



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física

Exame Geral de Doutorado
Segundo Semestre de 2018

Mecânica Estatística

08/08/2018 - 09:00 às 12:00

(Escolha três dentre as quatro questões)

QUESTÃO 1: TERMODINÂMICA

- (a) (40%) Numa transformação infinitesimal reversível a troca de calor dQ entre 1 mol de um gás e o meio exterior pode se expressar de duas formas:

$$dQ = A_1 dT + A_2 dV \quad \text{ou} \quad dQ = B_1 dT + B_2 dp,$$

onde A_1 , A_2 , B_1 e B_2 são coeficientes calorimétricos, enquanto que T , V e p são, respectivamente, temperatura, volume e pressão. A partir das variações infinitesimais da entropia dS nos processos acima, mostre que os coeficientes A_2 , B_2 estão relacionados a $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$ ou $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$. Identifique os coeficientes A_1 e B_1 e mostre que estão relacionados à capacidade calorífica.

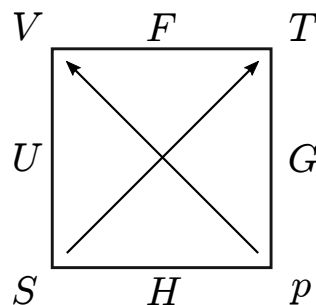
- (b) (30%) Suponha que o gás seja real, com equação de estado dada por $p(V-b) = RT$, onde R é a constante dos gases perfeitos e b uma constante. Calcule $C_p - C_v$, onde C_p e C_v são as capacidades caloríficas a pressão e volume constantes respectivamente.

Sugestão: Lembre que $V(T, p)$, portanto $dV = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T dp$.

- (c) (30%) Obtenha as expressão para dU e dH para o gás real, onde U e H são a energia interna e a entalpia respectivamente. Compare o resultado com aqueles esperados para um gás ideal.

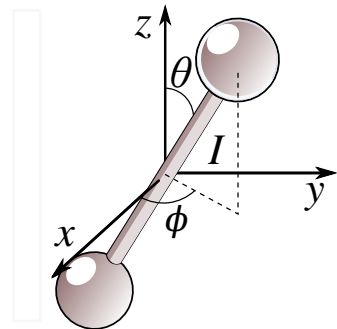
Dados:

O quadrado de Born abaixo pode ser utilizado para obter as relações de Maxwell:



QUESTÃO 2: ENSEMBLE CANÔNICO CLÁSSICO

Um gás diluído de N moléculas diatômicas polares, de momento de inércia I , momento de dipolo elétrico μ_E e ocupando um volume V , encontra-se na presença de um campo elétrico externo \mathbf{E} . Cada molécula pode ter sua orientação completamente descrita pelos ângulos polar θ e azimutal ϕ , como mostra a figura. O campo externo é paralelo ao eixo z , de modo que a parte rotacional do hamiltoniano relacionado ao movimento de cada molécula e sua interação com o campo externo é dada por



$$\mathcal{H} = \frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{p_\phi^2}{2I \sin^2 \theta} - \mu_E E \cos \theta,$$

onde p_θ e p_ϕ são os momentos canônicos conjugados a θ e ϕ respectivamente.

- (a) (40%) Calcule a parte rotacional da função de partição canônica do sistema em função das grandezas dadas no enunciado, da temperatura T e da constante de Boltzmann k_B .
- (b) (20%) Obtenha contribuição do movimento rotacional da molécula para a energia livre e o calor específico, quando sujeita ao campo externo \mathbf{E} .
- (c) (40%) Calcule a polarização média $\langle P \rangle$ na direção z de um meio composto por tais moléculas polares. Encontre $\langle P \rangle$ para $\mu_E E \ll k_B T$.

Dados:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \text{para } \alpha > 0,$$

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots$$

QUESTÃO 3: ESTATÍSTICA DE BOSE-EINSTEIN E FÔNONS

Um estado macroscópico é definido por um conjunto de números de partículas N_1, N_2, \dots, N_n nos estados $i = 1, 2, \dots, n$. A probabilidade $W(N_1, N_2, \dots, N_n)$ de uma tal partição para partículas indistinguíveis que obedecem à estatística de Bose-Einstein é dada por:

$$W_{BE} = \prod_{i=1}^n \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i! (g_i - 1)!},$$

onde g_i é a degenerescência do i -ésimo estado.

- (a) (25%) A partir da condição de equilíbrio $\frac{\partial}{\partial N_i} \ln W = \frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}$, onde ε_i , μ e k_B são a energia do i -ésimo estado, o potencial químico e a constante de Boltzmann respectivamente, obtenha o número de partículas N_i^0 no i -ésimo estado quando o sistema se encontra em equilíbrio. Admita que $N_i + g_i \gg 1$.

- (b) (25%) Considere $S = \frac{U}{T} - \frac{N\mu}{T} + \frac{\Omega}{T}$, onde $\Omega(T, \mu, V)$ é o grande potencial. Compare esta expressão com $S = k_B \ln W$ e mostre que $\Omega = k_B T \sum_i g_i \ln(1 - e^{-(\varepsilon_i - \mu)/k_B T})$ para um sistema de partículas que obedecem à estatística de Bose-Einstein. Admita que $N_i + g_i \gg 1$ e use os resultados do item anterior.

- (c) (25%) No modelo de fônons podemos determinar as propriedades termodinâmicas dos sólidos a partir das propriedades do gás de fônons. Deduza uma expressão geral para a capacidade calorífica a volume constante, C_v , sabendo que para $\mu = 0$ a energia livre de Helmholtz $F = \Omega$.

Sugestão: Use a relação de Helmholtz $U = -T^2 \frac{\partial F}{\partial T}$.

- (d) (25%) O momento linear e a energia de um fônon são dados por $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ e $\varepsilon = \hbar \omega$ respectivamente, com uma dada relação de dispersão $\omega = \omega(\mathbf{k})$. Determine a densidade de estados $g(k)$ e escreva C_v na forma de uma integral em \mathbf{k} . Em seguida calcule o limite de C_v para $T \rightarrow \infty$, sabendo que $\int g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = N$ onde N é número de átomos de um cristal de volume V . Levando em conta que existem três tipos de fônons, compare o resultado com o valor esperado de C_v para um gás clássico.

Dados:

$$\log n! \sim n \log n - n \quad \text{para } n \rightarrow \infty$$

QUESTÃO 4: GÁS IDEAL DE FERMI

Considere um gás ideal não-relativístico em d dimensões (com $d = 1, 2, 3$), constituído por N elétrons livres de massa m em uma caixa de lados L no limite termodinâmico.

- (a) **(30%)** Calcule a densidade de estados do gás ideal, $D(\varepsilon)$ em termos de ε (a energia do estado quântico de uma partícula), m , L , \hbar e d .
 - (b) **(20%)** Encontre a energia de Fermi ε_F em termos de N , m , L , \hbar e d . Use este resultado para reescrever $D(\varepsilon)$ em termos de ε_F , N e d .
 - (c) **(20%)** Para $T = 0$ K, calcule a energia interna por elétron do gás ideal, U/N , em função de d e ε_F .
 - (d) **(30%)** Para $d = 2$, obtenha a dependência com a temperatura T do potencial químico, $\mu(T)$.
-