Mecânica Estatística - Segunda Prova - 19/05/2017

Professor: Gabriel T. Landi

1. (2,5 pontos) Considere um sistema de N osciladores harmônicos clássicos tri-dimensionais conectados a um banho térmico a uma temperatura T. O Hamiltoniano de cada oscilador é dado por

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$$

   (a) (0,5 pontos) Calcule a função de partição de um único oscilador.

   (b) (1 ponto) Qual a variância de x? E a variância de p_x?

   (c) (1 ponto) Calcule a energia interna e a capacidade térmica do sistema de N osciladores.

2. (2,5 pontos) Considere um sistema com 4 estados quânticos com energias $E_0 = -A$ e $E_1 = E_2 = E_3 = 3A$, conectado a um banho térmico a uma temperatura T. Em todos os itens deste problema, considere separadamente os casos $A > 0$ e $A < 0$. Em todos os itens, você não precisa realizar os cálculos em detalhes. Basta explicar em palavras o resultado.

   (a) (0,5 pontos) Qual o estado fundamental e sua degenerescência?

   (b) (0,5 pontos) Qual a energia do sistema no limite $T \to 0$.

   (c) (0,75 pontos) Qual a entropia do sistema no limite $T \to 0$.

   (d) (0,75 pontos) Qual a energia livre do sistema no limite $T \to \infty$.

3. (2,5 pontos) Considere um sistema de N partículas de spin 1 e seja $J_i = 1, 0, -1$ o estado de spin de cada partícula. Suponha que a energia do sistema é dada por

$$E = -\sum_{i=1}^{N}(\mu H J_i + K J_i^2)$$

   onde H é o campo magnético, μ é o momento magnético e K é uma constante denominada constante de anisotropia.

   (a) (0,5 pontos) Calcule a energia livre do sistema.

   (b) (1 ponto) Calcule a magnetização.

   (c) (1 ponto) Calcule a susceptibilidade à campo nulo.

4. (2,5 pontos) Considere um sistema cuja energia livre é dada por

$$F = -k_B T \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$$

   onde $\epsilon > 0$.

   (a) (0,75 pontos) Calcule a entropia do sistema.

   (b) (0,5 pontos) Calcule o calor específico.

   (c) (0,75 pontos) Suponha que desconectamos o sistema de um reservatório a uma temperatura T e o acoplamos a um reservatório a uma temperatura $T + \Delta T$, onde $\Delta T \ll T$. Qual o calor que vai fluir entre o sistema e o novo reservatório?

   (d) (0,5 pontos) Suponha que um agente externo modifica o parâmetro ϵ para um novo valor $\epsilon + \Delta\epsilon$. Qual o trabalho realizado?

Gabarito P2 - 19/05/2017

1) $H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$

(a) $Z_1 = \int d^3p\, d^3x\, e^{-\beta H}$

$$= \left[\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-\beta p^2/2m}\right]^3 \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\beta m\omega^2 x^2/2}\right]^3$$

usando a integral Gaussiana $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

obtemos

$$Z_1 = \left[\frac{2m\pi}{\beta}\right]^{3/2} \left[\frac{2\pi}{m\omega^2\beta}\right]^{3/2} = \left(\frac{2\pi}{\beta\omega}\right)^3$$

(b) $P(p, x) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ Portanto x será uma variável Gaussiana com dist. $P(x) \sim e^{-\beta m\omega^2 x/2}$. Como, em uma Gaussiana, $e^{-x^2/2\sigma^2}$, σ^2 é a variância, temos

$$Var(x) = \frac{1}{\beta m\omega^2}$$

Da mesma forma $P(p_x) = e^{-\beta p_x^2/2m}$ e, portanto

$$Var(p_x) = \frac{m}{\beta}$$

(c) Para N osciladores temos $Z_N = Z_1^N$

A energia interna será

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N = -N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1 = -N\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(1/\beta^3)$$

$$\therefore \quad \boxed{U = 3Nk_BT \quad \rightsquigarrow \quad C = 3Nk_B}$$

2) (a) $A > 0$: est. fund. $= 0$, não degenerado

$A < 0$: est. fund. $= 1, 2, 3$, deg. $= 3$

(b) $T \to 0$: a energia vai p/ a energia do est. fund.

$$\lim_{T \to 0} U = \begin{cases} -A & A > 0 \\ 3A & A < 0 \end{cases}$$

(c) $T \to 0$: a entropia tende a $k_B \ln g$, onde g é a degenerescência do estado fundamental.

$$\therefore \quad \lim_{T \to 0} S = \begin{cases} 0 & A > 0 \\ k_B \ln 3 & A < 0 \end{cases}$$

(d) $T \to \infty$: tanto U quanto S são finitos.

$$F = U - TS$$

$$\therefore \quad \lim_{T \to \infty} F = -\infty.$$

3) Considero apenas um spin

(a)
$$Z_1 = \sum_{J=1,0,-1} e^{\beta(\mu H J + K J^2)}$$

$$= e^{\beta\mu H + \beta K} + 1 + e^{-\beta\mu H + \beta K}$$

$$\therefore \quad Z_1 = 1 + 2e^{\beta K}\cosh(\beta\mu H)$$

A energia livre será

$$F = -k_B T \ln Z_1^N$$

$$\therefore \quad \boxed{F = -N k_B T \ln\left(1 + 2e^{\beta K}\cosh(\beta\mu H)\right)}$$

(b)
$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{N}{\beta}\,\frac{2e^{\beta K}\beta\mu\sinh(\beta\mu H)}{1 + 2e^{\beta K}\cosh(\beta\mu H)}$$

$$\boxed{M = N\mu\left[\frac{2e^{\beta K}\sinh(\beta\mu H)}{1 + 2e^{\beta K}\cosh(\beta\mu H)}\right]}$$

(c) Para H pequeno temos $\sinh(\beta\mu H) \simeq \beta\mu H$ e $\cosh(\beta\mu H) \simeq 1$.

$$\therefore \quad M \simeq N\mu\left[\frac{2e^{\beta K}\beta\mu H}{1 + 2e^{\beta K}}\right]$$

com isso a susceptibilidade será

$$\boxed{\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{N \mu^2}{k_B T} \frac{2 e^{\beta K}}{1 + 2 e^{\beta K}}}$$

4) $F = -k_B T \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$

(a) Como $F = -k_B T \ln Z \Rightarrow \ln Z = \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$$

$$\therefore \quad U = \frac{\epsilon e^{-\beta\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}} = \frac{\epsilon}{e^{\beta\epsilon} + 1}$$

$$S = \frac{U - F}{T} = k_B \left\{ \frac{\beta\epsilon}{e^{\beta\epsilon} + 1} + \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}) \right\}$$

//

(b) $$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \epsilon (-1)\left(-\frac{\epsilon}{k_B T^2}\right) \frac{e^{\beta\epsilon}}{(e^{\beta\epsilon} + 1)^2}$$

$$C = k_B \frac{(\beta\epsilon)^2 e^{\beta\epsilon}}{(e^{\beta\epsilon} + 1)^2}$$

//

(c) $$\Delta Q = C(T) \Delta T = k_B \frac{(\beta\epsilon)^2 e^{\beta\epsilon}}{(e^{\beta\epsilon} + 1)^2} \Delta T$$

(d) $$\Delta W = \frac{\partial F}{\partial \epsilon} \Delta\epsilon$$

$$\frac{\partial F}{\partial \epsilon} = -k_B T \frac{(-\beta e^{-\beta\epsilon})}{1 + e^{-\beta\epsilon}} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} + 1}$$

$$\therefore \quad \Delta W = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} + 1} \Delta\epsilon$$

//