

Physique Statistique

Examen Final

Alberto Verga

17 décembre 2014

1 Transition de phase

L'énergie libre de Landau d'un système ferromagnétique est

$$F[\phi, H] = \int_{\text{Vol}} dx \left[\frac{\kappa}{2} (\nabla\phi)^2 + a(T)\phi^2 + b\phi^4 - H\phi \right]$$

où $\phi = \phi(x)$ est le paramètre d'ordre, $a = a(T) = a_0(T - T_c)$ est un paramètre qui s'annule à la température critique $T = T_c$, κ et b sont des paramètres constants et H est un champ extérieur.

1. Calculez

$$\frac{\delta F}{\delta\phi(x)},$$

pour montrer qu'à l'équilibre thermodynamique (minimum de $F[\phi]$), l'aimantation $m = \langle\phi\rangle$ est nulle pour $T > T_c$ et peut prendre deux valeurs opposées m_{\pm} , en dessous de la température critique, $T < T_c$. Montrez en particulier la loi,

$$m \sim (T_c - T)^{1/2}, \quad T < T_c.$$

2. Calculez

$$\frac{\delta}{\delta H(x')} \left[\frac{\delta F}{\delta\phi(x)} \right] = 0,$$

et utilisez la définition,

$$\chi(x - x') = \frac{\delta \langle\phi(x)\rangle}{\delta H(x')}$$

pour obtenir l'équation, valable proche à l'équilibre,

$$[-\nabla^2 + \xi_{\pm}^{-2}(T)]\chi(x - x') = (1/\kappa)\delta(x - x')$$

Trouvez l'expression explicite de $\xi(T)$ et donnez une interprétation physique. Vous pouvez faire référence au lien $k_B T \chi(x - x') = C(x - x')$ entre la susceptibilité et la fonction de corrélation $C(x - x')$, et donner un simple argument dimensionnel. Comment se comporte ξ au voisinage de la température critique, $T = T_c$? Donnez la loi de puissance.

2 Percolation

On se propose de calculer la probabilité $P = P(p)$ d'avoir un amas (cluster) infini dans un arbre de Cayley (avec trois branches par site $z = 3$), avec p la probabilité qu'un site soit occupé. On part de la formule de récurrence pour la probabilité Q qu'un site donné ne soit pas connecté par une quelconque branche à l'infini,

$$Q = 1 - p + pQ^2,$$

et du fait qu'un site occupé ne soit pas partie de l'amas infini ($p - P$) est équivalent au fait qu'aucune de ses trois branches est connectée à l'infini :

$$p - P = pQ^3.$$

Calculez la probabilité critique p_c d'apparition d'un amas infini (vous pouvez utiliser le fait qu'en dessous de la probabilité critique la probabilité de ne pas être connecté à l'infini est 1, et au dessus elle doit être plus petite que 1). Montrez que $P = 0$ en dessous de la probabilité critique $p = p_c$ et calculez la fonction $P(p)$ pour $p > p_c$.

3 Désordre

On considère un matériau ferromagnétique dilué dans la phase de Griffiths. La probabilité d'avoir un domaine magnétisé de taille L est

$$P(L) = \exp(-cL^3),$$

où c est un paramètre qui dépend de la concentration. La fonction de corrélation temporelle du spin dans un site donné d'un amas de taille L , décroît exponentiellement,

$$\langle s(0)s(t) \rangle_L = \exp(-t/\tau(L))$$

avec un temps caractéristique $\tau = e^{\kappa L^2}$, où κ est la tension de surface. La fonction de corrélation est donc

$$C(t) \approx \int_0^\infty dL P(L) \langle s(0)s(t) \rangle_L.$$

Calculez approximativement l'intégrale pour démontrer qu'asymptotiquement

$$C(t) \sim \exp \left[-c \left(\frac{1}{\kappa} \log t \right)^{3/2} \right].$$

Utilisez la formule de Laplace :

$$\int_0^\infty dL e^{-tf(L)} \approx e^{-tf(L_0)}, \quad f'(L_0) = 0,$$

valable pour $t \rightarrow \infty$. Vous pouvez négliger des termes en $\log \log t$ et 1 en face de $\log t$. Discutez le résultat en le comparant à la relaxation exponentielle ou algébrique d'un matériau ferromagnétique (comme dans le modèle d'Ising).

Physique Statistique

Alberto Verga

Master de physique – Examen Final

16 décembre 2015

Transition de phase, percolation, relaxation

1. Un alliage consiste en N_A atomes A et N_B atomes B dans un cristal cubique ($N = N_A + N_B$). Les atomes voisins du même type s'attirent avec une énergie $-J$ et ceux de type différent se repoussent avec une énergie J . On peut imaginer qu'à très basse température, le système doit se trouver dans une phase ordonnée, avec les atomes A séparés des atomes B; tandis qu'à haute température, le système doit se trouver dans une phase désordonnée, avec une distribution aléatoire des atomes A et B. Une transition entre les deux états devrait donc se produire à une température de l'ordre de J (pourquoi?).

▷ Calculez l'énergie et l'entropie dans la *phase désordonnée*. Considérez que pour chaque site du réseau cubique sortent trois liens; l'énergie d'interaction doit être proportionnelle au produit des concentrations (A-A, B-B, et A-B). L'entropie d'un système désordonné est celle d'équiprobabilité pour chaque espèce. Notez p_A la probabilité qu'un site soit de type A, idem pour B.

▷ Montrez que l'énergie libre s'écrit :

$$F(x, T) = -3JNx^2 + Nk_B T \left(\frac{1+x}{2} \ln \frac{1+x}{2} + \frac{1-x}{2} \ln \frac{1-x}{2} \right)$$

avec $x = (N_A - N_B)/N$ le paramètre d'ordre ou concentration relative.

▷ Le développement de $F(x)$ en puissances de x , est

$$\frac{F}{N} = f_0 + \frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{12}x^4$$

avec $f_0 = -k_B T \ln 2$, $a = k_B T - 6J$, et $b = k_B T$ des paramètres dépendants de la température. Étudiez les minima de F en fonction de la température et démontrez qu'une transition se produit à $T = T_c = 6J/k_B$. Trouvez la concentration d'équilibre $x = x_{eq}(T)$.

▷ Dans le plan (x, F) représentez l'allure de l'énergie libre pour trois températures représentatives ($T < T_c, T = T_c, T > T_c$). Sur la même figure, tracez la ligne de la concentration d'équilibre des phases, $x_{eq}(T)$ (lieu des minima de F). Tracez également la ligne spinodale : le lieu de concentration relative $x = x_{sp}(T)$ où la dérivée deuxième de l'énergie libre s'annule.

2. On s'intéresse à la percolation dans un arbre de Cayley de connectivité $z = 3$. L'objectif est de faire une figure de la probabilité d'avoir un cluster infini $P(p)$, en fonction de la probabilité p d'occupation d'un site. Faites d'abord un schéma montrant l'équation de récurrence

$$Q = 1 - p + pQ^2$$

satisfaite par la probabilité Q , pour qu'une branche issue de l'origine, n'appartienne pas au cluster de percolation (infini). Exprimez ensuite la probabilité pour que l'origine appartienne au cluster infini P en fonction de Q pour calculer la fonction $P(p)$. Donnez la forme générale de $P(p)$ et montrez en particulier son comportement près de la transition de percolation. Donnez la valeur p_c à laquelle la transition se produit. Faites enfin le dessin de

$$\frac{P}{p} = \text{fonction}(p).$$

3. Près de la transition de phase, la méthode de Metropolis converge très lentement. Expliquez qualitativement pourquoi ; pensez en particulier à la probabilité d'acceptation d'un changement de spin.
4. On suppose que la dynamique de l'aimantation m d'un matériau ferromagnétique à la température T suit la loi

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{df}{dm} = (1 - T)m - \frac{T^3}{3}m^3,$$

dans des unités appropriées, où $f = f(T, m)$ est la densité d'énergie libre. Quelle est la température critique, celle de la transition de phase de $m = 0$ vers $m \neq 0$? Trouvez la loi de relaxation vers l'équilibre dans l'état ferromagnétique, calculez en particulier le temps caractéristique. Montrez qu'à la température critique la relaxation devient algébrique et non exponentielle.

Physique Statistique

Alberto Verga

Master de physique – Seconde session

29 juin 2016

L'énergie libre d'un matériau ferromagnétique est

$$F[m] = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\kappa}{2} (\nabla m)^2 + f(m) \right], \quad f(m) = \frac{1}{2} a(T) m^2 + \frac{1}{4} b m^4$$

où $m = m(\mathbf{x}, t) \in [-1, 1]$ est le paramètre d'ordre (magnétisation), $\kappa, b = \text{const.}$, et $a = a(T)$ une fonction de la température.

On s'intéresse à la dynamique du paramètre d'ordre supposée régie par l'équation :

$$\frac{\partial}{\partial t} m = - \frac{\delta F}{\delta m}$$

autour de la transition de phase.

1. Décrivez la transition de phase. Vous pouvez supposer le système homogène et développer la fonction $a(T)$ autour de la température critique T_c (théorie de Landau).
2. Ecrivez explicitement l'équation d'évolution de m , en calculant la dérivée fonctionnelle.
3. Montrez que dans le cas homogène elle se réduit à une équation de la forme :

$$\frac{dm}{dt} = (1 - T)m - b m^3,$$

dans un système d'unités approprié ($T_c = 1$ et b une nouvelle constante).

4. Trouvez la loi de relaxation vers l'équilibre dans l'état paramagnétique, calculez en particulier le temps caractéristique.
5. Montrez qu'à la température critique ($T = 1$) la relaxation devient algébrique et non exponentielle.

Physique Statistique
Master de physique—janvier 2017
Alberto Verga

1 Opérateur densité

Les modes de rotation d'une molécule sont décrits par le hamiltonien,

$$H = \frac{L_z^2}{2I}$$

où I est le moment d'inertie et L_z la composante z du moment angulaire. La molécule se trouve à l'équilibre avec un bain thermique à température T . On cherche le comportement basse et haute température de l'opérateur densité canonique

$$\rho(T) = \frac{e^{-H/T}}{Z}, \quad Z = \text{Tr} e^{-H/T}, \quad k_B = 1,$$

en représentation coordonnée ϕ :

$$\rho(\phi, \phi', T) = \langle \phi | \rho(T) | \phi' \rangle, \quad L_z = i \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad \hbar = 1,$$

ϕ est l'angle polaire en coordonnées sphériques.

- Trouvez les fonctions propres $\psi_m(\phi) = \langle \phi | m \rangle$ de H , et montrez que le spectre d'énergie est

$$E_m = \frac{m^2}{2I},$$

avec m entier. (Vous pouvez résoudre $H\psi = E\psi$, ou plus simple, utiliser en le justifiant, la base $|m\rangle$ de L_z .)

- Calculez la fonction de partition Z et l'opérateur densité $\langle \phi | \rho(T) | \phi' \rangle$ exactement. Trouvez le paramètre sans dimensions que vous permet de distinguer les régimes de basse et de haute température.
- Montrez qu'à basse température seules les valeurs de $m = -1, 0, 1$ sont significatives. Déduisez la forme approchée :

$$\rho(\phi, \phi', T) \approx \frac{1}{2\pi} - \frac{2e^{-1/2IT}}{\pi} \sin^2 \left(\frac{\phi - \phi'}{2} \right).$$

- À haute température on peut remplacer la somme par une intégrale. Montrez que l'opérateur densité est approximativement

$$\rho(\phi, \phi', T) \approx \frac{1}{2\pi} e^{-IT(\phi - \phi')^2/2}.$$

Discutez la validité de ce développement selon la grandeur de $\phi - \phi'$.

2 Transition de phase

L'énergie libre d'un matériau ferromagnétique est

$$F[m, h] = \int_V d\mathbf{x} \left[\frac{\kappa}{2} (\nabla m)^2 + f(m) - hm \right], \quad f(m) = a(T)m^2 + bm^4$$

où $m = m(\mathbf{x}) \in [-1, 1]$ est le paramètre d'ordre (magnétisation) et $h = h(\mathbf{x})$ un champ extérieur ; V est le volume du système, κ, b sont des constantes, et $a = a(T)$ est une fonction de la température. On s'intéresse à la transition para-ferromagnétique.

Dans un premier temps on considère le système homogène, à l'équilibre. On se propose de décrire la transition de phase.

- ▶ Développez la fonction $a(T)$ autour de la température critique T_c (théorie de Landau).
- ▶ Faites un schéma expliquant le comportement de l'énergie libre en fonction de m pour différentes températures.
- ▶ Trouvez la magnétisation d'équilibre $\bar{m}(T)$, dans les phases para et ferro. Montrez que l'exposant critique est $1/2$.
- ▶ Montrez qu'à la transition la magnétisation suit une loi de puissance : $m \sim h^\delta$. Trouvez l'exposant δ .

On suppose maintenant le système proche de l'équilibre, perturbé par un champ $h = h(\mathbf{x})$ non homogène. L'objectif est de calculer la susceptibilité $\chi(k)$, dans l'espace de Fourier k .

- ▶ Démontrez d'abord que la variation de l'énergie libre $\delta F[m] = 0$ donne,

$$0 = -\kappa \nabla^2 m + 2am + 4bm^3 - h$$

- ▶ La dérivée fonctionnelle de cette équation par rapport au champ vous donne une équation pour la susceptibilité

$$\chi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\delta m(\mathbf{x})}{\delta h(\mathbf{x}')}$$

Montrez qu'à l'équilibre elle se réduit à :

$$\left(-\kappa \nabla^2 + 2a + 12b\bar{m}^2 \right) \chi(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

- ▶ Démontrez enfin que la susceptibilité s'écrit en Fourier :

$$\chi(k) = \frac{1}{\kappa} \frac{\xi^2}{1 + (\xi k)^2}$$

et donnez l'expression explicite de la longueur de corrélation ξ dans les deux phases.

- ▶ Faites un schéma de $\chi(k, T)$ pour $T > T_c$, $T < T_c$ et $T = T_c$. Discutez brièvement le résultat.

Physique Statistique
Master de physique, seconde session—juin 2017
Alberto Verga

1. Un spin dans un champ magnétique. Le hamiltonien d'un électron (spin 1/2) en interaction avec un champ \mathbf{B} est

$$H = \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le vecteur des matrices de Pauli, et $\mu_B = e\hbar/2m$ le magnéton de Bohr.

Trouvez la fonction de partition $Z = \text{Tr} e^{-H/T}$ et la matrice densité $\rho = e^{-H/T}/Z$ ($k_B = 1$) à la température T , pour un champ dirigé selon z et un autre selon x . Calculez l'énergie moyenne $E = \langle H \rangle$. Dépend-elle de la direction ?

2. On considère la transition de phase de deuxième espèce entre un état paramagnétique et un état ferromagnétique. Dans le cadre de la théorie de Landau, écrivez l'énergie libre en fonction de la magnétisation m et du champ appliqué h , $F(m, h)$. Montrez qu'il existe une température critique T_c . Calculez la magnétisation d'équilibre en fonction de T . Trouvez l'exposant critique β de la magnétisation au voisinage de la température T_c critique,

$$m(T) \sim |T - T_c|^\beta.$$

Calculez également l'exposant de la magnétisation en fonction du champ magnétique δ :

$$m(h) \sim h^\delta.$$

3. Corrélations. On considère un système dont le hamiltonian $H = H(A)$ dépend d'une grandeur physique définie sur chaque site i d'un réseau A_i . Le système est soumis à l'action d'un champ extérieur h_i ; le hamiltonian total s'écrit :

$$\mathcal{H} = H - \sum_i h_i A_i$$

La fonction de partition est donc une fonction de la température T et du champ sur chaque site h_i

$$Z = Z(T, \{h_i, \forall i\}) = \text{Tr} e^{-\mathcal{H}/T}$$

Démontrez que la fonction de corrélation satisfait,

$$\langle A_i A_j \rangle = \frac{T^2}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial h_i \partial h_j},$$

Calculez la susceptibilité,

$$\chi(i, j) = \frac{\partial \langle A_i \rangle}{\partial h_j}$$

et démontrez la formule (fluctuation-dissipation classique) :

$$C(x) = T\chi(x)$$

pour un système homogène :

$$C(x) = \langle A_i A_{i+x} \rangle - \langle A_i \rangle^2$$

Physique Statistique
Master de physique—décembre 2017
Alberto Verga

1. On s'intéresse à la relaxation de l'aimantation m pour un système décrit par la densité d'énergie libre $f(m)$ de Landau :

$$f(m) = a(T)m^2 + bm^4$$

à température T , avec a et b des paramètres spécifiques du matériau. On suppose la dynamique régie par l'équation différentielle :

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{\partial f}{\partial m}.$$

Discutez les états d'équilibre, et la forme de la fonction $a = a(T)$. Montrez que le système présente une phase paramagnétique et une phase ferromagnétique; calculez la température critique T_c . Trouvez le temps de relaxation dans les deux phases. Discutez enfin la dynamique à la transition, en résolvant l'équation différentielle pour $T = T_c$.

2. Un système quantique à deux niveaux $\pm E_0$ se trouve en contact avec un bain à température T . Il est décrit par le hamiltonien,

$$H = E_0\sigma_z, \quad \sigma_z = \text{diag}(1, -1).$$

Écrivez la matrice densité ρ dans la base d'énergie, sous la forme d'une matrice. Calculez l'énergie moyenne E , et la fluctuation d'énergie ΔE :

$$\langle H \rangle = \text{Tr} \rho H, \quad \Delta E^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

Discutez les limites de basse et haute température de ΔE .

3. Un système de spins $s(x, y)$ sur un réseau carré $(x, y) \in \mathbb{Z}^2$ évolue selon la dynamique,

$$s(x, y, t + 1) = \begin{cases} s(x, y), & \text{avec } 1 - w \\ -s(x, y), & \text{avec } w \end{cases}$$

où le poids (probabilité par pas de temps, $\Delta t = 1$)

$$w = \frac{1}{2} - \frac{s(x, y, t)}{8} \sum_{(x', y') \in I} s(x', y', t), \quad I = \{(x \pm 1, y), (x, y \pm 1)\}$$

(la somme porte sur les quatre voisins du site (x, y) , avec $\Delta x = 1$, le pas du réseau). Trouvez l'équation d'évolution de la valeur moyenne $S(x, y, t) = \langle s(x, y, t) \rangle$, et montrez que si on remplace les différences finies par des dérivées, on obtient une équation de diffusion :

$$\frac{\partial}{\partial t} S(x, y, t) = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2} S(x, y, t)$$

Calculez la valeur moyenne à l'origine $S(0, 0, t)$, en supposant par commodité que $S(x, y, 0) = \delta(x)\delta(y)$ (dont la transformée de fourier est 1).

Physique Statistique
Master de physique—juin 2018
Alberto Verga

1. Montrez que l'entropie de von Neumann est conservée dans un système fermé (hamiltonien indépendant du temps).
2. On s'intéresse à la transition de phase et à la relaxation d'un système magnétique décrit par la densité d'énergie libre de Landau :

$$f(m, h) = a(T)m^2 + bm^4 - hm$$

où m est l'aimantation, T la température et h champ appliqué; ici a et b sont des paramètres spécifiques du matériau.

- ▷ Discutez les états d'équilibre, et la forme de la fonction $a = a(T)$.
- ▷ Montrez que le système présente une phase paramagnétique et une phase ferromagnétique.
- ▷ Calculez les exposants critiques de la magnétisation en fonction de la température (pour $h = 0$) et du champ $m = m(h)$ au voisinage de la transition de phase.
- ▷ Calculez la susceptibilité et montrez que l'exposant est -1 .
- ▷ On suppose la dynamique régie par :

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{\partial f}{\partial m}.$$

Résolvez l'équation différentielle pour trouver les temps de relaxation dans les deux phases (avec $h = 0$).

- ▷ Discutez enfin la dynamique à la transition. Quel est le temps de relaxation à la température critique?
3. Un système quantique à deux niveaux $\pm E_0$ se trouve en contact avec un bain à température T . Il est décrit par le hamiltonien,

$$H = -E_0\sigma_z + J\sigma_x,$$

avec σ_x, σ_z les matrices de Pauli ($E_0, J = \text{const}$). Utilisez E_0 comme unité d'énergie.

Trouvez la matrice de l'opérateur densité

$$\rho = \frac{e^{-H/T}}{\text{Tr}e^{-H/T}}$$

À l'aide des matrices ρ et H , calculez l'énergie moyenne E , et la fluctuation d'énergie ΔE :

$$E = \langle H \rangle, \quad \Delta E^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

Discutez les limites de basse et haute température de ΔE .

Formule utile : soient a un nombre et \mathbf{n} un vecteur unité, donc on a :

$$e^{a\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cosh a\sigma_0 + \sinh a\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

Physique Statistique
Physics master—October 2018
Alberto Verga

1. (2p) What is the number of arrangements of N objects in S boxes? Compute this number in the case $N = 3$ and $S = 3$.
2. (2p) Define the probability density of a real random variable.
3. (2p) Two random variables x and y are identically distributed. Show that the characteristic function of the *sum* $x + y$ is the *product* of the characteristic function of each variable.
4. (4p) The outcome of an experiment is X with probability p . What is the probability of exactly n results X in N repetitions of the same experiment? Think about the Bernoulli process.
5. (4p) At each time unit step, a particle moves one unit to the right with probability $1/2$ or to the left also with probability $1/2$. Calculate the probability that after t time steps, the position of the particle be x . Think to use the preceding exercise.
6. (4p) Compute the characteristic function $\langle e^{-ikx} \rangle$ of the gaussian distribution:

$$f(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$$

7. (2p) The *characteristic function* of the random variable x is,

$$g(k) = \frac{1}{1 + k^2}.$$

Calculate the mean and variance of x . (Note: you do not need to know the probability distribution.)

8. (6p) Use the maximum entropy principle to find the velocity distribution $f(v)$ of a particle taking into account that the mean is constrained by $\langle |v| \rangle = c$ (where c is a known constant). Remember that the entropy is given by,

$$S[f] = - \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \ln f(v).$$

9. (6p) Two level system at energy E (microcanonical). A solid material contains N magnetic impurities; each impurity can have an energy $\pm\Delta$ depending on their spin. Calculate the entropy $S(E, N)$.
10. (8p) Two level system at fixed temperature T (canonical). We consider a gas of two level atoms of energy Δ or $-\Delta$ (One neglects the other degrees of freedom). Calculate the partition function and the free energy. Deduce the energy and the specific heat. Discuss the system's behavior at temperatures close to zero.
11. (6p) Ideal gas. Calculate the partition function of an ideal gas and deduce the state equation.

12. (6p) System of N oscillators. Calculate the partition function in the canonical ensemble of a set of N oscillators whose energy is,

$$H = \sum_x \epsilon_x, \quad x = 1, \dots, N$$

where

$$\epsilon_x = \hbar\omega(n_x + 1/2), \quad n_x = 0, 1, \dots$$

Use the Boltzmann statistics $\sim e^{-\epsilon_x/T}$.

Physique Statistique
Master de physique—octobre 2018
Alberto Verga

- (2 points) De combien de façons on peut ranger N objets dans S boîtes ? Calculez en particulier le nombre d'arrangements pour $N = 3$ et $S = 3$.
- (2 points) Définissez la densité de probabilité d'une variable aléatoire réelle.
- (2 points) On a deux variables aléatoires indépendantes x et y distribuées selon la même loi. Montrez que la fonction caractéristique de la somme de variables aléatoires $z = x + y$ est le produit des fonctions caractéristiques.
- (4 points) Une expérience a une probabilité p de donner le résultat X . Donnez la probabilité qu'après N répétitions de l'expérience on obtienne exactement n résultats X . Pensez au processus de Bernoulli.
- (4 points) À chaque unité de temps, une particule fait un pas d'une unité vers la droite avec probabilité $1/2$ ou vers la gauche avec une probabilité identique. Quel est la probabilité qu'après t pas de temps la particule se trouve en x . Pensez à utiliser l'exercice précédent.
- (4 points) Calculez la fonction caractéristique $\langle e^{-ikx} \rangle$ de la distributions gaussienne :

$$f(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$$

- (2 points) La fonction caractéristique d'une variable aléatoire x est,

$$g(k) = \frac{1}{1 + k^2}.$$

Calculez la moyenne et la variance de x . (Note : vous n'avez pas besoin de connaître la distribution de probabilité.)

- (6 points) Utilisez le principe du maximum de l'entropie pour trouver la distribution de vitesses $f(v)$ d'une particule avec la contrainte sur la valeur moyenne : $\langle |v| \rangle = c$ (c est une constante connue). Rappelez vous que l'entropie est donnée par

$$S[f] = - \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) \ln f(v).$$

- (6 points) Système à deux niveaux d'énergie E (microcanonique). Un solide contient N impuretés magnétiques ; selon leur spin elles occupent un niveau d'énergie Δ ou $-\Delta$. Calculez l'entropie $S(E, N)$.
- (8 points) Système à deux niveaux, à température T (canonique). Un gaz contient des atomes dont les niveaux d'énergie sont $-\Delta$ et Δ (On néglige les autres degrés de liberté). Calculez la fonction de partition, et l'énergie libre. Déduisez l'énergie et la chaleur spécifique. Discutez le comportement à température proche de zéro.
- (6 points) Gaz parfait. Calculez la fonction de partition d'un gaz parfait et déduisez l'équation d'état.

12. (6 points) Système d'oscillateurs. Calculez la fonction de partition canonique d'un ensemble de N oscillateurs dont l'énergie est donnée par,

$$H = \sum_x \epsilon_x, \quad x = 1, \dots, N$$

où

$$\epsilon_x = \hbar\omega(n_x + 1/2), \quad n_x = 0, 1, \dots$$

Utilisez la statistique de Boltzmann $\sim e^{-\epsilon_x/T}$.

Statistical Physics
Physics master—December 2018
Alberto Verga

1. Fermions. A degenerate gas of free fermions of mass m and momentum $\hbar k$, at low temperature, has a finite density related to the fermi energy, ϵ_F . We are interested in the finite temperature correction of the chemical potential

$$\mu = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{\epsilon_F} \right)^2 \right]$$

Using,

$$n_k = \frac{1}{z^{-1}e^{\epsilon_k/T} + 1}, \quad z = e^{\mu/T}, \quad \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

for the number of fermions as a function of their energy ϵ_k (T the temperature), demonstrate that the density is at $T = 0$, given by,

$$\frac{N}{V} = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_k = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{3/2}.$$

In order to find the temperature correction, use the previous expression to show that,

$$\frac{N}{V} = \frac{2^{1/2}}{\pi^2} \left(\frac{mT}{\hbar^2} \right)^{3/2} I = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \left(\frac{T}{\epsilon_F} \right)^{3/2} I,$$

where the integral I , can be approximated by,

$$I = \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x + 1} \approx \frac{2}{3} (\ln z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} (\ln z)^{-1/2}.$$

2. Virial. The interactions of argon atoms in a classical gas is roughly approximated by the potential,

$$w(r) = \begin{cases} \infty & \text{if } r < r_0 \\ -\epsilon & \text{if } r \in (r_0, r_1) \\ 0 & \text{if } r > r_1 \end{cases},$$

where r is the interparticle distance, r_0 is the repulsion radius, and r_1 the range of the attractive energy, which is of the order of ϵ . Compute the second virial coefficient $B_2(T)$,

$$B_2(T) = 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \left(1 - e^{-w(r)/T} \right),$$

and discuss its behavior as a function of the temperature T .

Write the equation of state $PV = NT(1 + B_2N/V)$, in the van der Waals form,

$$(P + n^2a)(1 - nb) = nT, \quad n = N/V$$

and deduce the expression of the coefficients a and b .

3. Mean field. We want to investigate the behavior of the per site magnetization m of a ferromagnetic material, using a simple phenomenological model. We consider the ising hamiltonian

$$H = -J \sum_{\langle x,y \rangle} s_x s_y, \quad s_x = \{-1, 1\},$$

in a square lattice of dimension D , where the summation is over the nearest neighbors. The number of spins is N . Using a mean field approximation, find the effective hamiltonian, and show the existence of a phase transition between a low temperature ferromagnetic state and a high temperature paramagnetic state.

- Using $\delta s_x = s_x - \langle s_x \rangle$, expand the product $\delta s_x \delta s_y \approx 0$, and neglect second order terms to obtain an effective one particle hamiltonian:

$$H = zN J m^2 / 2 - z J m \sum_y s_y, \quad m = \langle s_x \rangle$$

where the mean magnetization m is position independent, and z is the number of neighbors. Remark that we retain the constant term, written using the definition of m .

- From the effective hamiltonian compute the partition function

$$Z(m, T, N) = e^{-KNm^2} (2 \cosh 2Km)^N, \quad K = zJ/2T.$$

- Calculate the free energy per particle $f = F/N$, and deduce the equilibrium magnetization from the condition of minimum of f and using a graphical representation.
- Use the limited expansion $\tanh x \approx x - x^3/3$ to find the critical temperature and the values of the magnetization near the phase transition. Discuss the results.
4. Landau free energy. Consider a magnetic system whose order parameter m (the magnetization) is invariant under the transformation $m \rightarrow -m$.
- Write the Landau function $f(m, h)$, where h is the external magnetic field in appropriated units. Justify.
- Describe the phase transition, plot the free energy for different values of the temperature. Show in particular how the phenomenological coefficients depend on the temperature (near the transition).
- Compute the characteristic exponents, around the phase transition, of the magnetization as a function of the temperature $m(T) \sim |T - T_c|^\beta$, for $h = 0$, and of the susceptibility $\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$.

Physique Statistique
Master de physique—décembre 2018
Alberto Verga

1. Fermions. La densité d'un gaz de fermions dégénéré, de masse m et impulsion $\hbar k$, est reliée à son énergie de fermi. Nous sommes intéressés par les corrections en température au potentiel chimique,

$$\mu = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{\epsilon_F} \right)^2 \right]$$

À partir de la formule,

$$n_k = \frac{1}{z^{-1}e^{\epsilon_k/T} + 1}, \quad z = e^{\mu/T}, \quad \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

du nombre de fermions en fonction de l'énergie ϵ_k (T est la température), démontrez qu'à $T = 0$, la densité est donnée par,

$$\frac{N}{V} = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_k = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{3/2}.$$

Afin d'obtenir la correction en température, utilisez l'expression précédente pour montrer que,

$$\frac{N}{V} = \frac{2^{1/2}}{\pi^2} \left(\frac{mT}{\hbar^2} \right)^{3/2} I = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \left(\frac{T}{\epsilon_F} \right)^{3/2} I,$$

où l'intégrale I , peut être approximée par,

$$I = \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x + 1} \approx \frac{2}{3} (\ln z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} (\ln z)^{-1/2}.$$

2. Viriel. L'interaction d'atomes d'argon en un gaz classique peut être schématiquement modélisée par le potentiel,

$$w(r) = \begin{cases} \infty & \text{if } r < r_0 \\ -\epsilon & \text{if } r \in (r_0, r_1) \\ 0 & \text{if } r > r_1 \end{cases},$$

où r est la distance entre les atomes, r_0 est le rayon de répulsion, et r_1 celui de la portée de l'énergie d'attraction, qui est de l'ordre ϵ . Calculez le second coefficient du viriel,

$$B_2(T) = 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \left(1 - e^{-w(r)/T} \right),$$

et discutez son comportement en fonction de la température T .

Écrivez l'équation d'état $PV = NT(1 + B_2N/V)$, sous la forme de van der Waals,

$$(P + n^2a)(1 - nb) = nT, \quad n = N/V$$

et déduisez l'expression des coefficients a et b .

3. Champ moyen. Nous souhaitons étudier le comportement de la magnétisation par site m d'un matériau ferromagnétique, en utilisant un modèle phénoménologique simple. On considère le hamiltonien de Ising,

$$H = -J \sum_{\langle x,y \rangle} s_x s_y, \quad s_x = \{-1, 1\},$$

dans un réseau carré de dimension D , où la somme porte sur les paires de proches voisins. Le nombre de spins est N . En utilisant l'approximation de champ moyen, trouvez le hamiltonien effectif et montrez l'existence d'une transition de phase entre un état basse température ferromagnétique et un état haute température paramagnétique.

- Soit $\delta s_x = s_x - \langle s_x \rangle$ la fluctuation de spin, développez le produit $\delta s_x \delta s_y \approx 0$, et négligez les termes quadratiques dans la fluctuation, pour obtenir le hamiltonien effectif :

$$H = zN J m^2 / 2 - z J m \sum_y s_y, \quad m = \langle s_x \rangle$$

où la magnétisation moyenne m est indépendante de la position, et z est le nombre de voisins. Remarquez qu'on a gardé le terme constant, qu'on a exprimé en fonction de m

- À partir du hamiltonien effectif calculez la fonction de partition :

$$Z(m, T, N) = e^{-KNm^2} (2 \cosh 2Km)^N, \quad K = zJ/2T.$$

- Calculez l'énergie libre par spin $f = F/N$, et déduisez la magnétisation d'équilibre en utilisant la condition de minimum de f et une construction graphique.
- Utilisez le développement limité $\tanh x \approx x - x^3/3$ pour trouver la température critique et les valeurs de la magnétisation près de la transition de phase. Discutez les résultats.
4. Énergie libre de Landau. On considère un système magnétique dont le paramètre d'ordre m est invariant vis à vis de la transformation $m \rightarrow -m$.
- Écrivez la fonction de Landau $f(m, h)$, avec h le champ magnétique appliqué (dans des unités appropriées). Justifiez.
- Décrivez la transition de phase; représentez graphiquement l'énergie libre pour différentes valeurs de la température (autour de la transition).
- Calculez les exposants critiques, autour de la transition, de la magnétisation comme fonction de la température $m(T) \sim |T - T_c|^\beta$, avec $h = 0$, et de la susceptibilité $\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$.

Physique Statistique
Physics master—October 2019

Alberto Verga

(Personal documents are allowed)

1. We consider a solution of lipid molecules in water. These molecules are formed by a hydrophilic head and a hydrophobic tail. Make a sketch of the different configuration these molecules may adopt in the volume and at the surface.

We assume two phases, one with the molecules diluted in the volume (V) and the other with the molecules forming a film on the surface (A) (interactions are neglected). Compute the grand partition function of the two phases V and A , taking into account that the molecule energy in the solution is ϵ_V and in the film is ϵ_A .

Demonstrate that at equilibrium the ratio of the number of the molecules on the surface N_A and in the volume N_V , is

$$\frac{N_A}{N_V} = \frac{A\lambda}{V} e^{(\epsilon_V - \epsilon_A)/T}$$

where λ is the thermal length. Discuss this result for different values of the energies. How do you interpret the presence of λ in the final formula?

2. The bose condensation is a macroscopic quantum phenomenon by which bosons at low temperature populate the ground level. Consider spinless free bosons of energy $\epsilon = p^2/2m$, mass m and momentum eigenvalues p . The partition function is,

$$Z(T, \mu, V) = \text{Tr} e^{-(\hat{H} - \mu\hat{N})/T} = \prod_p \left(1 - z e^{-\epsilon(p)/T}\right)^{-1}$$

where $z = e^{\mu/T}$ is the fugacity (μ is the chemical potential), T the temperature and V the gas volume; \hat{H} and \hat{N} are the hamiltonian and number operators. Form this formula demonstrate that the number of gas particles is given by,

$$N = \sum_p \frac{1}{z^{-1} e^{\epsilon(p)/T} - 1}.$$

Describe how the chemical potential does change when we lower the temperature, for fixed number of particles. Discuss the range of validity of this formula for the ground level $\epsilon = 0$.

Using an integral approximation of the sum, show that the number of particles in the excited levels is,

$$\frac{N_{\epsilon>0}}{V} = \frac{1}{\lambda^3} \text{Li}_{3/2}(z)$$

where,

$$\text{Li}_s(z) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt \frac{t^{s-1}}{z^{-1} e^t - 1}, \quad \text{Li}_s(1) = \zeta(s).$$

Find the value of the temperature $T = T_c$ for which the population of the ground level start to grow (condensation temperature). Justify.

Observe that $N = N_{\epsilon=0} + N_{\epsilon>0}$ (for $T < T_c$), and show that the number of particles in the ground level is,

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

Plot N_0 as a function of the temperature.

Physique Statistique
Final—Physics master—December 2019

Alberto Verga

(Personal documents are allowed)

1 Fermions

1. Demonstrate that the partition function of two identical free fermions Z_2 is given by,

$$Z_2 = \frac{1}{2} Z_1^2(V, T) - \frac{1}{2} Z_1(V, T/2),$$

where Z_1 is the partition function of one free fermion:

$$Z_1 = \frac{V}{\lambda^3}, \quad \lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mT}.$$

2. We assume now that for N particles we can write,

$$Z_N \approx \frac{Z_1^N}{N!} \left[1 - \frac{N Z_1(T/2)}{Z_1(T)^2} \right]^{N/2}.$$

Show that this approximation is correct if $\lambda^3 N \ll V$.

3. Using the Stirling formula,

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} \frac{N^N}{e^N},$$

find the free energy,

$$F = F_0 - \frac{TN}{2} \ln(1 - 2^{-3/2} \lambda^3 n), \quad n = N/V.$$

where F_0 is the ideal gas term.

4. Deduce the equation of state in the present approximation, and show that the ideal gas pressure is modified by a term,

$$\frac{\Delta P}{nT} \approx 2^{-5/2} \lambda^3 n.$$

Discuss this result.

(Remark: Remember that $-P = \partial F / \partial V$.)

2 Phase transition

The Landau free energy of a ferromagnetic material is,

$$F[m] = \int dx \left[\frac{\kappa}{2} \left(\frac{dm}{dx} \right)^2 + f(m) - Hm \right]$$

where,

$$f(m) = a(T)m^2 + bm^4,$$

and m is the one-dimensional magnetization.

2.1 Equilibrium

1. Find the equilibrium magnetization ($H = 0$), and show that with a convenient choice of $a = a(T)$, F describes the phase transition between paramagnetic and ferromagnetic states.
2. Demonstrate in particular that, near the transition temperature, the magnetization behaves as,

$$m \sim (T_c - T)^{1/2}.$$

3. Find, near the transition, the magnetization as a function of the magnetic field H ; deduce the susceptibility,

$$\chi = \left. \frac{dm}{dH} \right|_{H=0}, \quad (1)$$

and show that χ diverges at $T = T_c$; find the characteristic exponent of the divergence.

4. Show that, also at $T = T_c$, the magnetization is a power law of the magnetic field $m \sim H^\delta$, and find the exponent.
5. Make plots of $f(m)$ at different temperatures, and of $m(T)$ and $\chi(T)$ near the transition $T \approx T_c$.

2.2 Fluctuations

In the general case $H = H(x)$, demonstrate that the susceptibility satisfies the equation:

$$-\frac{d^2}{dx^2} \chi(x - x') + \xi(T)^{-2} \chi(x - x') = \frac{\delta(x - x')}{\kappa} \quad (2)$$

where ξ is a characteristic length.

1. To find (2), calculate near the transition,

$$0 = \left. \frac{\delta^2 F[m]}{\delta H(x') \delta m(x)} \right|_{H=0}.$$

2. Compute $\xi(T)$ for $T > T_c$ and $T < T_c$. Solve (2) to find,

$$\chi(x) = \frac{\xi(T)}{\kappa} e^{-|x|/\xi}. \quad (3)$$

Discuss this result, in particular for $T = T_c$.

3. Using (3), calculate the total susceptibility,

$$\chi = \int_0^\infty dx \chi(x),$$

and show that you recover the results (1).

Statistical Physics – Final Exam

Alberto Verga

17 December 2020

Duration: 1h30. Documents are not allowed.

Landau

The Landau free energy describing the phase transition of a ferromagnetic material is

$$f(m) = a(T)m^2 + bm^4$$

where m is the magnetization (dimensionless), T the temperature and a, b two parameters with the dimension of energy density. Using Landau theory plot the magnetization as a function of the temperature. Discuss its properties near the phase transition.

Potts model

The Hamiltonian of the Potts model, a generalization of the Ising model for q -levels atoms ($q \geq 2$), is written as

$$H = -J \sum_{x=1}^N \delta(s_x, s_{x+1}), \quad s_x = 1, \dots, q$$

where δ is the Kronecker symbol, for a one-dimensional system with periodic boundary conditions; J is a positive energy constant and N the number of atoms.

Find the partition function $Z(T, N)$ using the *transfer matrix* method.

- ◇ Find the transfer matrix V , and show that Z is given by

$$Z(T, N) = \text{Tr } V(T)^N$$

- ◇ Compute explicitly the complete set of eigenvalues $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ and the corresponding eigenvectors of the transfer matrix V .
- ◇ Show that the partition function depends only on the largest eigenvalue in the thermodynamic limit, and demonstrate that it can be written as

$$Z(T, N) = (e^{J/T} - 1 + q)^N$$

- ◇ Using the definition of the correlation length ξ in terms of the largest eigenvalues λ_1, λ_2 (with $\lambda_1 > \lambda_2$) of the transfer matrix:

$$\xi^{-1} = \ln(\lambda_1/\lambda_2)$$

analyse the behavior of $\xi = \xi(T)$ at high and low temperatures. Show that there is no phase transition at any finite temperature.

Statistical Physics – Final Exam

Alberto Verga

June 22, 2021

Duration: 2h. Documents are not allowed.

Fermion gas

A free fermion gas is confined in a two dimensional device. The mass of the particles is m and the states multiplicity is $g = 2$. The gas occupies an area L^2 .

- ◇ Compute the density of states $g(\epsilon)$ as a function of the energy ϵ and the area of the system (“volume” in two dimensions).
- ◇ Show a graph of $g(\epsilon)$ and discuss briefly the difference with the three dimensional case.
- ◇ Using the formula

$$N = \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{e^{(\epsilon-\mu)/T} + 1}. \quad (1)$$

calculate the number of fermions N as a function of the chemical potential μ and the temperature T .

- ◇ Show that the fermi energy $\epsilon_F = \mu(T = 0)$ is proportional to the density $n = N/L^2$.
- ◇ Find the chemical potential as a function of the temperature and the fermi energy.
- ◇ Discuss the low and high temperature limits.

Landau

The landau free energy describing the phase transition of a ferromagnetic material is

$$f(m) = a(T)m^2 + bm^4$$

where m is the magnetization (dimensionless), T the temperature and a, b two parameters with the dimension of energy density. Using landau theory plot the magnetization as a function of the temperature. Discuss its properties near the phase transition.

Potts model

The hamiltonian of the Potts model, a generalization of the ising model for q -levels atoms ($q \geq 2$), is written as

$$H = -J \sum_{x=1}^N \delta(s_x, s_{x+1}), \quad s_x = 1, \dots, q$$

where δ is the kronecker symbol, for a one-dimensional system with periodic boundary conditions; J is a positive energy constant and N the number of atoms.

Find the partition function $Z(T, N)$ using the *transfer matrix* method.

- ◊ Find the transfer matrix V , and show that Z is given by

$$Z(T, N) = \text{Tr } V(T)^N$$

- ◊ Compute explicitly the complete set of eigenvalues $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ and the corresponding eigenvectors of the transfer matrix V .
- ◊ Show that the partition function depends only on the largest eigenvalue in the thermodynamic limit, and demonstrate that it can be written as

$$Z(T, N) = (e^{J/T} - 1 + q)^N$$

- ◊ Using the definition of the correlation length ξ in terms of the largest eigenvalues λ_1, λ_2 (with $\lambda_1 > \lambda_2$) of the transfer matrix:

$$\xi^{-1} = \ln(\lambda_1/\lambda_2)$$

analyse the behavior of $\xi = \xi(T)$ at high and low temperatures. Show that there is no phase transition at any finite temperature.

Statistical Physics – Partial Exam

Alberto Verga

November 2021

Duration: 2h. Documents are not allowed.

Energy

Use the canonical partition function

$$Z(T, V) = \text{Tr} e^{-H/T} \quad (1)$$

where H is the system's hamiltonian and T is the temperature (in units of energy), to prove that

$$\langle H \rangle = E = T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = \frac{\partial(F/T)}{\partial(1/T)}, \quad F = -T \ln Z \quad (2)$$

where $F = F(T, V)$ is the helmholtz free energy.

Note: you may use formulas (1) and (2) in the following problems to compute, for instance, the thermodynamic energy E from the partition function Z .

Dielectric

A classical dielectric is characterized by its dipolar energy:

$$\epsilon_p(\theta) = -p\mathcal{E} \cos \theta \quad (3)$$

where \mathcal{E} is the applied electric field, and θ the angle of the dipolar moment \mathbf{p} .

(We are only interested in the thermodynamic properties that depend on the electric field.)

1. Compute the (configuration) partition function $Z = Z_1^N$ (N is the number of dipoles), where

$$Z_1 = \int_{\Omega} \frac{d\Omega}{4\pi} e^{-\epsilon_p(\theta)/T}, \quad d\Omega = \sin \theta d\phi d\theta \quad (4)$$

with Ω the solid angle.

2. Using the expression of the free energy $F = -NT \ln Z_1$, compute the dipolar energy per particle $e = E/N = \langle \epsilon_p \rangle$.
3. Show that the susceptibility is

$$\chi(T) = \frac{\partial \langle p \cos \theta \rangle}{\partial \mathcal{E}} = \frac{T}{\mathcal{E}^2} - \frac{p^2}{T} \sinh^{-2} \left(\frac{p\mathcal{E}}{T} \right) \quad (5)$$

4. Demonstrate that at high temperature the susceptibility satisfies the Curie law:

$$\chi(T) = \frac{P^2}{3T}. \quad (6)$$

Oscillators

Consider a set of N quantum harmonic oscillators (of frequency ω). Their energy levels are labeled by the integers n_i :

$$\epsilon_i = \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right), \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

where $i = 1, \dots, N$.

1. Explain in a sentence, the formula

$$Z = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots e^{-\frac{\hbar\omega}{T} \sum_i (n_i + \frac{1}{2})} \quad (8)$$

of the canonical partition function.

2. Compute Z using (8), and deduce the free energy

$$F = NT \ln \frac{1}{2} \sinh \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \quad (9)$$

3. Compute the thermodynamic energy and the heat capacity c_V (per particle).
4. Plot $c_V(T)$ as a function of T , and discuss its behavior at low and high temperatures. In particular, what might you expect from the equipartition of energy?
-

Formulas

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$
$$\frac{d \coth x}{dx} = -\frac{1}{\sinh^2 x}$$

Statistical Physics – Final Exam

Alberto Verga

December 2021

Duration: 3h. Documents are not allowed.

Fermion gas

A degenerate fermion electron gas is confined in two dimensions. Compute the chemical potential as a function of the temperature.

1. For a fermi gas, what is the condition of *low* temperature? Explain using a plot of the fermi distribution as a function of the particle's energy ϵ

$$n_\epsilon = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/T} + 1} \quad (1)$$

in the limit $T \rightarrow 0$. (*Hint*: observe that the limit depends on the sign of the exponent.)

2. Calculate the density of states $g(\epsilon)$, and show that it is independent of the energy ϵ .
3. Find the relation between the number N of electrons

$$N = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon)n_\epsilon, \quad (2)$$

and the chemical potential.

4. Deduce the chemical potential $\mu = \mu(T, N)$. Define the fermi energy by $\epsilon_F = \mu(0, N)$. How the fermi energy do depend on the density?
5. Discuss the behavior of the chemical potential at high and low temperatures. Give explicit asymptotics in both cases.

Ferromagnetism (mean field)

The dimensionless magnetization per site m in a spin lattice of N sites is given by the difference

$$m = \frac{N_+ - N_-}{N}, \quad N = N_- + N_+, \quad (3)$$

where N_- and N_+ are the number of spins down and up, respectively. We assume that the free energy $F(T, m) = Nf(T, m)$ of the material as a function of the magnetization is

$$f(T, m) = -\frac{zJ}{2}m^2 - Ts(m), \quad s(m) = \frac{S}{N}, \quad (4)$$

where z is the number of neighbors and J the exchange constant; S is the entropy. The first term takes into account the spin interactions.

1. Use the Stirling formula to compute the entropy

$$S = \ln \binom{N}{N_+}, \quad S = S(m), \quad (5)$$

and demonstrate that

$$s(m) = -p_- \ln p_- - p_+ \ln p_+, \quad p_{\pm} = \frac{1 \pm m}{2}. \quad (6)$$

2. Compute the equation of state $h = \partial f / \partial m$ in a field $h = h(m)$. Put $h = 0$ to obtain the implicit equation for m :

$$m = \tanh(zJm/T). \quad (7)$$

3. Show, using a graphical representation of formula (7), that for $T < T_c = zJ$ there are three possible values of the magnetization. What is the meaning of these magnetization values? Explain in terms of "order".
4. Assume now that $m \ll 1$, and show that the free energy becomes in this limit:

$$f(T, m) = f_0(T) + \frac{T - zJ}{2} m^2 + \frac{T}{12} m^4, \quad f_0(T) = -T \ln 2. \quad (8)$$

Plot $f(m) - f_0$ for different temperatures to explain the phase transition.

5. Find the behavior of the magnetization near the critical temperature T_c . Show that $m \sim (T_c - T)^\beta$, and give β . Plot $m = m(T)$.
-

Formulas

$$\begin{aligned} \ln(n!) &= n \ln n - n \\ \operatorname{artanh} x &= \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}, \quad \tanh(\operatorname{artanh} x) = x \\ \ln(1+x) &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n} \end{aligned}$$

Statistical Physics – Partial Exam

Alberto Verga

November 2022

Duration: 2h. Documents are allowed.

Bosons

1. Black Body. Use dimensional analysis to find the energy density of a gas of photons at temperature T (Stefan law). Apply the experimental fact that E/V only depends on T (E and V are the thermodynamic energy and volume of the black body).
2. Debye phonons. Use dimensional analysis to find the maximum energy ϵ_M a phonon can take in a solid of N atoms and volume V ; the sound velocity c_s is isotropic. (Hint: assume that the energy is a function of the density $n = N/V$.) Compute ϵ_M using the exact density of states. Compare the two results.

Rigid rotator

We consider a material formed in first approximation, by independent rotators of inertia moment I . We are interested in the low temperature limit and assume a Boltzmann distribution.

1. Write the hamiltonian of the set of *fixed* rotators.
2. Use dimensional analysis to determine the low temperature condition. (Hint: compare the temperature with a characteristic energy of a rotator.)
3. Write the exact expression of the one particle partition function and compute its low temperature expansion. (Remark: take into account the degeneracy of the angular momentum.)
4. Find the specific heat at low temperature.
5. Plot the specific heat as a function of the temperature. Discuss the result (compare with the classical expectation.)

van der Waals

Find the van der Waals equation of state of parameters a and b

$$(P + N^2 a/V^2)(V - Nb) = Nk_B T \quad (1)$$

where P is the pressure, V the volume, N the number of atoms and T the temperature (k_b is the Boltzmann constant), corresponding to the interaction energy

$$w(r) = \begin{cases} \infty & r < r_0 \\ -\epsilon & r_0 < r < r_1 \\ 0 & r > r_1 \end{cases} . \quad (2)$$

Here r_0, r_1 have the dimension of a length and $\epsilon > 0$ is an energy.

1. Plot w and explain the significance of the dimensional parameters appearing in its definition.
2. Compute the second virial coefficient:

$$B(T) = 2\pi \int_0^\infty r^2 dr [1 - e^{-w(r)/T}] . \quad (3)$$

3. Show that one can write

$$B(T) = v_0 - \frac{a(T)}{T}, \quad v_0 = \frac{2\pi r_0^3}{3}, \quad (4)$$

and demonstrate that $a(T)$ is independent of the temperature at high T .

4. Show how to obtain the excluded volume term and compute the van der Waals parameters a and b .

Statistical Physics – Final Exam

Alberto Verga

December 2022

Duration: 3h. Books and documents are allowed.

Fermi energy

The energy of an electron is given by

$$\epsilon_p = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}$$

where $p = |\mathbf{p}|$ is its momentum, m its mass, and c the speed of light.

1. Find the expression of the energy in the non-relativistic limit, and in the ultra-relativistic one (large momentum). Justify the approximations.

Consider now a degenerate gas of electrons at low temperature.

2. Plot the one fermion occupation number (n_ϵ) as a function of the energy (ϵ).
3. Give the definition of the fermi energy ϵ_F , and explain why it only depends on the number density $n = N/V$ (at zero temperature, $T = 0$; V is the gas volume, and N the number of particles).

Using *dimensional analysis*, find, in the low temperature limit, the fermi energy for

4. a non-relativistic degenerate gas of electrons
5. an ultra-relativistic degenerate gas of electrons; note that in this case the mass of the particle is irrelevant: explain why.

Virial expansion

The interaction energy of a real classical gas is given by

$$w(r) = \frac{A}{r^{12}}, \quad (1)$$

where A is a dimensional constant.

Apply the virial expansion

$$PV = NT \left[1 + \frac{N}{V} B(T) \right], \quad (2)$$

where P is the gas pressure, V the volume, N the number of molecules, and T the temperature in units of energy (the boltzmann constant is taken to be one, $k_B = 1$), and

$$B(T) = 2\pi \int_0^\infty r^2 dr [1 - e^{-w(r)/T}], \quad (3)$$

to show that the equation of state can be written in the form:

$$P(V - Nb) = NT. \quad (4)$$

Discuss the limit of high temperature.

Hint. The exact value of b is

$$b = \frac{2\pi}{3} \Gamma(3/4) \left(\frac{A}{T}\right)^{1/4}.$$

Phase transition

Show that, within the Landau theory, the correlation length $\xi = \xi(T)$ of a magnet, satisfies a power law:

$$\xi \sim |T - T_c|^{-1/2} \quad (5)$$

at the paramagnetic-ferromagnetic transition temperature T_c .

Consider the simple case where the Landau free energy is

$$F[m, h] = \int dx \left[\frac{\kappa}{2} \left| \frac{\partial m}{\partial x} \right|^2 + a(T)m^2 + bm^4 - hm \right], \quad (6)$$

where $m = m(x)$ is the magnetization order parameter, $h = h(x)$ the applied field (both dependent on the position x), and κ , a and b are phenomenological parameters.

Start by finding the equilibrium magnetization as a function of the temperature $\langle m \rangle(T)$ (for $h = 0$). Then study the longitudinal fluctuations ϕ of m defined by:

$$m = \langle m \rangle + \phi(x).$$

Expand the free energy up to second order in ϕ , and, using their fourier transform $\phi_k = \phi(k)$, demonstrate that the susceptibility is in this approximation, given by

$$\chi(k) = \frac{2}{\kappa} \frac{\xi^2}{1 + (\xi k)^2}. \quad (7)$$

Discuss the limit $k = 0$ corresponding to the homogeneous system. Plot, in this case, the susceptibility as a function of the temperature, $\chi = \chi(T)$, near the transition temperature T_c .

Hint. The formula for the susceptibility in fourier space is,

$$\left. \frac{\delta \phi_q}{\delta h_k} \right|_{h=0} = \chi(k) \delta(k - q)$$

and the equilibrium condition leads to the identity:

$$\left. \frac{\delta}{\delta h_k} \frac{\delta F}{\delta \phi_q^*} \right|_{h=0} = 0.$$

Statistical Physics – Partial Exam

Alberto Verga

November 2023

Duration: 2h. Documents are not allowed.

Diatomic molecule

Using dimensional analysis and simple physical arguments, plot the specific heat c_V of a gas of diatomic molecules as a function of the temperature T .

In order to determine the relevant dimensional parameters, take into account the *translation*, *rotation*, and *vibration* degrees of freedom of the molecules:

- kinetic energy $P^2/2M$, where P is the total momentum and $M = 2m$ is the molecule mass,
- rotation energy $L^2/2I$, where L is the angular momentum and I the inertia momentum,
- vibration energy $m\omega^2 x^2/2$, where ω is the oscillator frequency and x the position.

Thermionic emission

Electrons in a metal at temperature T can escape the surface energy barrier $-W$ if their velocity p_z/m (perpendicular to the surface) satisfies $p_z > \sqrt{2mW}$ (m is the electron mass and \mathbf{p} its momentum). Using the Fermi-Dirac distribution n_ϵ show that the thermionic current is

$$j = \frac{em(k_B T)^2}{2\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{W - \epsilon_F}{k_B T}\right) \quad (1)$$

where ϵ_F is the fermi energy.

Use units such that $e = W = m = \hbar = k_B = 1$. Assume that typical particle energies are larger than W (otherwise emission is impossible). Compare the quantum result with the classical one.

You may follow the steps:

- To find the units of mass M , length L and time T use the dimensional parameters (e, W, m, \hbar, k_B). Show, in particular, that the unit of current density is

$$j = [env] = e \frac{mW^2}{\hbar^3}$$

- Plot the fermi distribution of the electrons (spin 1/2):

$$n_\epsilon = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/T} + 1}, \quad \epsilon = \epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m},$$

as a function of the energy ϵ and specify the fermi energy ϵ_F .

- To find (1) use the general formula for the current density of charged particles moving with momentum $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$,

$$\mathbf{j} = ge \int \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} n_{\epsilon_p},$$

where g is the multiplicity of the energy states, and the integral runs over the available momenta.

- Useful integral

$$\int_0^\infty dx \frac{1}{ae^x + 1} = \ln(1 + 1/a).$$

- Make a diagram of the energy scales and justify the fact that we can replace the chemical potential by the fermi energy and then expand the logarithm $\ln(1 + x) \approx x$, for small x .
- To estimate the classical current use the thermal velocity. Explain this choice.

Statistical Physics – Final Exam

Alberto Verga

December 2023

Duration: 3h. Documents are allowed.

Dimensional Analysis

The interaction energy V of Argon atoms is given by the Lennard-Jones potential

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}, \quad A, B = \text{const.}$$

where r is the distance between two atoms.

1. Plot $V(r)$ and identify the characteristic binding energy ϵ and the corresponding characteristic length r_0 .
2. Find the expression of ϵ and r_0 in terms of the dimensional parameters A and B .

Virial Expansion: van der Waals

1. Calculate the second virial coefficient $B(T)$,

$$B(T) = 2\pi \int_0^\infty r^2 dr (1 - e^{-w(r)/T}),$$

of a gas whose interaction energy $w(r)$ is,

$$w(r) = \begin{cases} \infty, & r < r_0, \\ -\epsilon \frac{r_0^6}{r^6}, & r > r_0, \end{cases}$$

where ϵ is the energy minimum and r_0 a distance, in the limit of *high temperature* T (keep only the first relevant term). Explain the approximation.

2. Using the previous result, demonstrate that the equation of state

$$PV = NT \left[1 + B(T) \frac{N}{V} \right]$$

leads to the van der Waals equation

$$\left(P + a \frac{N^2}{V^2} \right) (V - Nb) = NT.$$

Find the expression of a and b in terms of the interaction parameters ϵ and r_0 .

Ising model, Bethe approximation

The Ising model, on a lattice of N sites, each with q neighbors, is defined by the classical hamiltonian

$$H = -J \sum_{\langle x,y \rangle} s_x s_y, \quad s_x \in \{-1, 1\},$$

where the exchange constant J is positive, and the sum runs over the set of near neighbors (x, y) (Fig. 1). In the *Bethe approximation* one considers the “cluster” around s_0 with hamiltonian

$$H(s_0) = -J s_0 \sum_y s_y - h \sum_y s_y = H_c, \quad y = 1, \dots, q,$$

where h is the cluster (self-consistent) mean-field. We define the probability of a configuration s of the $q + 1$ spins in the cluster, by

$$P[s] = \frac{e^{-H_c[s]/T}}{Z}, \quad Z = \sum_{s_0} \sum_{\{s_y\}} e^{-H_c[s]/T} \quad (1)$$

where $y = 1, \dots, q$. We are interested in the study of near neighbors correlations.

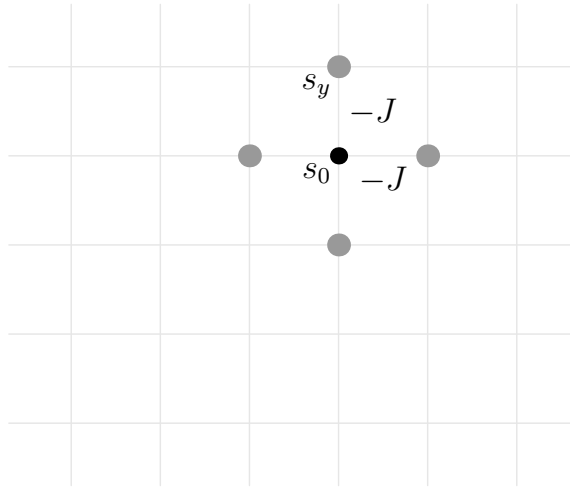


Figure 1: Bethe cluster in a square lattice ($q = 4$).

1. We start by the study of the phase transition using the Landau free energy

$$f(m, B) = a(T)m^2 + bm^4 - mB$$

where a and b are phenomenological parameters, m is the magnetization (order parameter corresponding to $\langle s_x \rangle$ in the mean field approximation), and B is the applied magnetic field, to find the characteristic exponents β and δ defined by

$$m \sim (T_c - T)^\beta,$$

and

$$m \sim B^\delta,$$

near the phase transition temperature $T \approx T_c$. This description remains valid in the Bethe approximation for T close to T_c .

2. Next, we investigate the cluster configurations. Using that $\langle s_0 \rangle = \langle s_y \rangle$ deduce the self-consistent equation for h

$$\frac{\cosh \frac{J+h}{T}}{\cosh \frac{J-h}{T}} = \exp\left(\frac{2}{q-1} \frac{h}{T}\right).$$

3. Calculate the configuration probability $p(1) = P[s_0 = 1]$ of the spin s_0 to be up (+1), and show that it can be written as

$$p(1) = \frac{1}{2} \frac{e^{2h/T} + e^{-2J/T}}{\cosh(2h/T) + e^{-2J/T}}.$$

(Hint: Demonstrate the equality $\cosh((J+h)/T) + e^{-2h/T} \cosh((J-h)/T) = e^{(J-h)/T} [\cosh(2h/T) + e^{-2J/T}]$.)

4. Using the expression of

$$p(s_0, s_1) = P[s_0 = \pm 1, s_1 = \pm 1],$$

the configuration probability of the pair (s_0, s_1) , which is deduced from (1) by summing over the configurations of the remaining $y = 2, \dots, q$ spins, compute the probabilities $p(1, 1)$, $p(1, -1)$, $p(-1, 1)$, and $p(-1, -1)$. Show in particular that

$$p(1, 1) = \frac{1}{2} \frac{e^{2h/T}}{\cosh(2h/T) + e^{-2J/T}}.$$

5. Deduce from the previous results the formula

$$\frac{p(1, 1)p(-1, -1)}{p(1, -1)p(-1, 1)} = e^{4J/T}.$$

Discuss briefly this result (think about the probability to find two neighbors aligned).

6. The thermodynamic energy of the ising system can be written in terms of p :

$$E(h, T) = -2qNJ \left[p(1, 1) - p(1) + \frac{1}{4} \right].$$

Show that

$$E(h, T) = \frac{qNJ}{2} \frac{\cosh(2h/T) - e^{2J/T}}{\cosh(2h/T) + e^{-2J/T}}.$$

7. Consider the disordered state $h = 0$ (for temperatures higher than the critical one T_c). Calculate $E(0, T)$ and deduce the heat capacity $C_V(T)$ ($T > T_c$).