Exercícios 29/jan/2016

Ensembles canônico (sistema em banho térmico) a partir do microcanônico (sistema isolado)

1. **Probabilidade de um estado microscópico em uma das partes de um sistema: exemplos**
   a. **Sólido de Einstein isolado (pequeno) dividido em várias partes iguais.** $N = 1, número\ de\ partes\ \text{Ɲ} = 4,\ E_{tot} = 4\hbar\omega$. As 4 partes (A, B, C, D) trocam energia entre si, portanto nenhuma delas tem energia fixa, mas todas possuem a mesma "temperatura". Vamos calcular a probabilidade de encontrar uma parte em algum dos estados microscópicos possíveis, isto é, vamos calcular a probabilidade canônica.
      - Contabilize os estados microscópicos (E_A, E_B, E_C, E_D) possíveis deste sistema composto de 4 partes.
      - Calcule o número médio $\bar{n}_q$ de subsistemas com energia $E_q = q\hbar\omega$ (convençam-se que entendem o raciocínio, semelhante ao da pg 9).
      - Calcule as probabilidades P_q de encontrar um dos 4 subsistemas em cada um dos estados microscópicos possíveis, caracterizados por energia E_q. Monte uma tabela $P_q\ vs\ E_q$.
      - Faça um histograma de $P_q\ vs\ E_q$. Comparem com a curva da função exponencial $f(E) = Cexp(-\beta E)$.Você consegue calcular o valor de β que melhor se ajusta? E de C?

   b. **Sólido de Einstein pequeno ($N = 1$) em contato com banho térmico constituído $N = 3$.** Considere o mesmo sistema isolado da questão anterior, com 4 subsistemas, $\text{Ɲ} = 4$, e energia total $E_{tot} = 4\hbar\omega$. Só que agora você vai fixar seu olhar no subsistema (índice 0) do canto esquerdo superior, e considerar os 3 subsistemas restantes como o seu banho térmico.

      - Enumere os estados microscópicos possíveis do sistema composto, (E_0, E_{banho}).
      - Calcule as probabilidades P_q de encontrar o sistema 0 no estado microscópico caracterizado por energia E_q. Monte uma tabela $P_q\ vs\ E_q$.
      - Compare com a tabela obtida no item A.

   c. **Sólido de Einstein um pouco "maior" ($N_0 = 2$) em contato com banho térmico constituído $N_{banho} = 18$.** Considere um sistema isolado como na questão anterior, com 10 subsistemas de $N = 2$ osciladores cada um, $\text{Ɲ} = 10$, e energia total $E_{tot} = 10\hbar\omega$. Fixe seu olhar no subsistema (índice 0) do canto esquerdo superior, e considere os 9 subsistemas restantes como o seu banho térmico.

- Enumere os estados microscópicos possíveis do sistema composto, (E_0, E_{banho}).
- Calcule as probabilidades P_q de encontrar o sistema 0 no estado microscópico caracterizado por energia E_q. Monte uma tabela $P_q\ vs\ E_q$.
- Faça um histograma de $P_q\ vs\ E_q$. Comparem com a curva da função exponencial $f(E) = Cexp(-\beta E)$.Você consegue calcular o valor de β que melhor se ajusta? E de C?
- Compare este resultado com o resultado da questão A (ou B). Qual dos dois sistemas você imagina que esteja a uma temperatura maior, o sistema 0 da questão B ou o sistema 0 desta questão? Explique.

2. **Probabilidade de um estado microscópico em uma das partes de um sistema: caso geral**

Sistema pequeno em contato térmico com sistema grande, sistema pequeno+sistema grande isolados. Considere um sistema muito grande (o banho), em contato com um sistema bem pequeno (o sistema 0). A situação é semelhante à do problema anterior, mas com $N_0 = 1000$ e $N_{banho} = 1.000.000$, por exemplo. Queremos deduzir uma expressão geral para a probabilidade P_ν, em que ν representa o estado microscópico ν, de energia E_ν. Usamos a letra ν ao invés de q, porque a expressão da probabilidade deve valer para qualquer modelo, e não apenas para o sólido de Einstein.

- Verifique, na questão 1B (ou C) acima, que você pode escrever a probabilidade do estado microscópico q, como $P_q = \frac{\Omega_{banho}(4\hbar\omega - E_q)}{\Omega_{0+banho}(4\hbar\omega)}$. Podemos generalizar esta expressão, para um modelo qualquer, em que o sistema pequeno pode estar em estados microscópicos ν, escrevendo
$$P_\nu = \frac{\Omega_{banho}(E_{total} - E_\nu)}{\Omega_{total}(E_{total})}.$$
em que E_{total} é a energia de [sistema grande (banho) +sistema pequeno]. Convença-se!
- Tome o logaritmo desta expressão, multiplique pela constante de Boltzmann k_B e note que $S_{total}(E_{total}) = k_B \ln(E_{total})$ é a entropia do sistema composto e $S_{banho}(E_{total} - E_\nu) = k_B \ln \Omega_{banho}(E_{total} - E_\nu)$ é a entropia do banho, se este tem energia $E_{total} - E_\nu$. Você deve obter a expressão
$$k_B \ln P_\nu = S_{banho}(E_{total} - E_\nu) - S_{total}(E_{total})$$
- Agora você vai expandir em série de Taylor a função $S_{banho}(E_{total} - E_\nu)$ em torno da energia média do sistema pequeno $\bar{E}_0$, fazendo $E_{total} - E_\nu = E_{total} - \bar{E}_0 + (\bar{E}_0 - E_\nu)$, usando $f(x+a) = f(x) + a + \frac{1}{2}\frac{d^2 f}{dx^2}a^2 + \cdots$. "Quem" é x? E a? Use também o fato de que a temperatura do banho, T_{banho}, é uma constante (esta é a <u>definição</u> de banho ideal, cuja temperatura não varia, mesmo que sua energia sofre "pequenas" variações). Você deve obter
$$S_{banho}(E_{total} - E_\nu) = S_{banho}(E_{total} - \bar{E}_0) + \frac{1}{T_{banho}}(\bar{E}_0 - E_\nu).$$
- Lembra que a entropia é aditiva?

Ou seja, que $S_{total}(E_{total}) = S_{banho}(E_{total} - \bar{E}_0) + S_0(\bar{E}_0)$? Use essa propriedade da entropia para obter

$$k_B \ln P_\nu = -S_0(\bar{E}_0) + \frac{1}{T_{banho}}(\bar{E}_0 - E_\nu).$$

- Você reconhece a energia livre $F = E - TS$ nesta expressão? Obtenha a expressão de P_ν da equação do item anterior, em termos da energia livre F e da energia do estado microscópico E_ν. Compare a expressão que obteve com a análise da questão 1A, em que a probabilidade P_q foi comparada a uma função exponencial.
- Finalmente, compare seu resultado com a expressão para a probabilidade canônica (Hill, eq. 1-12).

3. **Probabilidade de um estado microscópico em uma das partes de um sistema: entendendo o cálculo do caso geral**

   Para rever as ideias utilizadas no início da dedução acima, vamos usar um exemplo concreto. Na pg 3 do texto M... temos a seguinte tabela:

q_1	Ω_1	Ω_2	$\Omega_{1+2} = \Omega_1\Omega_2$
0	1	35	35
1	4	20	80
2	10	10	100
3	20	4	80
4	35	1	35

Vamos analisar a probabilidade de um estado específico do sistema 1. A probabilidade de encontrá-lo no estado (1,0,0,0) é $P_{(1,0,0,0)}$ é $\frac{20}{330}$. Você concorda? Obtenha também as probabilidades para os estados (0,0,0,0), (1,1,0,0), (1,1,1,0) e (1,1,1,1). Faça o histograma de $P_{(x,y,x,t)} vs\ E_{(x,y,z,t)}$ e comente.