Mecânica Estatística – 4302401

Lista de exercícios 5

Primeiro semestre de 2023

1. (Baierlein, modificado) Um total de N férmions (de spin $\frac{1}{2}$ e massa m) têm seu movimento restrito a duas dimensões, em um plano de área A. Não há interações entre os férmions, e os férmions não podem se deslocar na terceira dimensão espacial.

   (a) Determine a densidade de estados $D(\epsilon)$ para esse sistema bidimensional.

   (b) Calcule a energia de Fermi ϵ_F e a temperatura de Fermi T_F para o sistema.

   (c) Para uma temperatura que satisfaça a condição $0 < T \ll T_F$, calcule a energia média por partícula, o calor específico a área constante e a entropia total.

   (d) Calcule as mesmas três quantidades quando a temperatura é suficientemente alta para que os férmions comportem-se como um gás bidimensional semiclássico (ou seja, como um gás clássico mas levando em conta o spin).

   Suas respostas acima devem depender apenas de k_B, T, m, h, N e A.

   (e) Com base na solução <u>numérica</u> das equações exatas que fornecem o potencial químico, a energia média por partícula e o calor específico a área constante, faça gráficos dessas grandezas em função da temperatura. Nos gráficos, meça energias em unidades de ϵ_F e temperaturas em unidades de T_F (como nos gráficos nas notas de aula). Na página da disciplina há um notebook do Mathematica que pode ser útil para este item.

2. (Sander, modificado) Use a teoria da radiação do corpo negro para estimar a temperatura superficial média da Terra. (Dica: suponha que, por estar aproximadamente em equilíbrio, a Terra emite tanta energia por unidade de tempo quanto recebe do Sol. Para calcular essa energia recebida por unidade de tempo, você precisará de dados sobre o Sol, que pode buscar na internet.)

3. (Baierlein, modificado) Considere um filme fino de material sólido, com uma espessura de um só átomo, depositado sobre um substrato inerte. Os átomos podem vibrar paralelamente à superfície, mas não perpendicularmente. Trate o material como um sólido bidimensional, contendo N átomos em uma área A, de modo que as ondas sonoras apenas se propaguem paralelamente à superfície, com uma velocidade constante

c. Adapte a teoria de Debye para esse contexto, utilizando-a para as partes (a) e (b) abaixo.

(a) Calcule o calor específico a área constante, c_A, no regime de altas temperaturas.

(b) Calcule o calor específico a área constante, c_A, no regime de baixas temperaturas.

(c) Estabeleça critérios explícitos para o que são "altas" e "baixas" temperaturas.

4. (Retomando o problema 4 da lista 4) Um modelo bastante simplificado de um fluido interagente é obtido por uma variante do gás de rede que já discutimos várias vezes ao longo do curso. Suponha que um recipiente de volume V seja dividido em células de volume v_0, cada uma das quais pode ser ocupada por no máximo duas partículas. A energia associada a uma célula vazia ou a uma célula ocupada por uma só partícula é nula, mas a energia associada à dupla ocupação de uma célula é $\epsilon > 0$, ou seja, existe uma repulsão entre duas partículas localizadas na mesma célula. As partículas devem ser tratadas como indistinguíveis, mas de outra forma clássicas. Não é necessário levar em conta a energia cinética das partículas.

   (a) Escreva a função de partição grande canônica do sistema, como função do parâmetro térmico β, do volume V e da fugacidade z. (Dica: analogamente aos problemas anteriores envolvendo um gás de rede, adote uma descrição dos microestados em termos dos números de ocupação de cada célula.)

   (b) Impondo que o número médio de partículas no sistema seja N, mostre que a fugacidade, escrita em termos de β e da concentração de partículas $c = N/\left(V/v_0\right)$, que mede o número médio de partículas por célula, é dada por

$$z = \frac{-\left(1-c\right) + \sqrt{\left(1-c\right)^2 + 4\left(2-c\right) c e^{-\beta\epsilon}}}{2\left(2-c\right) e^{-\beta\epsilon}}.$$

   (c) Determine a pressão do gás em função da temperatura e da concentração, e determine o segundo coeficiente do virial para esse sistema. Para isso, utilize o fato de que o volume por partícula é $v = v_0/c$.

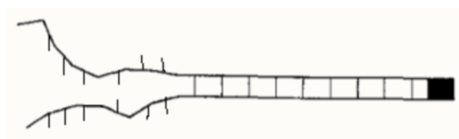
   (d) Faça gráficos (no mesmo conjunto de eixos) da pressão como função do volume por partícula v (medido em unidades de v_0) para $k_BT/\epsilon = 2$, $k_BT/\epsilon = 2/3$ e $k_BT/\epsilon = 1/20$. Deixe v variar de $v_0/2$ até $2v_0$. Interprete o comportamento observado na temperatura mais baixa. (Dica: o que acontece com a ocupação média de uma célula quando v se torna menor do que v_0?)

5. (Baierlein, modificado) Considere a equação de estado de Dieterici,

$$p = \frac{Nk_BT}{V - Nb} \exp\left(-\frac{aN}{Vk_BT}\right).$$

Determine, em termos de a, b e da constante de Boltzmann k_B, os parâmetros críticos T_c, v_c e p_c para essa equação. Para a maioria dos fluidos simples, a combinação $k_B T_c / v_c p_c$ medida experimentalmente situa-se entre 3,3 e 4,4. Qual das equações (de Dieterici ou de van der Waals) reproduz melhor essa combinação?

6. Um modelo de brinquedo para a desnaturação do DNA. Suponha que um zíper mantido a uma temperatura constante T tenha N conexões. Cada conexão pode estar encaixada, com energia nula, ou desencaixada, com energia $\epsilon > 0$. No entanto, o zíper só pode ser aberto a partir de uma extremidade, ou seja, a conexão de número n somente pode ser desencaixada se todas as conexões antes dela (de números 1, 2, ..., $n-1$) também estiverem desencaixadas; veja a figura abaixo. A última conexão nunca pode ser desencaixada; veja o extremo direito na figura. Uma conexão encaixada está em apenas uma configuração, mas uma conexão desencaixada tem pontas soltas que, conjuntamente, podem estar em G configurações, ou seja, o estado desencaixado de uma conexão tem degenerescência G.



   (a) Qual é a energia do sistema quando apenas as n primeiras conexões estão desencaixadas?

   (b) Quantas configurações são compatíveis com o caso em que apenas as n primeiras conexões estão desencaixadas?

   (c) A partir dos resultados dos itens anteriores, mostre que a função de partição do sistema, que pode ser escrita como uma soma sobre todos os valores possíveis de n, é dada por
$$Z = \frac{1 - \left(Ge^{-\beta\epsilon}\right)^N}{1 - Ge^{-\beta\epsilon}}.$$

   (d) Calcule a energia livre $F = -k_B T \ln N$ no limite termodinâmico $N \gg 1$. Mostre que se $G > 1$ a energia livre é não analítica na temperatura, ou seja, exibe uma singularidade em uma certa temperatura crítica T_c, dada por
$$k_B T_c = \frac{\epsilon}{\ln G},$$
que separa formas distintas da energia livre.

   (e) Calcule o número médio $\langle n \rangle$ de conexões abertas a uma temperatura T, diferenciando os casos $T > T_c$ e $T < T_c$. Note que esse número é proporcional à energia média; especificamente, $\langle n \rangle = \langle E \rangle / \epsilon$. Do seu resultado, mostre que o zíper está aberto (o DNA está desnaturado) se $T > T_c$, mas está fechado (o DNA está íntegro) se $T < T_c$.

7. (Baierlein, modificado) Eis uma outra maneira de formular a teoria de Bragg–Williams. Escreva

$$\sigma_j = \langle\sigma\rangle + (\sigma_j - \langle\sigma\rangle) \equiv \langle\sigma\rangle + \delta\sigma_j,$$

e substitua essa forma no primeiro somatório do hamiltoniano

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle} J\sigma_i\sigma_j - \sum_j \mu_0 B\sigma_j,$$

ignorando termos que contenham o produto $\delta\sigma_i\,\delta\sigma_j$.

(a) Descartar os termos contendo o produto $\delta\sigma_i\,\delta\sigma_j$ equivale a ignorar as correlações entre as flutuações dos spins vizinhos. Sob que circunstâncias essa pode ser uma boa aproximação?

(b) Usando a expansão sugerida acima, mostre que

$$\sigma_i\sigma_j \approx \langle\sigma\rangle(\sigma_i + \sigma_j) - \langle\sigma\rangle^2,$$

e a partir dessa aproximação calcule a função de partição de um sistema de N spins, cada um tendo q vizinhos. Mostre que o resultado pode ser escrito como

$$Z = [2\cosh(\beta\mu_0 B_{\text{ef}})]^N \exp\left(-\frac{\beta NqJ\langle\sigma\rangle^2}{2}\right),$$

em que

$$B_{\text{ef}} = B + \frac{qJ}{\mu_0}\langle\sigma\rangle.$$

(c) Os mínimos na energia livre de Helmholtz, $F = -k_B T\ln Z$, como função de $\langle\sigma\rangle$, fornecem os valores mais prováveis de $\langle\sigma\rangle$, e portanto os valores de equilíbrio da magnetização. Que equação você obtém ao procurar pelos extremos de F?

Para os itens restantes, suponha $B = 0$, e portanto trabalhe com a magnetização espontânea.

(d) Quando $T < T_c = qJ/k_B$, a energia livre tem um mínimo ou um máximo em $\langle\sigma\rangle = 0$? O que você conclui quanto ao valor de equilíbrio da magnetização?

(e) Faça gráficos de F/Nk_BT como função de $\langle\sigma\rangle$ tanto para $T > T_c$ quanto para $T < T_c$. O que você pode concluir?

(f) Supondo $\langle\sigma\rangle$ suficientemente pequeno, expanda a energia livre de Helmholtz e mostre que ela tem exatamente a forma proposta por Landau para o potencial

$$\psi(T,m) = \psi_0(T) + NA(T)\,m^2 + NB(T)\,m^4 + \cdots,$$

com $m = \mu_0\langle\sigma\rangle$. Em particular, mostre que, quando $T \to T_c$,

$$A(T) \approx a(T - T_c),$$

com a independente de T.