



Departamento de Física
Universidade Federal de Pernambuco

Exame Geral de Doutorado

Segundo semestre de 2016

Mecânica Estatística

10/08/2016 - 9:00 às 12:00

(Escolha três dentre as quatro questões.)

Questão 1: Termodinâmica

Uma caixa isolada contém gases ideais divididos por uma partição. Eles estão distribuídos da seguinte forma: à esquerda, n mols de gás ocupam um volume V , à temperatura T e pressão P_i ; à direita existem também n mols de gás, à mesma temperatura T , mas contidos num volume αV , onde α é um parâmetro de escala.

- (a) (20%) Encontre a pressão final do novo equilíbrio, P_f , após a partição ser desativada, em função de P_i e α . Verifique seu resultado para o caso particular $\alpha = 1$ e comente.
- (b) (40%) (i) Supondo que os gases inicialmente em lados diferentes são de espécies distintas, mostre que a variação de entropia ΔS , obtida quando a partição é desativada e o sistema alcança o novo estado de equilíbrio, é dada por

$$\Delta S = nR \ln \left(\frac{(1 + \alpha)^2}{\alpha} \right).$$

- (ii) Para o caso particular $\alpha = 1$, compare ΔS com o valor observado para a variação de entropia na expansão isotérmica de n mols de um gás ideal por duplicação de volume. Comente este resultado particular.
- (c) (40%) Calcule a variação de entropia $\Delta S'$ nesse processo de mistura, na suposição de que os gases ideais, inicialmente nos compartimentos distintos, sejam de uma mesma espécie. Comente o caso particular $\Delta S'(\alpha = 1)$. Use para a entropia de n mols de um gás ideal num volume V e temperatura T , $S = nR [\ln(V/n) + (3/2) \ln T + \text{constante}]$.

Questão 2: Ensemble Canônico

Considere um paramagneto ideal formado por N partículas localizadas com spin $1/2$, que não interagem entre si. Quando sujeito a um campo magnético externo B , uniforme e constante, o hamiltoniano deste sistema é dado por:

$$\mathcal{H} = -\gamma B \sum_{j=1}^N \sigma_j,$$

onde γ é uma constante e $\sigma_j = \pm 1$.

- (a) (20%) Calcule a função de partição canônica para este sistema e mostre que ela pode ser escrita como $Z = Z_1^N$, onde Z_1 é a função de partição para uma única partícula.
- (b) (20%) Obtenha a energia livre por partícula deste sistema no limite termodinâmico.
- (c) (20%) Calcule a expressão para a entropia por partícula. Quanto vale a entropia nos limites $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$? Interprete estes resultados.
- (d) (20%) Obtenha a energia média total (energia interna) $\langle E_j \rangle$ deste sistema.
- (e) (20%) Calcule as flutuações para a energia total deste sistema, $\sigma_E = \sqrt{\langle E_j^2 \rangle - \langle E_j \rangle^2}$, e mostre como as flutuações relativas representadas por $\sigma_E / \langle E_j \rangle$ se comportam no limite termodinâmico.

Dados do problema:

$$\langle E_j \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

$$\langle E_j^2 \rangle - \langle E_j \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = -\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E_j \rangle$$

$$\frac{d}{dx} \cosh(x) = \sinh(x) \quad ; \quad \frac{d}{dx} \sinh(x) = \cosh(x) \quad ; \quad \frac{d}{dx} \tanh(x) = \frac{1}{\cosh^2(x)}$$

Questão 3: Gases Ideais Quânticos

Considere um gás ideal de N férmions de massa m contidos em um volume V em um banho térmico à temperatura T .

- (a) (20%) Mostre que neste sistema a função densidade de estados $D(\epsilon)$ de uma partícula com energia ϵ , sem considerar a multiplicidade de spin, é dada por

$$D(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2}.$$

- (b) (30%) Calcule a energia de Fermi deste sistema.
- (c) (20%) Calcule a energia média por partícula u deste sistema no limite de temperatura $T \rightarrow 0$.
- (d) (30%) Calcule a pressão deste gás de férmions para a temperatura $T \rightarrow 0$ em função da densidade do gás (N/V). Interprete seu resultado comparando-o com a pressão esperada para gases clássicos à temperatura zero.

Embora não necessárias, as seguintes expressões podem ser úteis:

$$\begin{aligned} \Xi &= \prod_j \sum_{n_j} e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n_j}, \\ \ln \Xi &= \gamma \int_0^\infty D(\epsilon) \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}) d\epsilon, \\ \ln \Xi &= \frac{2}{3} \frac{U}{kT}, \\ \Phi &= -PV = -kT \ln \Xi, \\ N &= \gamma \int_0^\infty D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \\ U &= \gamma \int_0^\infty \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \end{aligned}$$

onde Ξ é a grande função de partição, $f(\epsilon)$ é a distribuição de Fermi-Dirac e γ é a multiplicidade de estados de spin.

Questão 4: Sistemas Interagentes

Considere um sistema interagente de N moléculas num volume V mantidas à temperatura T , pressão P e descritas pela equação de van der Waals

$$\left(P + A \left(\frac{N}{V}\right)^2\right) (V - BN) = NkT,$$

onde A e B são constantes positivas.

- (a) (25%) Usando como referência a equação de estado dos gases ideais $PV = NkT$, interprete fisicamente a equação de van der Waals.
- (b) (25%) A função de partição deste sistema pode ser aproximada por

$$Z = \frac{1}{h^3 N!} \left\{ \int \exp \left[-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + U \right) \right] d\vec{p} d\vec{r} \right\}^N,$$

onde $N!$ considera a indistinguibilidade das partículas, $d\vec{p}$ e $d\vec{r}$ são elementos de volume nos espaços tridimensionais de momentos e coordenadas e $U = U(\vec{r})$ é uma energia potencial efetiva que cada molécula sente devido às demais. A função Z pode ser aproximada por

$$Z' = \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{3/2} \exp(-\beta \langle U \rangle) \right]^N,$$

onde $\langle U \rangle$ é uma constante representando a média de U . Justifique a forma da equação acima para Z' .

- (c) (25%) Como existem $N(N-1)/2 \approx N^2/2$ pares de moléculas, a energia potencial média total do sistema é $N \langle U \rangle \approx N^2 \langle u \rangle / 2$, onde u é a energia de interação entre um par de moléculas. Considere o modelo descrito por

$$u = \begin{cases} -\mu \left(\frac{r_{min}}{r} \right)^s & , \quad r > r_{min}; \\ \infty & , \quad r < r_{min}, \end{cases}$$

onde $\mu > 0$ e $s > 3$. Mostre que

$$\langle U \rangle = -CN/V,$$

explicitando a constante C em termos de μ , r_{min} e s .

- (d) (25%) Usando Z' dada no item (b), juntamente com o resultado de (c), encontre a equação de estado desse gás a partir de $P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z'}{\partial V}$.

Dado: $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$