

Universidade Federal de Pernambuco

Departamento de Física

**Exame Geral de Doutorado**

Primeiro Semestre de 2024

**Mecânica Estatística**

27/02/2024 - 09h00 às 12h00

(Escolha três dentre as quatro questões.)

(Não escreva seu nome na prova. Informe apenas o CPF.)

**QUESTÃO 1 – ENERGIA LIVRE DE HELMHOLTZ E GÁS DE VAN DER WAALS**

- (a) (40%) A partir da definição da energia livre de Helmholtz de um sistema termodinâmico,  $F = U - TS$ , onde  $U$  é a energia interna,  $T$  é a temperatura absoluta e  $S$  a entropia, mostre que  $dF = -p dV - S dT$ , onde  $p$  é a pressão e  $V$  é o volume. Demonstre também as seguintes relações:

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T \quad ; \quad S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad \text{e} \quad \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T .$$

- (b) (20%) A equação de estado de um mol de um gás de van der Waals é dada por  $(p + a/V^2)(V - b) = RT$ . Considere que o gás sofre uma expansão isotérmica reversível desde o volume  $V_1$  até o volume  $V_2$ . Usando a relação  $dF = -p dV - S dT$ , calcule a variação da energia livre de Helmholtz para o gás de van der Waals nesse processo.
- (c) (40%) Mostre que o resultado do item (b) pode ser explicado por duas contribuições: (i) calor recebido  $Q = \int_1^2 T dS$  e (ii) variação da energia interna  $\Delta U = \int_1^2 dU(t, V)$ , onde os limites de integração 1 and 2 correspondem aos estados inicial e final do processo termodinâmico. Calcule cada contribuição separadamente, considerando variações isotérmicas. Discuta fisicamente.
-

**QUESTÃO 2 – ENSEMBLE CANÔNICO E DISTRIBUIÇÃO DE BOLTZMANN**

Na descrição em termos de um ensemble canônico à temperatura  $T$ , a função de partição de um gás monoatômico ideal clássico composto de  $N$  átomos de massa  $m$  é

$$Z_N \equiv \int \prod_{i=1}^N d\mathbf{p}_i d\mathbf{q}_i \rho_N, \quad \text{onde} \quad \rho_N = \frac{1}{N! h^{3N}} e^{-\beta H},$$

sendo  $H(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$  a hamiltoniana do gás,  $\{\mathbf{q}_i\}$  e  $\{\mathbf{p}_i\}$  são, respectivamente, as posições e os momenta de cada átomo e  $\beta = 1/(k_B T)$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

(a) (30%) Considere que a função de partição pode ser escrita na forma fatorizada  $Z_N = Z_1^N/N!$ , onde  $Z_1$  é a função de partição do gás com um único átomo. Calcule  $Z_1$  e escreva a função de partição  $Z_N(T, V)$  do gás ideal.

(b) (25%) A probabilidade de que um átomo do gás se encontre na posição  $\mathbf{q}$  com momento  $\mathbf{p}$  é dada por  $\mathcal{P}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \rho_1/Z_1$ . A integral desta função sobre o volume do recipiente fornece a distribuição de momentos,  $f(\mathbf{p}) \equiv \int_V d\mathbf{q} \mathcal{P}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ .

Calcule o valor médio do momento ao quadrado,  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle \equiv \int d\mathbf{p} f(\mathbf{p}) \mathbf{p}^2$ , em função da temperatura.

(c) (25%) Use o resultado do item (b) e a equação de estado do gás ideal para obter uma fórmula para a pressão  $P$  em termos de  $\langle \mathbf{v}^2 \rangle = \langle \mathbf{p}^2 \rangle/m^2$ , ou seja, do valor médio da velocidade dos átomos do gás.

(d) (20%) Considere o ar como sendo um gás monoatômico cujas moléculas têm uma massa  $m$  aproximadamente igual à massa do nitrogênio. Com isso, a massa total de  $N = 6 \times 10^{23}$  moléculas de ar é  $Nm \approx 30 \times 10^{-3}$  kg. À pressão ambiente,  $P = 10^5$  Pa, as  $N$  moléculas ocupam um volume  $V \approx 2 \times 10^{-2}$  m<sup>3</sup>.

Usando o resultado do item (c), calcule a ordem de grandeza da velocidade média dos átomos do ar.

**Dados:**

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(u-\beta)^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}, \quad \text{para } \alpha, \beta \text{ complexos e } \text{Re}\{\alpha^2\} > 0.$$

Relação útil:

$$I_n = \int_0^{\infty} dx x^{2n} e^{-\lambda x^2} = \frac{(-1)^n}{2} \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

**QUESTÃO 3 – ESTATÍSTICA DE BOSE-EINSTEIN**

Considere um gás ideal de  $N$  bósons de massa  $m$  e sem spin em um volume  $V$ .

(a) (25%) Definimos

$$\frac{N}{V} = \frac{N_0}{V} + \frac{N_e}{V},$$

onde  $N_0/V$  e  $N_e/V$  denotam, respectivamente, as densidades de partículas no estado fundamental e nos estados excitados. Determine  $N_0/V$  em termos da fugacidade  $z = e^{\beta\mu}$  e de  $V$ , onde  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura absoluta e  $\mu$  é o potencial químico.

(b) (25%) Considere, agora, a fase condensado de Bose-Einstein a temperaturas  $T \leq T_0$ , onde  $T_0$  é a temperatura de Bose-Einstein, com a razão  $N/V$  fixa no limite termodinâmico e  $\mu \rightarrow 0$ .

Calcule  $N_e/V$ . Deixe sua resposta em função de  $m$ ,  $\hbar$ ,  $k_B$ ,  $T$  e da integral adimensional

$$A = \int_0^\infty \frac{u^{1/2} du}{e^u - 1}.$$

(c) (25%) Sabendo que

$$\frac{N}{V} = \frac{A}{(2\pi)^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T_0)^{3/2},$$

obtenha a razão  $N_e/N$  na fase condensado de Bose-Einstein. Deixe seu resultado em função da razão  $T/T_0$ .

(d) (25%) Usando o resultado do item (c) e a expressão para  $N/V$  do item (a), calcule a razão  $N_0/N$  na fase condensado de Bose-Einstein. Deixe sua resposta em função da razão  $T/T_0$ . Interprete o resultado obtido.

---

**QUESTÃO 4 – SISTEMA DE PARTÍCULAS INTERAGENTES**

Um conjunto de  $N$  partículas de cargas positivas e  $N$  partículas de cargas negativas, indistinguíveis, clássicas, de massa  $m$ , é confinado em uma caixa bidimensional de área  $A = L^2$ , e encontra-se à temperatura  $T$ . O hamiltoniano do sistema é

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \sum_{i<j}^{2N} q_i q_j \ln |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$$

onde as cargas elétricas são  $q_i = q_0$  para  $i = 1 \dots N$  e  $q_i = -q_0$  para  $i = N + 1 \dots 2N$ , e  $\{\mathbf{x}_i\}$  e  $\{\mathbf{p}_i\}$  representam as coordenadas e os momenta das partículas, respectivamente.

(a) (20%) O termo de interação aparece uma vez para cada par de partículas e não há termos de auto-interação. Determine quantos pares têm interação atrativa e quantos têm interação repulsiva.

(b) (30%) A função de partição deste sistema é

$$Z = \frac{1}{h^{4N} (N!)^2} \int \prod_i^{2N} d^2 \mathbf{p}_i d^2 \mathbf{x}_i e^{-\beta H(\mathbf{p}_i, \mathbf{x}_i)}.$$

Calcule as integrais sobre os momenta e reescreva a contribuição das coordenadas na forma de um produto envolvendo potências de  $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ . Use a identidade  $e^{\ln \alpha} = \alpha$ .

(c) (30%) Sem calcular as integrais em  $\{\mathbf{x}_i\}$ , reescale as coordenadas:  $\mathbf{x}'_i = \mathbf{x}_i/L$  para obter a dependência de  $Z$  com a área,  $A = L^2$ . Mostre que  $Z \propto A^{2N - \beta q_0^2 N/2}$ .

(d) (20%) Calcule a pressão (bidimensional) deste gás e comente seu comportamento em altas e baixas temperaturas.

**Dado:**

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(u-\beta)^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}, \quad \text{para } \alpha, \beta \text{ complexos e } \text{Re}\{\alpha^2\} > 0.$$