin kararlılığı için koşul nedir? Yukarıdaki eşsıl eğrilerinin hangi kısmı doğal olarak dengesizdir?

- Denge koşulu şöyledir,

$$\delta J \delta L \geq 0,$$

ve $J(x)$ eşsıl eğrisinin eğiminin pozitif olmasını gerektirir. $T < T_c$ durumunda eşsıl eğrilerinin minimumunun altında kalan kısımları bu koşulu ihlal eder ve doğal olarak dengesizdirler.

(f) (c) şıkında J için elde edilen ifadeyi kullanarak, T T_c 'ye aşağıdan yaklaşırken geçerli olan, kuvvet uygulanmamış ($J = 0$) zincir uzunluğu için bir ifade bulunuz.

- $T \rightarrow T_c^-$ iken $x \propto L$ sıfıra gider. $J(x) = 0$ ifadesindeki logaritmaları açarak aşağıdaki ifadeyi buluruz

$$0 = \left(-\sigma a + \frac{2k_B T}{a} \right) x + \frac{2k_B T}{3a} x^3 + \mathcal{O}(x^5).$$

Bu denklemin çözümü aşağıdaki gibi olur

$$\frac{x^2}{3} = 1 - \frac{T_c}{T}, \quad L \approx Na \sqrt{3 \left(1 - \frac{T_c}{T} \right)}.$$

3. Grafin çifttabakası: Grafitin tabakaları farklı ayırma işlemleriyle soyulabilir. Bu tarz birçok işlem, karbon atomlarının tek yapraklarını, ve bunun yanında iki yaprağın zayıfça bağlandığı çifttabakaları oluşturur. Tek tabaka grafinin altıgen örgüsü, düşük enerjilerde, göreceli Dirac fermiyonlarına benzer şekilde $\mathcal{E}_{\pm}^{1\text{ layer}}(\vec{k}) = \pm t_{\parallel}(ak)$ ile yaklaşık ifade edilebilen bir bant yapısına yolaçar. (Burada $k = |\vec{k}|$, a bir örgü uzaklığı, ve $t_{\parallel}$ tipik düzlem-içi hoplama enerjisidir.) Çifttabakanın iki yaprağı arasındaki zayıf bir hoplama enerjisi $t_{\perp}$ düşük enerjili uyarımları önemli biçimde şöyle değiştirir,

$$\mathcal{E}_{\pm}^{\text{bilayer}}(\vec{k}) = \pm \frac{t_{\parallel}^2}{2t_{\perp}}(ka)^2, \quad ,$$

yani kütleli Dirac fermiyonlarına benzetir. Spin yozlaşmasının yanında, birim hücre başına bu tip iki dal olduğundan toplam yozlaşma sayısı $g = 4$ 'tür.

(a) Katkılanmamış, konum başına bir elektron içeren malzemede, sıfır sıcaklıkta tüm negatif enerjili durumlar dolu ve tüm pozitif enerjililer boştur. Kimyasal potansiyel $\mu(T)$ 'yi hesaplayınız.

- Fermi istatistiğine göre $\mathcal{E}$ enerjili bir durumun dolu olma olasılığı;

$$p[n(\mathcal{E})] = \frac{e^{\beta(\mu - \mathcal{E})n}}{1 + e^{\beta(\mu - \mathcal{E})}},$$

burada $n = 0, 1$ olabilir. $\mu + \delta$ enerjili bir durum için

$$p[n(\mu + \delta)] = \frac{e^{\beta\delta n}}{1 + e^{\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu + \delta) = 1] = \frac{e^{\beta\delta}}{1 + e^{\beta\delta}} = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}}.$$

Benzer şekilde $\mu - \delta$ enerjili durum için,

$$p[n(\mu - \delta)] = \frac{e^{-\beta\delta n}}{1 + e^{-\beta\delta}}, \quad \Rightarrow \quad p[n(\mu - \delta) = 0] = \frac{1}{1 + e^{-\beta\delta}} = p[n(\mu + \delta) = 1],$$

buradan da $\mu + \delta$ enerjili dolu bir durumu bulma olasılığı ile $\mu - \delta$ enerjili boş bir durumu bulma olasılığının aynı olduğu görülür.

Sıfır sıcaklıkta bütün negatif enerjili Dirac durumları dolu ve bütün pozitif enerjili olanlar boştur, yani $\mu(T = 0) = 0$. Yukarıdaki sonuç, $\mu = 0$ için $\langle n(\mathcal{E}) \rangle + \langle n(-\mathcal{E}) \rangle$ değerinin herhangi bir sıcaklık için değişmez kaldığını vurgular; bu da dolu bir negatif enerjili seviyesinden ayrılan bir parçacacığın ilgili pozitif enerjili boş duruma gideceğini gösterir. Bütün bu enerjilerin toplanmasıyla eğer μ sıfır kalırsa

parçacık sayısının değişmeyeceği görülür. Bundan dolayı parçacık-boşluk simetrisi olmasını gerektirir.

(b) Sonlu sıcaklıkta bu sistemin ortalama uyarım enerjisinin şöyle olduğunu gösteriniz:

$$E(T) - E(0) = 2gA \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta\mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1}.$$

- işaretlerini pozitif (negatif) enerji durumları için kullanarak uyarım enerjisi;

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= \sum_{k,s_z,\alpha} [\langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) + (1 - \langle n_-(k) \rangle) \mathcal{E}_-(k)] \\ &= g \sum_k 2 \langle n_+(k) \rangle \mathcal{E}_+(k) = 2gA \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\mathcal{E}_+(\vec{k})}{\exp(\beta\mathcal{E}_+(\vec{k})) + 1}. \end{aligned}$$

(c) Çifttabakanın uyarım enerjisi için yukarıdaki integrali hesaplayarak kapalı bir cevap bulunuz

- olsun, burada ,

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= 2gA \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{4\pi^2} \frac{\alpha k^2}{e^{\beta\alpha k^2} + 1} = (\beta\alpha k^2 = x) \\ &= \frac{gA}{2\pi} k_B T \left(\frac{k_B T}{\alpha} \right) \int_0^\infty dx \frac{x}{e^x + 1} \\ &= \frac{g\pi}{24} A k_B T \left(\frac{k_B T}{\alpha} \right) = \frac{\pi}{3} \frac{A}{a^2} \left(\frac{k_B T}{t_{\parallel}} \right)^2 t_{\perp}. \end{aligned}$$

Son ifadede gerekli integral 'dir, ve eşitliğini kullandık.

(d) Kütleli Dirac parçacıkları için ısı sığası 'yi hesaplayınız.

- Isı sığası aşağıdaki gibi hesaplanabilir;

$$C_A = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_A = \frac{2\pi}{3} \frac{A}{a^2} k_B \left(\frac{k_B T t_{\perp}}{t_{\parallel}^2} \right).$$

(e) Bir örnekte tek ve iki katmanlılardan eşit oranda bulunmaktadır. Hangi sıcaklıktan düşük değerlerde iki katmanlının ısı sığasında baskın duruma geçtiğini (hoplama enerjileri cinsinden) tahmin ediniz.

- Daha önceden belirtildiği gibi fononların tek-katmanlıdaki uyarımları doğrusal bir spektruma sahiptir: $\mathcal{E}^{1\text{ layer}} = \pm t_{\parallel}(ka)$ Enerjilere ve ısı sığalarına katkıları önceden hesaplandığı gibi bulunabilir. Çeşitli ön çarpanlar dahil olmak üzere (çözüm için gerekli değildirler) şunu elde ederiz.

$$\begin{aligned}
 E^{1 \text{ layer}}(T) &= 2gA \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{4\pi^2} \frac{t_{\parallel} a k}{e^{\beta t_{\parallel} a k} + 1} = & (\beta t_{\parallel} a k = x) \\
 &= \frac{gA}{\pi} k_B T \left(\frac{k_B T}{t_{\parallel} a} \right)^2 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^x + 1} \\
 &\propto \frac{A}{a^2} k_B T \left(\frac{k_B T}{t_{\parallel}} \right)^2, \quad C_A^{1 \text{ layer}} \propto \frac{A}{a^2} k_B \left(\frac{k_B T}{t_{\parallel}} \right)^2.
 \end{aligned}$$

T ile orantılı olan iki katmanlı ısı sığası, düşük sıcaklıklarda daha önemlidir. İki ifadenin karşılaştırılmasıyla, $T^* \approx t_{\perp}/k_B$ 'den düşük sıcaklarda parçacık başına düşen elektronik ısı sığası iki katmanlı için daha büyüktür.
