



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física

Exame Geral de Doutorado
Primeiro Semestre de 2017

Mecânica Estatística

08/03/2017 - 09:00 às 12:00 h

(Escolha três dentre as quatro questões)

QUESTÃO 1 — TERMODINÂMICA

Neste problema estudaremos a variação de temperatura sofrida por 1 mol de um gás em uma expansão adiabática livre. Como modelo, adotaremos a equação de van der Waals para 1 mol de um gás contido em um recipiente de volume V , à temperatura T e pressão P :

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT, \quad (1)$$

onde R é a constante dos gases, enquanto que a e b são duas constantes empíricas.

- (a) (30%) A partir das diferenciais da energia interna $U = U(T, V)$ e da entropia $S = S(U, V)$, mostre que para um sistema termodinâmico qualquer vale a relação

$$dS = \frac{C_V}{T}dT + \frac{1}{T} \left[P + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T \right] dV, \quad (2)$$

onde C_V é a capacidade calorífica a volume constante.

- (b) (30%) Com a equação anterior e a diferencial da energia livre $F = F(T, V)$, mostre que

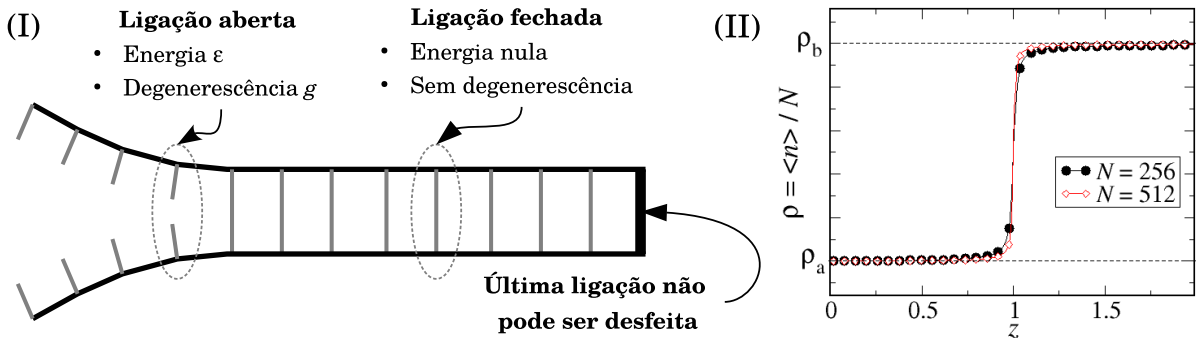
$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \quad (3)$$

e obtenha $\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T$ para 1 mol de um gás de van der Waals.

- (c) (20%) Determine $U = U(T, V)$ para 1 mol de um gás de van der Waals admitindo que sua capacidade calorífica seja constante.
- (d) (10%) Determine a mudança de temperatura do gás de van der Waals quando ele sofre uma expansão adiabática livre de um volume V_0 para um volume $2V_0$.
- (e) (10%) Justifique o resultado anterior usando as variáveis microscópicas do sistema e a dinâmica associada ao modelo de van der Waals.
-

QUESTÃO 2 – ENSEMBLES ESTATÍSTICOS

O “modelo do zíper” é um modelo simplificado para a separação de uma molécula de DNA em duas cadeias poliméricas. O modelo consiste em duas linhas conectadas através de N ligações, veja a ilustração na Fig. (I). Uma ligação desfeita tem energia ε e degenerescência g , enquanto que uma ligação fechada tem energia nula e não é degenerada. A última ligação da direita não pode ser quebrada.



- (a) (30%) Escreva a energia e a degenerescência de um sistema com n ligações desfeitas e mostre que a função de partição do sistema, Z , para uma temperatura T é dada por

$$Z = \frac{1 - z^N}{1 - z}, \quad (4)$$

onde $z \equiv ge^{-\beta\varepsilon}$, com $\beta = 1/k_B T$ e k_B é a constante de Boltzmann.

- (b) (30%) Mostre que o número médio de ligações desfeitas $\langle n \rangle$ pode ser escrito como $\langle n \rangle = z \frac{d}{dz} \ln Z$ e determine $\langle n \rangle$ em função de z .
- (c) (20%) O sistema exibe uma transição de fase em função da temperatura no limite $N \rightarrow \infty$. Este comportamento é sugerido pela densidade de ligações desfeitas $\rho \equiv \frac{\langle n \rangle}{N}$ em função de z mostrado na Fig. (II). Determine os valores de ρ_a e ρ_b indicados na figura (II) para $N \rightarrow \infty$.
- (d) (20%) Determine a temperatura de transição T_t e o valor da degenerescência g para o qual não há transição. Discuta de forma qualitativa a ordem da transição e o comportamento da energia livre de Helmholtz $F(T, N)$ e de sua derivada em $T = T_t$.

QUESTÃO 3 – GÁS IDEAL DE FÉRMIONS

Considere um gás ideal de férmions de spin $1/2$ em duas dimensões com relação de dispersão $\varepsilon_p = c|\vec{p}|$, onde $c > 0$ e \vec{p} é o momento linear da partícula. O sistema está confinado em uma região de área A e mantido a uma temperatura T e com potencial químico μ .

- (a) (30%) Obtenha a densidade de estados $D(E)$, onde E é a energia.
- (b) (40%) Usando a densidade de estados e a função de Fermi-Dirac, mostre que a energia interna pode ser escrita como

$$U = 2Nk_B T \frac{f_3(\lambda)}{f_2(\lambda)},$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, $\lambda = e^{\mu/(k_B T)}$, N é o número de partículas e

$$f_\alpha(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\alpha-1}}{z^{-1}e^x + 1},$$

com $\Gamma(\alpha)$ sendo a função gama.

- (c) (20%) Obtenha U pelo formalismo da mecânica estatística clássica.
- (d) (10%) Mostre que para baixas densidades e/ou altas temperaturas temos que $\lambda \ll 1$ e use a propriedade $f_\alpha(z) \simeq z$ para $z \ll 1$ para verificar que os resultados dos itens (b) e (c) coincidem.

Dado:

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt; \quad x > 0$$

QUESTÃO 4 – SISTEMAS FORTEMENTE INTERAGENTES

Considere uma liga binária de cobre e zinco com composição 50% para cada componente e admita que os átomos ocupam sítios em uma rede cúbica. Definindo as variáveis n_{iA} e n_{iB} de modo que $n_{iA} = 1$ ($n_{iB} = 1$) se um átomo do tipo A (B) ocupa o sítio i e zero de outra forma, então podemos escrever $n_{iA} = (1 + \sigma_i)/2$ e $n_{iB} = (1 - \sigma_i)/2$, onde $\sigma_i = \pm 1$. O hamiltoniano do sistema é dado por

$$\mathcal{H} = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j,$$

onde ε é a energia efetiva de acoplamento e $\langle i, j \rangle$ denota primeiros vizinhos. Na aproximação de campo médio, a matriz densidade do sistema tem a forma de um produto tensorial

$$\rho = \prod_{i \in A} \rho_i \prod_{j \in B} \rho_j,$$

onde

$$\rho_i = \begin{pmatrix} p_+ & 0 \\ 0 & p_- \end{pmatrix}; \quad \rho_j = \begin{pmatrix} p_- & 0 \\ 0 & p_+ \end{pmatrix},$$

onde p_{\pm} são probabilidades e portanto $p_+ + p_- = 1$.

- (a) (50%) Defina a variável $x = p_+ - p_-$ e use ρ para calcular a energia interna $U(x)$ e a entropia $S(x)$ do sistema.
 - (b) (30%) Determine a equação para a variável x que estabelece o equilíbrio do sistema.
 - (c) (20%) Obtenha a temperatura de transição T_c entre as fases desordenada e ordenada.
-