

Lista 2 Mecânica Estatística (2do semestre 2015)
Data entrega primeira semana de dezembro.
A lista é individual, não deve ser feita em grupo.
Esta é a primeira parte. Na semana que vem será completada com alguns exercícios sobre tópicos ainda não vistos em aula.

1) Cotas para entropia de variáveis discretas. A divergência de Kullback-Leibler ou entropia cruzada entre duas distribuições de probabilidade que são não nulas no conjunto de n estados $\{i\}$ é definida por

$$K[p|q] = \sum_i p_i \log \frac{p_i}{q_i}. \quad (1)$$

Considere $q_i = 1/n$ a distribuição uniforme, Um número notável de resultados pode ser obtido a partir de considerações de convexidade do logaritmo. Prove que

$$\log x \leq x - 1, \quad (2)$$

A igualdade só ocorre se $x = 1$. Mostre, usando o resultado acima que

$$H[p] \geq 0, \quad (3)$$

que a entropia é não negativa. Quando vale a igualdade?

Se usarmos a mesma cota (eq. 2) na expressão de $K[p|q]$ obteremos

$$K[p|q] \geq 0, \quad (4)$$

Qual é a condição para valer a igualdade?

Juntando as duas cotas com a relação entre K e H , temos que

$$A \leq H[p] \leq B, \quad (5)$$

com a igualdade à esquerda ocorrendo quando temos informação completa sobre X e à direita quando a informação é simétrica com respeito aos n estados. Encontre A e B .

2) Independência Anteriormente vimos que a regra para análise do produto lógico ou conjunção em função das probabilidades de asserções mais simples é

$$P(X, Y|I) = P(X|YI)P(Y|I). \quad (6)$$

Suponha o caso em que a informação sobre Y não diz nada sobre X , isto é, sob a informação I , saber algo sobre Y não muda nada sobre as probabilidades que atribuímos a X , isto é X é independente de Y , ou seja $P(X|YI) = P(X|I)$. É trivial mostrar que então $P(Y|XI) = P(Y|I)$ e que $P(X, Y|I) = P(X|I)P(Y|I)$ a probabilidade conjunta se fatoriza. É interessante considerar $K[P(X, Y|I)|P(X|I)P(Y|I)]$ que está relacionada à diferença de informação que temos quando temos a probabilidade conjunta e as marginais, $P(X|I) = \sum_Y P(X, Y|I)$ e $P(Y|I) = \sum_X P(X, Y|I)$.

Mostre que:

$$K[P(X, Y|I)|P(X|I)P(Y|I)] = -H[P(X, Y|I)] + H[P(X|I)] + H[P(Y|I)] \quad (7)$$

e como $K \geq 0$ obtemos que

$$H[P(X, Y|I)] \leq H[P(X|I)] + H[P(Y|I)]. \quad (8)$$

A equação 7 mostra que $K[P(X, Y|I)|P(X|I)P(Y|I)]$ mede a diferença entre a informação que falta se só olharmos para X e Y separadamente ou conjuntamente. A equação 8, que mostra a propriedade chamada de subaditividade, mostra que a informação que falta quando as variáveis são analisadas conjuntamente é menor ou igual que quando o são em separado. A não ser que as variáveis sejam independentes a análise da distribuição conjunta incorpora mais informação ou seja, falta menos informação.

3) Relação entre os vínculos e multiplicadores de Lagrange.

Queremos atribuir probabilidade aos diferentes estados de X levando em conta vários vínculos

$$\langle g_k(x) \rangle = G_k, \quad (9)$$

com $k = 0, 1, \dots, K$ e chamando $1 = g_0$ para incluir a normalização. O problema variacional será

$$\delta \left[-\sum P_i \log P_i - \sum_{k=0}^K \lambda_k \left\{ \sum_i g_k(x_i) P_i - \mu \right\} \right] = 0 \quad (10)$$

Mostre que o máximo de entropia ocorre quando

$$-\sum_i \delta P_i \{ \log P_i + 1 + \sum_{k=0}^K \lambda_k g_k(x_i) \} = 0 \quad (11)$$

Como anteriormente, as variações são independentes e cada termo entre chaves é nulo, o que leva a

$$P_i = \frac{e^{-\sum_{k=1}^K \lambda_k g_k(x_i)}}{Z} \quad (12)$$

Obtenha a função de partição Z como função de λ_0 e elimine-o, mostrando que toma a forma

$$Z = \sum_i e^{-\sum_{k=1}^K \lambda_k g_k(x_i)} \quad (13)$$

Mostre que os multiplicadores de Lagrange remanescentes poderão ser calculados usando

$$\langle g_k \rangle = G_k = - \left(\frac{\partial \log Z}{\partial \lambda_k} \right)_{\lambda_i, i \neq k} \quad (14)$$

As equações acima formam um conjunto de equações não lineares que determinam os valores de $\{\lambda_k\}$ se os G_k forem conhecidos.

4) Transformações de Legendre Denote o máximo da entropia de Shannon por S . Este valor foi encontrado a partir da informação dada, portanto é uma função dela, ou seja do conjunto $\{G_k\}$, isto é $S = S(G_1, G_2, \dots, G_K)$.
Mostre que

$$S(G_1, G_2, \dots, G_K) = \log Z(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_K) + \sum_{k=1}^K \lambda_k G_k, \quad (15)$$

que mostra como podemos passar de uma descrição em termos do conjunto de variáveis $\{G_k\}$ para o conjunto $\{\lambda_k\}$.

4) Mostre que

$$\lambda_i = \frac{\partial S(G_1, G_2, \dots, G_K)}{\partial G_i} \quad (16)$$

4) Suponha $K = 1$ e $\langle g_1 \rangle = E$, a energia de um sistema com graus de liberdade X e estados $\{x_i\}$ e Hamiltoniano g_1 . (A) Mostre que $F = E - TS$, onde $F = -T \log Z$ e $T = 1/\lambda_1$. (B) Mostre que $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V, N}$.

4) Mostre as relações de Maxwell

$$\frac{\partial G_k}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial G_i}{\partial \lambda_k} \quad (17)$$

e encontre na literatura (e.g. Callen) um exemplo da utilidade de uma aplicação experimental de uma relação de Maxwell.

5) Temperatura.

Um sistema isolado, numa caixa de volume V é dividido em dois subsistemas, o sistema 1 de graus de liberdade $\{q_i, p_i\}$, N_1 partículas e volume V_1 e o sistema 2 de graus de liberdade $\{Q_i, P_i\}$, N_2 partículas e volume V_2 . Isto pode ser feito pela inclusão de uma parede ideal que não permite a passagem de átomos de um lado para outro (impermeável) e rígida, não há variações de volume. A separação é feita mantendo

$$E_1 + E_2 = E \quad (18)$$

$$V_1 + V_2 = V, \quad (19)$$

$$N_1 + N_2 = N, \quad (20)$$

tal que todos os termos das equações 19 e 20 conhecidos enquanto só o lado direito da equação 18 é conhecida. Como é feita a distribuição de energia entre os dois subsistemas?

Mostre que a maximização da energia sujeita ao vínculo $E = E_1 + E_2$ dará

$$\left(\frac{\partial S(E_1, N_1, V_1)}{\partial E_1} \right)_{V_1, N_1} = \left(\frac{\partial S(E_2, N_2, V_2)}{\partial E_2} \right)_{V_2, N_2}. \quad (21)$$

Na última equação escrevemos de forma explícita o que é mantido constante ao tomar as derivadas parciais. Reconhecemos a relação que define a temperatura em termodinâmica,

$$\left(\frac{\partial S(E, N, V)}{\partial E} \right)_{V, N} = \frac{1}{T} \quad (22)$$

e reescrevemos a equação 21 como $1/T_1 = 1/T_2$, os sistemas 1 e 2 estarão em equilíbrio quando suas temperaturas forem iguais. Isso também nos permitirá interpretar do ponto de vista experimental o parâmetro de Lagrange associado à um vínculo, no caso a temperatura com um vínculo sobre o energia. Os parâmetros intensivos da termodinâmica serão associados a multiplicadores de Lagrange que impoem vínculos sobre valores de grandezas extensivas.

6) Aplicações a sistemas discretos Uma partícula de spin 1 será tratada de forma clássica supondo que é descrita por uma variável clássica discreta S_i que toma valores $s_i = -1, 0, 1$. Um conjunto de N tais partículas localizados numa rede cristalina tem um Hamiltoniano, que atribui uma

energia a cada microestado $\{s_1, \dots, s_N\}$ dado por

$$\mathcal{H} = D \sum_{i=1}^N s_i^2 - h \sum_{i=1}^N s_i. \quad (23)$$

O sistema é estudado em condições experimentais tais que a temperatura é fixa ($\beta = T^{-1}$), que implica que o vínculo informacional é:

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle.$$

O experimento permite escolher β e h , isto é são os parâmetros de controle. Encontre $E(\beta, N, D, h)$. Faça uma previsão, dada a informação disponível do calor específico $C = \frac{\partial E}{\partial T}$, da magnetização $m = \langle S_i \rangle$, da suscetibilidade $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}$ e do momento de quadrupolo

$$Q = \langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^2 \rangle. \quad (24)$$

7) Gás de Férmions

Uma amostra do metal sódio (Na) tem densidade 0.95g/cm^3 , tem peso atômico 23. Há um elétron de condução por átomo. (7a) Calcule a temperatura de Fermi $T_F = \mu_0$, o potencial químico a temperatura 0. (7b) Use a expressão para o calor específico do gás de Fermi (e.g. ver notas de aula) e calcule o calor específico do sódio devido aos elétrons de condução. (7c) Calcule a quantidade de Hélio (He^2) a $T = 0.3K$ em cm^3 para esfriar uma amostra de $100g$ sódio de $1K$ para $0.3K$. É dado que 1 cm^3 a $0.3K$ de Hélio requer 0.8 joules para evaporar. Despreze o calor específico da rede cristalina do sódio.

(Dica 1: Use a constante de Boltzmann $k_B = 1.38 \times 10^{-16} \text{ergsK}^{-1} = 1.38 \times 10^{-23} \text{m}^2 \text{kg s}^{-2} \text{K}^{-1}$ para expressar a temperatura em graus Kelvin. Dica 2, dado o calor específico obtido no item b, use a regra de três.)

8) Corpo Negro Uma cavidade de radiação EM tem volume V_i e temperatura T_i . Suponha que a cavidade expande a um novo volume V_f de forma isoentrópica. Encontre a temperatura final T_f . Suponha que o universo observável expande de forma isoentrópica e hoje tem $T_f = 3K$. Qual era a temperatura do universo quando tinha um raio de 1000 vezes menor que o atual? (Raio atual = $4. \times 10^{26} \text{ m}$)