Mecânica Estatística – 4302401

Lista de exercícios 3

Primeiro semestre de 2023

1. (EUF 2019-2) Um sistema de N partículas distinguíveis não interagentes é descrito pelo hamiltoniano
$$H = \sum_{i=1}^{N} \epsilon_i.$$
A energia de cada partícula, ϵ_i, só pode assumir dois valores, $\epsilon_i = 0$ ou $\epsilon_i = \Delta > 0$. Portanto, cada microestado do sistema é descrito pelo conjunto de valores $(\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots, \epsilon_N)$.

   (a) Se o sistema possui energia total E, que é um múltiplo inteiro de Δ, o número total de microestados possíveis é
   $$\Omega(E, N) = \frac{N!}{(E/\Delta)!\,(N - E/\Delta)!}.$$
   Com base no postulado fundamental da mecânica estatística, qual é a probabilidade de se encontrar o sistema em um microestado específico?

   (b) Calcule a entropia por partícula do sistema, $s = S/N$, como função da energia por partícula $u = E/N$, no regime $N \gg 1$. Utilize a aproximação $\ln N! \approx N \ln N - N$, válida para $N \gg 1$.

   (c) Determine a temperatura do sistema como função de u. Existe algum intervalo de valores de u em que a temperatura é negativa?

   (d) Calcule o calor específico do sistema. Existe algum regime em que o calor específico é negativo?

2. Considere um sistema de N partículas idênticas, mas distinguíveis, cada uma das quais pode assumir energias 0 ou $\epsilon > 0$. O nível fundamental de energia de cada partícula é único, mas o nível excitado tem degenerescência g. A energia total do sistema é fixa em E, e os itens abaixo devem ser respondidos utilizando o ensemble microcanônico.

(a) Calcule a entropia $S(E,N)$ do sistema em função de E e N, e mostre que ela pode ser escrita na forma

$$S(E,N) = -Nk_B\left[x\ln x + (1-x)\ln(1-x) - x\ln g\right],$$

em que $x = N_\epsilon/N = E/(N\epsilon)$, sendo N_ϵ o número médio de partículas nos níveis excitados de energia.

(b) Determine a relação entre a temperatura, a energia interna e o número de partículas do sistema, para um ϵ fixo.

(c) Determine a dependência com a temperatura de N_ϵ e $N_0 = N - N_\epsilon$, em que N_0 é o número de partículas no nível fundamental. Sua resposta somente deve depender de ϵ, g, k_B, T e N.

(d) Considere o caso $g = 2$. Se o sistema tem energia $E = 0.75\,N\epsilon$ e é colocado em contato com um reservatório a uma temperatura constante $T = 500\,\mathrm{K}$, em que sentido ocorre a transferência de energia por calor?

(e) Um exemplo de um sistema real que corresponde aproximadamente ao caso $g = 2$ é o de um material paramagnético de spin 1 sujeito a um "campo cristalino" $\epsilon > 0$, descrito pelo hamiltoniano

$$H = \epsilon\sum_{i=1}^{N} S_i^2, \qquad \text{com } S_i \in \{-1,0,1\}\,.$$

Utilizando os resultados do item (b), determine a dependência com a temperatura do calor específico a campo constante,

$$c = \frac{1}{N}\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\epsilon,$$

e trace o gráfico de c/k_B em função de k_BT/ϵ. Você observa uma anomalia de Schottky?

3. (EUF 2020-1) Considere um sistema formado por dois íons magnéticos de spin 1 interagindo com o campo externo h, e cujo hamiltoniano é dado por

$$H = -g\mu_B h\,(m_1 + m_2)\,,$$

em que m_i são variáveis que indexam as projeções dos spins dos íons magnéticos: $m_i = 0, \pm 1$. O sistema está isolado e possui energia fixa $E = -g\mu_B h$.
Usando o postulado fundamental da mecânica estatística, podemos dizer que o número total de estados microscópicos acessíveis do sistema com essa energia e a probabilidade de ocorrência de qualquer particular configuração dentre essas são, respectivamente:

(a) 9 e 1/9;
(b) 2 e 1/2;
(c) 4 e 1/2;
(d) 9 e 2/9;
(e) 4 e 1/4.

4. (EUF 2021-3) Em altas temperaturas, os átomos de um cristal podem ser excitados, deixando suas posições regulares na rede cristalina e ocupando posições intersticiais. Suponha que para um certo cristal haja um custo de energia $\epsilon > 0$ quando um átomo ocupa uma posição intersticial, de modo que, quando n interstícios são criados, a energia total seja $E = n\epsilon$. Para um cristal que contém N sítios e N possíveis posições intersticiais, o número de formas para que n átomos sejam excitados, ocupando posições intersticiais, é
$$\Omega\left(N,n\right) = \left[\frac{N!}{n!\left(N-n\right)!}\right]^2 .$$
Sendo T a temperatura do sistema, calcule a dependência da energia total E com o parâmetro $\beta = 1/k_B T$ e com o número de sítios N, supondo que tanto n quanto N sejam muito maiores do que 1. Dica: utilize a aproximação de Stirling, $\ln x! \approx x \ln x - x$.

   (a) $E = \dfrac{N\epsilon}{1+e^{\beta\epsilon/2}}$
   (b) $E = \dfrac{N\epsilon}{1+e^{-\beta\epsilon/2}}$
   (c) $E = N\epsilon e^{\beta\epsilon/2}$
   (d) $E = N\epsilon e^{-\beta\epsilon/2}$
   (e) $E = N\epsilon$

5. (EUF 2020-3, modificado) O hamiltoniano de um sistema de Ising com apenas dois íons magnéticos, com interação de troca $J > 0$ e na presença de um campo magnético h, é dado por
$$\mathcal{H} = -J\sigma_1\sigma_2 - \mu h\left(\sigma_1 + \sigma_2\right),$$
em que as variáveis de spin σ_i podem assumir os valores ± 1 e μ é o momento magnético de um íon. O sistema está em equilíbrio com um reservatório térmico à temperatura T. Nessas condições, sendo k_B a constante de Boltzmann e $\beta = 1/k_B T$, calcule a probabilidade de que a energia total do sistema seja $E = -J + 2\mu h$.

6. (EUF 2020-3, modificado) Considere um sistema formado por N íons magnéticos de spin 1, em contato com um reservatório térmico a uma temperatura T, descrito pelo

hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(D\sigma_i^2 - \mu h \sigma_i \right),$$

em que σ_i pode assumir os valores 0, -1 e $+1$. As quantidades D e h são constantes.

(a) Calcule a função de partição canônica Z do sistema.

(b) Calcule o valor médio do momento de quadrupolo do sistema,

$$Q = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 \right\rangle.$$

7. (Baierlein, modificado) Os níveis de energia do elétron no hidrogênio atômico são dados pela expressão $\epsilon_n = -13{,}6/n^2$ eV, em que n denota o número quântico principal. Dado o número quântico principal, e sem contar o número quântico de spin, o elétron pode estar em um de n^2 estados com mesma energia ϵ_n, apenas um dos quais corresponde a momento angular orbital nulo. Considere o hidrogênio atômico em uma atmosfera estelar, sob uma temperatura de 7 000 K. Para o hidrogênio atômico, que valores numéricos você obtém para as seguintes razões?

   (a) A razão entre a probabilidade de observar o elétron com $n = 2$ e com momento angular orbital nulo e a probabilidade de observar o elétron com $n = 1$.

   (b) A razão entre a probabilidade de observar o elétron com $n = 2$, qualquer que seja o momento angular orbital, e a probabilidade de observar o elétron com $n = 1$.

8. (EUF 2021-2) Um átomo na presença de um campo magnético de intensidade B possui quatro níveis não degenerados de energia, dados por $\epsilon_1 = 0$ (com componente de spin $S^z = 0$), $\epsilon_2 = \Delta - \mu B$ (com $S^z = 1$), $\epsilon_3 = \Delta + \mu B$ (com $S^z = -1$) e $\epsilon_4 = 2\Delta$ (com $S^z = 0$), sendo Δ uma constante positiva com dimensão de energia e μ o momento magnético do átomo. Calcule, como função do campo magnético e da temperatura T, a probabilidade de que o átomo tenha componente S^z do spin igual a zero.

   (a) $\Pr\left[S^z = 0\right] = \dfrac{1 + e^{-\beta\Delta}}{1 + 2\cosh\left(\beta\mu B\right) + e^{-\beta\Delta}}$

   (b) $\Pr\left[S^z = 0\right] = \dfrac{1 + 2e^{-2\beta\Delta}}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh\left(\beta\mu B\right) + e^{-2\beta\Delta}}$

   (c) $\Pr\left[S^z = 0\right] = \dfrac{1 + 2e^{-2\beta\Delta}}{1 + 2\cosh\left(\beta\mu B\right) + e^{-\beta\Delta}}$

   (d) $\Pr\left[S^z = 0\right] = \dfrac{1 + e^{-2\beta\Delta}}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh\left(\beta\mu B\right) + e^{-2\beta\Delta}}$

   (e) $\Pr\left[S^z = 0\right] = 0$

9. (EUF 2021-2) Um átomo na presença de um campo magnético de intensidade B possui quatro níveis não degenerados de energia, dados por $\epsilon_1 = 0$ (com componente de spin $S^z = 0$), $\epsilon_2 = \Delta - \mu B$ (com $S^z = 1$), $\epsilon_3 = \Delta + \mu B$ (com $S^z = -1$) e $\epsilon_4 = 2\Delta$ (com $S^z = 0$), sendo Δ uma constante positiva com dimensão de energia e μ o momento magnético do átomo. Calcule a magnetização $m = \mu \langle S^z \rangle$ do átomo como função do campo magnético e da temperatura T.

   (a) $m = \mu \dfrac{2 \operatorname{senh}(\beta\mu B)}{1 + 2\cosh(\beta\mu B) + e^{-\beta\Delta}}$

   (b) $m = \mu \dfrac{2e^{-\beta\Delta} \operatorname{senh}(\beta\mu B)}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh(\beta\mu B) + e^{-2\beta\Delta}}$

   (c) $m = \mu \dfrac{2e^{-\beta\Delta} \tanh(\beta\mu B)}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh(\beta\mu B) + e^{-2\beta\Delta}}$

   (d) $m = \mu \dfrac{2 \tanh(\beta\mu B)}{1 + 2\cosh(\beta\mu B) + e^{-\beta\Delta}}$

   (e) $m = \mu \tanh(\beta\mu B + \beta\mu\Delta)$

10. (Sethna, modificado) Considere um sistema de N átomos, cada um com dois estados eletrônicos de energias $\pm\epsilon/2$. Os átomos estão isolados do mundo exterior. Há apenas interações muito fracas entre os átomos, suficientes para levá-los ao equilíbrio térmico mas sem afetar significativamente a energia do sistema.

   (a) *Entropia microcanônica.* Se a energia total é E (correspondendo a um número de átomos $m = E/\epsilon + N/2$ no estado excitado), qual é a entropia microcanônica $S_{\text{micro}}(E)$ do sistema? Simplifique sua expressão utilizando a aproximação de Stirling, $\ln(n!) \approx n \ln n - n$.

   (b) *Temperaturas negativas.* Determine a temperatura, utilizando a expressão simplificada determinada no item (a). O que acontece com a temperatura quando $E > 0$? (Uma energia $E > 0$ é um tipo de "inversão de população", ingrediente essencial dos lasers.)

   (c) *Ensemble canônico.* Tome um dos átomos do sistema e o acople a um reservatório térmico a uma temperatura T tal que $k_B T = 1/\beta$. Com o auxílio de uma soma sobre os dois estados do átomo, escreva uma expressão explícita para a função de partição canônica Z_{canon}, simplifique-a e, em seguida, escreva expressões para a energia interna u_{canon} e a entropia s_{canon} de um único átomo no ensemble canônico.

   (d) O que acontece com E_{canon} quando $T \to \infty$? Você consegue atingir o regime de temperaturas negativas do item (b)?

   (e) *Correspondência entre os ensembles microcanônico e canônico.*

i. A partir de sua resposta para o item (c), determine a entropia canônica $S_{\text{canon}}(T)$ para N átomos acoplados ao reservatório. Explique o valor de $S_{\text{canon}}(T=\infty) - S_{\text{canon}}(T=0)$ a partir da contagem de estados.

ii. Utilizando a forma aproximada da entropia determinada no item (a) e a temperatura determinada no item (b), mostre que $S_{\text{micro}}(E) = S_{\text{canon}}(T(E))$ no limite termodinâmico. Você pode querer fazer uso da identidade hiperbólica $\tanh^{-1}(x) = (1/2)\ln\left[(1+x)/(1-x)\right]$.

(f) Flutuações. Calcule as flutuações na energia, $\Delta E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}$, no ensemble canônico, e utilize a relação $T(E)$ do item (b), com $E = \langle E\rangle$ para expressar ΔE em função de $\langle E\rangle$. Qual é o limite de $\Delta E/\langle E\rangle$ quando $N \to \infty$?

11. (Atlee Jackson, modificado) De um ponto de vista prático, a principal dificuldade da mecânica estatística é obter a função de partição como uma função explícita de β e V. Suponha, no entanto, que uma pessoa esperta tenha obtido para dois fluidos puros as funções de partição aproximadas abaixo. Em cada caso, sendo N o número de partículas do sistema e M, a e b constantes positivas, determine a equação de estado $p = p(T,V)$ e o calor específico c_V do sistema.

(a) $Z = V^N \left(2\pi/\beta M\right)^{5N/2}$

(b) $Z = (V - Nb)^N \left(2\pi/\beta M\right)^{3N/2} e^{\beta a N^2/V}$