

# Prova - Mecânica Estatística , IFUSP 2º semestre 2016

Nestor Caticha

25 de novembro de 2016

Esta lista é parte fundamental dos requisitos para ser aprovado no curso. Use folhas separadas para cada pergunta. Grampeie as folhas e coloque o nome e numero USP. Data de entrega: 8 de dezembro de 2016. A prova deve ser feita de forma individual. E deve ser feita: não basta mostrar o resultado final sem mostrar passos intermediários.

**0.** Responda: Você fez esta prova individualmente? Se não responder ou responder que não terá nota zero nesta pergunta. Se responder que sim, terá nota 1 nesta questão. A soma dos pontos das perguntas abaixo será multiplicada pela nota desta pergunta. Essa será a nota final desta prova ( a lista tem peso 3 e esta prova peso 7).

**1. Variações sobre a equipartição.** Considere um sistema clássico, com graus de liberdade descritos pelas variáveis  $q_1, \dots, q_i, \dots, q_n$  e hamiltoniano  $\mathcal{H}$ . Suponha que seja satisfeita a relação  $a \leq q_i \leq b$ , com paredes rígidas tal que  $\mathcal{H}(q_i = a) = \mathcal{H}(q_i = b) = \infty$ . Escreva a função de partição e integre por partes a coordenada  $q_i$ . (a) Mostre a generalização da equipartição:

$$\left\langle q_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right\rangle = T$$

onde a média é feita com respeito à distribuição canônica. (b) Obtenha o resultado para o caso  $\mathcal{H} = \sum_i c_i q_i^\alpha$ . (c) A variável  $q_i$  do item anterior também pode ser um momento. (d) Este exercício dá, então se  $\alpha = 2$ , o resultado para o gás ideal clássico. Considere agora (e) o caso relativístico  $\mathcal{H} = \sum_i E_{p_i}$ , com  $E_p = c(p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2 + m^2 c^2)^{1/2}$  e mostre que

$$\left\langle \frac{mu^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \right\rangle = 3T$$

(lembre que  $p_x = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}}$ , com  $u^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2$ ). A energia cinética por partícula é

$$E_c = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} - mc^2$$

portanto, expandido em potências de  $c^{-2}$ , teremos

$$\langle E_c \rangle = \frac{3}{2}T + mc^2(a_1 \langle \frac{u^4}{c^4} \rangle + a_2 \langle \frac{u^6}{c^6} \rangle \dots)$$

Calcule  $a_1$ .

## 2. Equivalência de Ensembles

Considere um sistema com graus de liberdade coletivamente denotados por  $\mathbf{x}$  e sua distribuição canônica  $P(\mathbf{x}|\beta) = \exp(-\beta\mathcal{H}(\mathbf{x}))/Z(\beta, N)$ . A relação entre a função de partição e a energia livre de Helmholtz é  $Z(\beta, N) = \exp(-\beta F)$ , com  $F = \langle \mathcal{H} \rangle - \beta^{-1}S_{can}$ . Escreva uma relação exata entre a entropia no ensemble canônico  $S_{can}$  e uma integral sobre a energia. A transformação da expressão da função de partição canônica como uma integração sobre  $\mathbf{x}$  para uma integral sobre a energia leva ao aparecimento de  $\Omega(E, N)$  a integral sobre os graus de liberdade como o vínculo que  $\mathcal{H}(\mathbf{x}) = E$ . Qual é a relação entre  $\Omega(E, N)$  e a entropia  $S_{mc}(E, N)$  no ensemble microcanônico. Como feito em aula, argumente sob que condições a diferença entre as duas entropias  $S_{mc}(E, N)$  e  $S_{can}$  é "pequena". Quantifique "pequena".

Agora faça o mesmo para o ensemble grande-canônico e compare as entropias nos três ensembles.

## 3. Correções quânticas à pressão

A função de partição (FP) grande-canônica (GC) de um gás ideal quântico é dada por

$$\log \Xi(T, V, \mu) = \pm \sum_j \log \left( 1 \pm e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)} \right) \quad (1)$$

(3A) Discuta o critério para aproximar a soma sobre os estados  $j$  de partícula única por uma integral. Devemos ter  $k_B T \gg (\hbar^2/2m)(2\pi/V^{1/3})^2$ . Coloque números razoáveis e veja o que significa supor a temperatura muito alta. Esta condição não é a mesma que deve ser satisfeita para que sistemas de férmions ou bósons se comportem da mesma forma: o limite clássico.

(3B) Para que o sistema se encontre no regime chamado limite clássico devemos ter que a atividade  $z$  deve satisfazer  $z = \exp(\mu/k_B T) \ll 1$ . Encontre as correções em primeira ordem em  $z$  à função de partição GC.

(3C) Relacione a FP GC com a pressão e escreva a pressão como

$$pV = Nk_B T(1 + az) \quad (2)$$

expandindo até primeira ordem na atividade  $z$ . Encontre  $a$  para FD e BE e diga qual é o sinal para férmions.

(3D) Discuta o significado dos sinais acima. Perceba que a interpretação não é trivial. Queremos saber se as correções à pressão são devidas a interações efetivamente atrativas ou repulsivas. A expressão que encontramos mostra a mudança da pressão a  $(T, V, \mu)$  constantes devido às correções quânticas. Queremos encontrar a mudança a  $(T, V, N)$  constantes. Não é a mesma coisa: o sinal da correção muda. Para isso considere a energia livre  $F(T, V, N) = -\frac{1}{\beta} \log \Xi + \mu N = \Phi + \mu N$ . A correção aos potenciais clássicos, mantidas as quantidades apropriadas constantes, devem ser iguais <sup>1</sup>  $\delta F = \delta \Phi$ , de onde  $F = F_{class} + \delta F$ . Usando  $p = -\partial F / \partial V$ , obtemos as correções desejadas.

<sup>1</sup> $(\partial F / \partial N)_{T, V} = (\partial \Phi / \partial N)_{T, V}$ :

Note que  $\delta\Phi = \Phi_{class}az$ , e  $\Phi_{class} = -pV = -Nk_B T$  (esse sinal é responsável pela mudança dos sinais das correções à pressão).

Ao acabar as contas verifique se seu resultado está correto lembrando que a pressão do gás de Fermi a  $T = 0$  é finita.

4. Considere um gás de argônio adsorvido num substrato de grafite: numa área  $A$  há  $N_a$  átomos adsorvidos, com  $\rho_a = N_a/A$ . Encontre o potencial químico  $\mu_2(T, A, N_a)$  considerando o argônio como um gás ideal clássico em duas dimensões, com hamiltoniano  $\mathcal{H} = \sum_i p_i^2/2m - e_o$ , onde  $e_o$  é a energia de ligação ao substrato. Os momentos  $p_i$  são vetores no plano da superfície.

Calcule o potencial químico  $\mu_3(T, V, N)$  para o mesmo gás em 3 dimensões. Calcule a pressão desse gás quando o potencial químico  $\mu_3$  for igual a  $\mu_2$ . Esta é a pressão de vapor.

5. Considere um gás ideal não relativístico ( $\mathcal{H} = \sum_i p_i^2/2m$ ) em 3d, numa caixa de volume  $V$ . (a) Considere um estado  $j$  de partícula única e encontre o valor da energia como função do volume:  $\varepsilon_j(V)$ . (b) Calcule a pressão parcial de uma partícula nesse estado  $j$ ;  $p_j = -\partial\varepsilon_j/\partial V$  em função de  $\varepsilon_j$  e  $V$ . (c) Use esse resultado para mostrar que  $E = (2/3)pV$ . Isto vale para FD, BE e MB. (d) Faça o mesmo para partículas relativísticas,  $\mathcal{H} = c \sum_i p_i$  e mostre que  $E = (1/3)pV$ .

6. Considere um gás ideal de bósons (spin zero), com espectro de energia dado por  $\epsilon = b|k|^a$ , confinado a uma região de tamanho  $V = L^d$ . Imponha condições periódicas de contorno para obter quantização do momento e da energia.

- (a) Encontre a densidade de estados de energia  $\epsilon$ .
- (b) Escreva  $\Xi(T, V)$  como uma integral sobre a energia.
- (c) Determine o número de ocupação de um estado de energia  $\epsilon$ .
- (d) Determine a equação de estado que relaciona a pressão  $P$ , com  $V$  e a energia  $E$ .
- (e) Determine a temperatura em que o potencial químico se anula, em função do número (médio) de partículas  $N$  e  $V$ .
- (f) Encontre como função da temperatura o número de partículas no estado fundamental (estado de partícula única de menor energia).

7. Considere um gás ideal de (a) férmions e (b) bósons a temperatura nula em equilíbrio numa caixa de volume  $V$  em repouso. Encontre os valores médios  $\langle v_x \rangle$  e  $\langle v_x^2 \rangle$ .

8. Considere gases ideais quânticos em duas dimensões, encontre (a) a temperatura de

Fermi  $T_F$ , (b) a temperatura de condensação de Bose  $T_B$ , (c) O calor específico a “volume” (área) constante em ambos casos (BE e FD) a baixas temperaturas.

**9. Entropia.** A entropia associada a uma distribuição de probabilidade  $p_i$  é dada por  $S = -\sum_i p_i \ln p_i$ . (a) Considere dois sistemas. O sistema A tem associada a distribuição  $p_i$  de ser encontrado no estado  $i$  e o sistema B, a distribuição  $q_k$  de ser encontrado no estado  $k$ . O sistema C composto por A e B terá distribuição  $P_{ik}$ , para o estado rotulado pelos dois índices  $i$  e  $k$ . Se os sistemas são estatisticamente independentes como estão relacionadas as entropias  $S_A, S_B$  e  $S_C$ ? Mostre os cálculos.

(b) Um dado tem tres faces com os números  $k = 0, 1, 2$  estampados. É dado que o valor médio é  $\bar{k} = \sum_{k=0,1,2} k p_k = d$ . Calcule a distribuição de probabilidades que deve ser atribuída com base no princípio de máxima entropia, levando em conta que a informação dada e o fato que  $\sum_k p_k = 1$ . Elimine o multiplicador de Lagrange  $\lambda_1$  associado à normalização e encontre o valor do outro  $\lambda_2$  (não deve cair em nada mais complicado que uma equação de segundo grau, dica  $\exp(-\lambda_2) = x$ ). Discuta o que ocorre se  $d > 1$ . (dica: Pense numa partícula de energia 0,1,2)

### 10. Transição de Fase

Um sistema imaginário de partículas localizadas de spin 1/2 é descrito de forma simplificada pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left( \sum_i s_i \right)^2$$

onde as variáveis (clássicas)  $s_i$  podem tomar valores  $\pm 1/2$ . Estude o problema no ensemble canônico e encontre o valor da magnetização espontânea

$$m = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i s_i \right\rangle$$

como função da temperatura  $T = \beta^{-1}$ . Esboce o gráfico de  $m$  como função de  $T = 1/\beta$ . Calcule a temperatura crítica  $T_c$  abaixo da qual  $m \neq 0$  e  $m = 0$  para  $T > T_c$