Oblig 2 - FYS2160

Bjørn Magnus Hoddevik

(Dated: September 17, 2022)

EINSTEIN CRYSTAL

Seksjon B

a) Mulige tilstander:

3	0	0
0	3	0
0	0	3
1	2	0
1	0	2
2	1	0
0	1	2
2	0	1
0	2	1
1	1	1

b) Sjekker $\Omega(3,3) = \frac{)=(3+3-1)!}{3!(3-1)!} = \frac{120}{6\cdot 2} = 10$, som stemmer.

c) Mulige tilstander:

A			B		
	0	5		0	1
	5	0		0	1
	0	5		1	0
	5	0		1	0
	1	4		0	1
	4	1		0	1
	1	4		1	0
	4	1		1	0
	2	3		0	1
	3	2		0	1
	2	3		1	0
	3	2		1	0

d) $q = q_A + q_B = 6$ gir oss mulighetene:

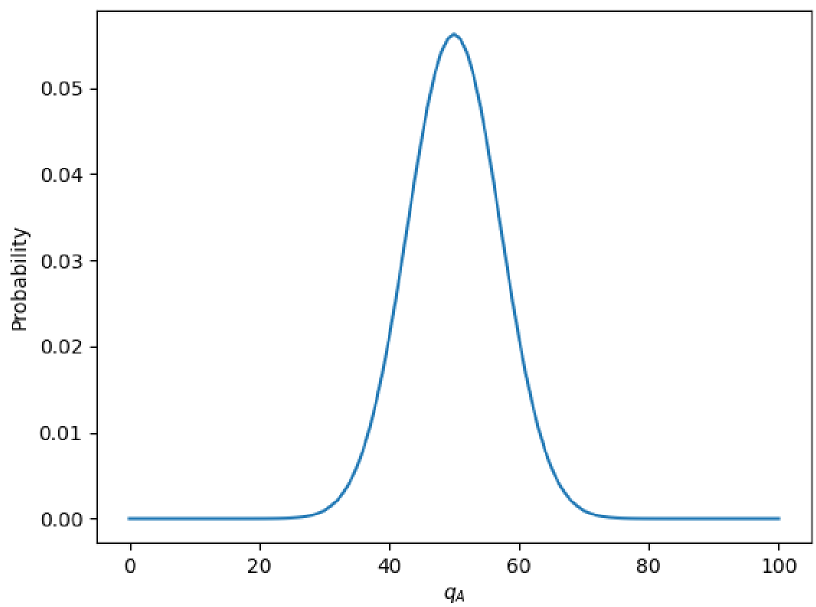
q_A		q_B	
	0		6
	1		5
	2		4
	3		3
	4		2
	5		1
	6		0

e) Fra programmet:

```
Probability of microstates where qa=6.0 is 1/7
Probability of microstates where qa=5.0 is 1/12
Probability of microstates where qa=4.0 is 1/15
Probability of microstates where qa=3.0 is 1/16
Probability of microstates where qa=2.0 is 1/15
Probability of microstates where qa=1.0 is 1/12
Probability of microstates where qa=0.0 is 1/7
Total amount of microstates 84.0
```

f) Før de kommer i kontakt er det kun 7 microstates, mens etterpå er det 84. Det betyr at variansen er mye mindre. Ettersom de utspredte tilstandene har større vekt, som er synlig fra hvor lav sannsynligheten er for $q_a = 3$, som tilsvarer et høyt antall tilstander hvor $q_a = 3$.

g) Fra programmet ser vi at rundt microstatesene rundt $q_A = q_B = 50$ har høyest sjanse, $p = 5.62\%$:



Seksjon C

a) Vi begynner med å seperere uttrykket:

$$\ln \Omega(N, q) = \ln (q + N - 1)! - \ln (q!) - \ln (N - 1)! \tag{1}$$

Videre bruker vi at $\ln x! = x \ln (x) - x$:

$$\ln (q + N - 1)! - \ln (q!) - \ln (N - 1)! = (q+N-1) \ln (q + N - 1 - q - N + 1 - q \ln (q) + q - (N-1) \ln (n - 1 - N + 1$$

Vi ser at vi kan stryke vekk de ikke-logaritmiske leddene. I samme sleng trekker vi sammen de logaritmiske leddene så godt som mulig

$$(q + N - 1) \ln q + N - 1 - q \ln (q) - (N - 1) \ln (n - 1 = q \ln \left(\frac{q + N - 1}{q}\right) + (N - 1) \ln \left(\frac{q + N - 1}{N - 1}\right)$$

$$q \ln \left(\frac{q + N - 1}{q}\right) + (N - 1) \ln \left(\frac{q + N - 1}{N - 1}\right) = q \ln \left(\frac{N - 1}{q} + 1\right) + (N - 1) \ln \left(\frac{q}{N - 1} + 1\right)$$

Videre har vi at siden $N >> 1$, så kan vi approksimere $N - 1 \approx N$.

$$q \ln \left(\frac{N - 1}{q} + 1\right) + (N - 1) \ln \left(\frac{q}{N - 1} + 1\right) = q \ln \left(\frac{N}{q} + 1\right) + N \ln \left(\frac{q}{N} + 1\right)$$

Vi har også at $N/q << 1$, som kan brukes sammen med at $\ln(x+1) \approx x$ for $x << 1$. Dette er nyttig for $q\ln\left(\frac{N}{q}+1\right) = q(N/q) = N$.

$$q\ln\left(\frac{N}{q}+1\right) + (N)\ln\left(\frac{q}{N}+1\right) = N + N\ln\left(\frac{q}{N}+1\right)$$

Til slutt bruker vi at $N/q << 1$ gir oss $1 << q/N$, og kan dermed forenkle $N\ln\left(\frac{q}{N}+1\right) = N\ln(q/N)$, og vi ender opp med

$$N + N\ln\left(\frac{q}{N}+1\right) = N(\ln\left(\frac{q}{N}\right)+1)$$

b) Vi har at $s = k_B \ln(\Omega)$, dermed får vi uttrykket:

$$s(N,q) = k_B N(\ln\left(\frac{q}{N}\right)+1)$$

c) Temperatur er definert som $T = \partial U/\partial s$, i vårt tilfelle er $U = q\epsilon$

$$T = \frac{1}{\frac{\partial s}{\epsilon \partial q}}$$
$$T = \frac{1}{-k_B N \frac{1}{q\epsilon}}$$
$$T = \frac{q\epsilon}{-k_B N}$$

SPIN

B

a) Vi kan beskrive multiplisiteten til en makrotilstand ved:

$$\Omega(N,n) = \frac{N!}{(N-n)!n!}$$

Så for å finne total antall mikrotilstander må vi summere over denne funksjonen for alle n. N er antall partikler og siden vi kun har to tilstander kan vi velge n til å være n antall partikler med parallel eller ikke-parallel spinn. Vi får funksjonen:

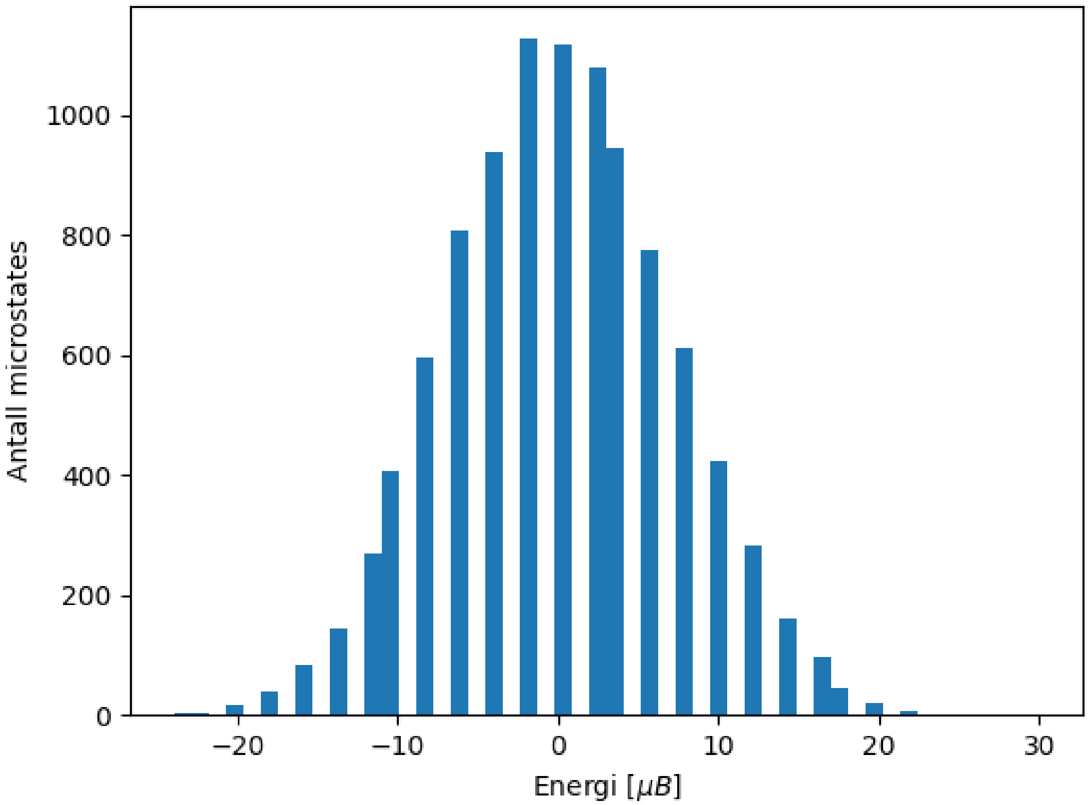
$$\sum_{n=0}^{N} \Omega(n) = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{(N-n)!n!} = 2^N$$

Det vil si at det er 2^N antall mikrotilstander i et N-spinn system.

b) Vi vet at energien til en partikkel er $E = -S\mu B$, hvor $S = +1$ tilsvarer parallel, og $S = -1$ tilsvarer anti-parallel. Energien til alle partikler hvor $S = +1$ er $E_+ = -\mu B S_+$, og for $S = -1$ er $E_- = \mu B S_-$. Total energien er da $E = E_+ + E_-$:

$$E_+ + E_- = -\mu B S_+ + \mu B S_- = -\mu B(S_+ - S_-), \quad s = \frac{S_+ - S_-}{2}$$
$$E = -2s\mu B$$

c) Får histogrammet under når jeg deler opp i 50 søyler:



d) Vi går tilbake til multiplisiteten til en gitt makrotilstand fra tidligere:

$$\Omega(N, n) = \frac{N!}{(N-n)!n!}$$

Vi vil alltid ha at likningen $S_+ + S_- = N$ er tilfredsstilt. I dette tilfelle er $n = S_+$, da er $N - n = S_+ + S_- - S_+ = S_-$. Setter vi dette inn i funksjonen over får vi:

$$\Omega(N, S_+) = \frac{N!}{S_-!S_+!}$$

e) Vi har at $2s = S_+ - S_-$. Det gir oss $S_+ = 2s + S_-$. Da har vi at

$$\Omega(N, S_+) = \frac{N!}{S_-!(2s + S_-)!}$$

Videre kan vi bruke at $N = S_+ + S_-$, ved å sette inn $S_+ = 2s + S_-$ får vi at $N = 2s + 2S_-$. Til slutt kan vi skrive dette om til $S_- = N/2 - s$, vi setter dette inn i likningen over:

$$\Omega(N, n) = \frac{N!}{(\frac{N}{2} - s)!(2s + \frac{N}{2} - s)!} = \frac{N!}{(\frac{N}{2} - s)!(\frac{N}{2} + s)!}$$

Som er det samme utrykket som i oppgaven

f) Med $N >> 1$ og $s << N$ tilfredstiller vi kravene for et stort system og kan bruke formelen fra forelesning 8 side 10:

$$\Omega(N, x) = 2^N e^{-\frac{2x^2}{N}}$$

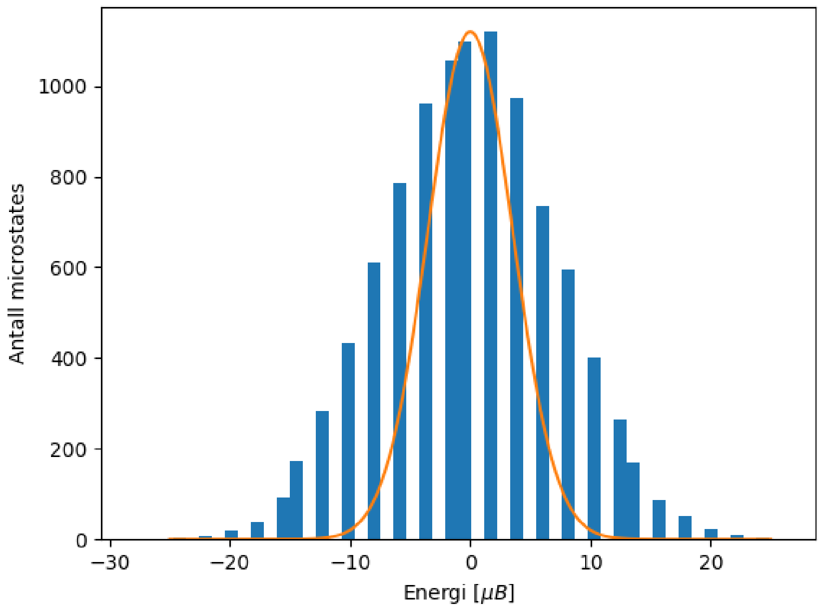
For oss er $x = s$ og vi får

$$\Omega(N, s) = 2^N e^{-\frac{2s^2}{N}}$$

Setter vi inn $s = 0$ får vi $\Omega(N, 0) = 2^N e^0 = 2^N$. Dermed

$$\Omega(N, s) = \Omega(N, 0) e^{-\frac{2s^2}{N}}$$

g) Plotter funksjonen over normalisert og deretter skalert for å få samme maks verdi som histogrammet:



Vi ser her at utrykket vårt for å finne den teoretiske fordelingen ikke stemmer godt overens med simuleringen. Dette kan være et resultat av flere ting. Måten jeg viser frem simuleringen kan være feilaktig. Måten jeg simulerer kan være vektet feil, slik at jeg ikke ender opp med en normal fordeling.

h) Vi har at entropi er definert som

$$s = k_B \ln \Omega(N, n)$$

Her er $n = S_+$. Det gir oss:

$$s = -k_B N \ln(2) \frac{2s^2}{N}$$

Til slutt bruker vi at $S_+ = N/2 + s$ (hvor s er total spinn) som kan skrives som $s = N/2 - S_+$, som gir oss:

$$s(N, S_+) = -k_B N \ln(2) \frac{N - 2S_+}{N}$$
$$s(N, S_+) = -k_B \ln(2)(N - 2S_+)$$

i) Vi har at

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial s}{\partial U}$$

Vi bruker hintet $\frac{\partial s}{\partial U} = \frac{\partial s}{\partial S_+}\frac{\partial S_+}{\partial U}$. Vi begynner å derivere $s(N, S_+)$ med hensyn til S_+:

$$\frac{\partial s}{\partial S_+} = \frac{\partial}{\partial S_+}(-k_B \ln(2)(N - 2S_+)$$
$$\frac{\partial s}{\partial S_+} = -k_B \ln(2)(-2)$$
$$\frac{\partial s}{\partial S_+} = 2k_b \ln(2)$$

Vi bruker nå, fra tidligere, at $U = E = -2s\mu B$, skrevet om til, $U = -(N-2S_+)\mu B$. Vi deriverer U med hensyn på S_+:

$$\frac{\partial U}{\partial S_+} = \frac{\partial}{\partial S_+}(-(N - 2S_+)\mu B)$$
$$\frac{\partial U}{\partial S_+} = 2\mu B$$

Da står vi igjen med likningen:

$$\frac{1}{T} = 2k_b \ln(2)\frac{1}{2\mu B}$$
$$T = \frac{\mu B}{k_b \ln(2)}$$

Vi ender altså opp med utrykket $T = \frac{\mu B}{k_b \ln(2)}$ for temperatur T.

KODE

Einstein krystall

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def factorial(x):
    if x!=0 and x!=1:
        return x*factorial(x-1)
    else:
        return 1

def omega(N, q):
    return factorial(N - 1 + q)/factorial(q)/factorial(N-1)

#lar deg velge selv, enklere  eksprimentere
q = int(input("q="))
Na = int(input("Na="))
Nb = int(input("Nb="))

choice = input("Letter of task (e, g)?\n")
if choice =="e":
    omega_array_a = np.zeros(q+1)
    omega_array_b = np.copy(omega_array_a)
    qa_array = np.copy(omega_array_a)

    for i in range(q+1):
        omega_array_a[i] = omega(Na, q-i)
        if Nb != 0:
            omega_array_b[i] = omega(Nb, i)
        else:
            omega_array_b[i] = 1
        qa_array[i] = q-i

        print(f"Probability of microstates where qa={qa_array[i]} is 1/{omega_array_a[i]*omega_array_b[i]:.0f}")


    plt.plot(qa_array, omega_array_a)
    plt.plot(qa_array, omega_array_b)
    plt.show()
```

```
    print(f"Total amount of microstates {sum(omega_array_a*omega_array_b)}")

if choice =="g":
    a = 1
    omega_array_a = np.zeros(q+1)
    omega_array_b = np.copy(omega_array_a)
    qa_array = np.copy(omega_array_a)

    for i in range(q+1):
        omega_array_a[i] = omega(Na, q-i)
        if Nb != 0:
            omega_array_b[i] = omega(Nb, i)
        else:
            omega_array_b[i] = 1
        qa_array[i] = q-i

    probability_distribution = omega_array_a*omega_array_b/sum(omega_array_a*omega_array_b)
    print(f"The most likely state has a probability of {max(probability_distribution)}")
    #plt.plot(qa_array, omega_array_a/sum(omega_array_a))
    #plt.plot(qa_array, omega_array_b/sum(omega_array_b))
    plt.plot(qa_array, probability_distribution)
    plt.xlabel(r"$q_A$")
    plt.ylabel(r"Probability")
    plt.show()
```

Spinn

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import random

M = 10000
N = 50

E = np.zeros(M)
sm = np.copy(E)
sp = np.copy(E)

for i in range(M):
    #coin-flip
    s = [random.randint(0, 1) for j in range(N)]
    #antiparallel spinn
    sm[i] = s.count(0)
    #parallel spinn
    sp[i] = s.count(1)
    #regner energi
    E[i] = sp[i] - sm[i]

s = np.linspace(-N, N, M)/2

#finner fordelingen analytisk
def Omega(N, s):
    return 2**N*np.exp(-2*s**2/N)


bins = 50

#gjr det mulig  se begge to samtidig
distribution = Omega(N, s)
normalized_distribution = distribution/max(distribution)
scaled_distribution =  normalized_distribution*max(np.histogram(E, bins)[0])

plt.hist(E,bins, rwidth=2)
plt.plot(s, scaled_distribution)
plt.xlabel(r"Energi $[\mu B]$")
plt.ylabel("Antall microstates")
plt.show()
```