# Mecânica Estatística - Exercícios do EUF

Professor: Gabriel T. Landi

## (2016-2) Sólido cristalino

Num modelo para um sólido cristalino podemos supor que os $N$ átomos sejam equivalentes a $3N$ osciladores harmônicos clássicos, unidimensionais, independentes, de massa $m$, que oscilam com a mesma frequência angular $\omega$ em torno de sua posição de equilíbrio. A uma distância $x$ dessa posição a energia potencial é dada por $U = m\omega^2 x^2/2$. Conhecendo-se alguns dados experimentais é possível estimar, em termos da distância inter-atômica $d$ a baixas temperaturas, a raiz do deslocamento quadrático médio dos átomos quando ocorre a fusão. A resolução dos itens abaixo permite fazer esta estimativa. Suponha que o sólido se encontre em equilíbrio térmico a uma temperatura absoluta $T$.

(a) Considere que o número de estados numa célula do espaço de fase $(x, p)$ seja dado por $\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p/h$, onde $h$ é a constante de Planck. Obtenha a função de partição para o oscilador harmônico $Z(T, \omega)$.

(b) Calcule o número médio de osciladores cuja posição se encontra entre $x$ e $x + \mathrm{d}x$.

(c) Obtenha a expressão para a energia potencial média, $\langle U \rangle$ por oscilador unidimensional. Compare o resultado com o valor esperado pelo teorema da equipartição.

(d) Seja $x_0^2$ o deslocamento quadrático médio em torno do equilíbrio quando o sólido se funde e seja $f = x_0/d$. Usando $\langle U \rangle = m\omega^2 x_0^2/2$ estime $f$ para um dado elemento cuja massa atômica é $m = 10^{-25}$ kg, a temperatura de fusão é $T_F = 1400$ K, $d = (10/3)\text{Å} = (10/3) \times 10^{-10}$ m e a frequência é tal que $\hbar\omega/k_B = 300$ K.

## (2016-1) Sistema de spins 1/2

Considere um sistema de $N$ spins 1/2 não-interagentes, com momento de dipolo magnético de módulo $\mu$, na presença de um campo magnético uniforme $B$.

(a) Escreva a Hamiltoniana do sistema.

(b) Considerando o sistema em equilíbrio térmico à temperatura inversa $\beta = 1/k_B T$, calcule a função de partição $Z(\beta, B)$.

(c) Calcule a magnetização como função de $T$ e $B$.

(d) Obtenha a expressão para $M$ no limite de altas temperaturas e campo magnético fraco.

## (2015-2) Moléculas distinguíveis

Considere um sistema composto por um número grande de moléculas distinguíveis $N$, que não interagem entre si. Cada molécula tem dois estados de energia possíveis: 0 e $\epsilon > 0$.

(a) Obtenha a densidade de entropia $S/N$ do sistema como função apenas da energia média por molécula $E/N$, de $\epsilon$ e da constante de Boltzmann $k_B$.

(b) Considerando o sistema em equilíbrio térmico à temperatura inversa $\beta = 1/k_B T$, calcule $E/N$.

(c) Qual o valor máximo para $E/N$ no caso acima? Compare com o valor máximo dessa grandeza caso fosse possível que todos os elementos do sistema estivessem no estado de máxima energia.

## (2015-1) Osciladores tridimensionais

Considere $N$ osciladores harmônicos tridimensionais clássicos não-interagentes, de massa $m$ e frequência angular $\omega$, em contato com um reservatório térmico à temperatura $T$.

(a) Escreva o Hamiltoniano do sistema e obtenha a função de partição canônica.

(b) Obtenha o valor médio da energia por oscilador. Qual a capacidade térmica do sistema?

## (2014-2) Gás monoatômico clássico

Considere um gás monoatômico clássico constituído por $N$ átomos não interagentes de massa $m$ confinados num recipiente de volume $V$, à temperatura $T$. A Hamiltoniana correspondente a um átomo é dada por $\mathcal{H} = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m$.

(a) Mostre que a função de partição canônica atômica é dada por $\zeta = V/\lambda^3$ onde $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ é o comprimento de onda térmico de de Broglie.

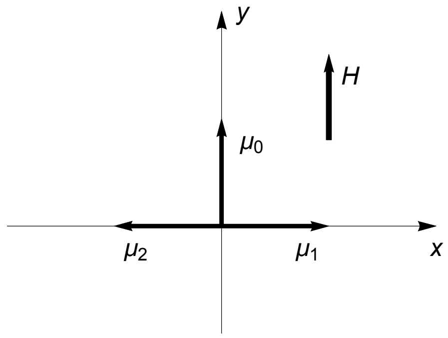
(b) Utilizando $\zeta$ do item anterior obtenha a função de partição $Z$ do sistema e a energia livre de Helmholtz $F$. Obtenha também a energia livre por átomo, $f = F/N$ no limite termodinâmico $N \to \infty$, $V \to \infty$, $v = V/N$ fixo.

(c) Obtenha a energia interna $U$ e a pressão $p$ do gás.

(d) Calcule a entropia por átomo no limite termodinâmico.

## (2014-1) Material paramagnético

Um determinado material magnético é composto por $N$ átomos magnéticos não-interagentes, cujos momentos magnéticos $\boldsymbol{\mu}$ podem apontar em três direções possíveis, conforme mostra a figura abaixo: $\boldsymbol{\mu}_0 = \mu\hat{\boldsymbol{y}}$, $\boldsymbol{\mu}_1 = \mu\hat{\boldsymbol{x}}$ e $\boldsymbol{\mu}_2 = -\mu\hat{\boldsymbol{x}}$. O sistema encontra-se em equilíbrio térmico à temperatura $T$ na presença de um campo magnético $\boldsymbol{H} = H\hat{\boldsymbol{y}}$ de modo que os níveis de energia correspondentes a um único átomo são $\epsilon_0 = -\mu H$, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$.




(a) Obtenha a função de partição canônica $z$ de um átomo, a função de partição canônica $Z$ do sistema e a energia livre de Helmholtz $f$ por átomo.

(b) Determine a energia média $u = \langle \epsilon_n \rangle$ e a entropia $s$ por átomo.

(c) Obtenha a magnetização por átomo $\boldsymbol{m} = m_x\hat{\boldsymbol{x}} + m_y\hat{\boldsymbol{y}} + m_z\hat{\boldsymbol{z}} = \langle \boldsymbol{\mu} \rangle$.

(d) Verifique que a susceptibilidade isotérmica $\chi_T = (\partial m_y/\partial H)_T$ a campo nulo obedece a lei de Curie, $\chi_T \propto 1/T$.

## (2013-2) Oscilador harmônico quântico modificado

Considere um oscilador harmônico unidimensional modificado, definido pela função hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

onde $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ para $x \geq 0$ e $V(x) = \infty$ para $x < 0$. Ele encontra-se em equilíbrio térmico com um reservatório de calor a temperatura $T$.

(a) Justifique, em termos de paridade das autofunções do problema quântico, por que, devido às condições impostas, apenas os valores inteiros ímpares de $n$ são permitidos para as autoenergias deste oscilador, $\epsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

(b) Para a versão quântica, obtenha a função de partição canônica $z$ deste oscilador e a energia livre de Helmholtz associada $f$.

(c) Obtenha a energia interna média deste oscilador a partir de $u = -\partial \ln z/\partial\beta$.

(d) A partir da definição de energia interna média no ensemble canônico, $u \equiv \langle\epsilon_n\rangle$, demonstre a expressão $u = -\partial \ln z/\partial\beta$.

(e) Mostre que a função de partição canônica clássica deste oscilador é dada por $z_{\text{class}} = (2\beta\hbar\omega)^{-1}$. Determine a energia interna média clássica associada, $u_{\text{class}} \equiv \langle\mathcal{H}\rangle_{\text{class}}$.

## (2013-1) Gás ideal monoatômico

Um gás ideal monoatômico de $N$ moléculas de massa $m$ está em equilíbrio térmico a uma temperatura absoluta $T$. O gás está contido em uma caixa cúbica de aresta $L$, cujos lados de baixo e de cima estão paralelos à superfície da terra. Considere o efeito do campo gravitacional sobre as moléculas. A aceleração da gravidade é $g$. Determine:

(a) A função de partição de uma molécula do gás.

(b) A energia cinética média de uma molécula do gás.

(c) A energia potencial média de uma molécula do gás.

(d) A energia potencial média de uma molécula do gás no caso em que $mgL/k_BT \leq 1$. Faça o cálculo até segunda ordem na razão $mgL/k_BT$.

## (2012-2) Gás de partículas ultra-relativísticas

Considere um gás composto por $N$ partículas ultra-relativísticas (de forma que sua energia $\varepsilon$ possa ser escrita como $\varepsilon = cp$, onde $p$ é o seu momento linear) confinado em um recipiente de volume $V$ e a temperatura $T$. Suponha que as partículas sejam indistinguíveis e não interagentes e que sua energia térmica seja suficientemente alta para desprezar efeitos quânticos.

(a) Mostre que a função de partição do gás é $Z = \frac{(8\pi V)^N}{N!(hc/k_BT)^{3N}}$, onde $h$ é a constante de Planck, $c$ é a velocidade da luz no vácuo e $k_B$ é a constante de Boltzmann.

(b) Determine a pressão do gás.

(c) Calcule a entropia do gás.

(d) Determine a energia interna do gás.

## (2012-1) Sistema com dois compartimentos

Considere um sistema formado por duas partículas distinguíveis, 1 e 2. Cada uma delas deve estar em um de dois compartimentos, $A$ e $B$. A energia de uma partícula é zero quando ela se encontra no compartimento $A$ e $\varepsilon$ quando ela se encontra no compartimento $B$. Quando as duas partículas estão no mesmo compartimento, há um custo adicional $\Delta$. O sistema está em equilíbrio com um banho térmico à temperatura $T$.

(a) Quais são as possíveis configurações do sistema? Determine a energia de cada uma delas.

(b) Calcule a função de partição $Z$.

(c) Qual a probabilidade de cada configuração?

(d) Calcule a energia média do sistema.

(e) Obtenha a entropia do sistema em termos de $Z$.

## (2011-2) Radiação de corpo negro

A lei de Stefan-Boltzmann diz que a densidade de energia total do campo eletromagnético dentro de uma cavidade em equilíbrio térmico é dada por

$$u(T) = aT^4$$

onde $a$ é uma constante.

(a) Podemos derivar a lei de Stefan-Boltzmann usando argumentos termodinâmicos. Sabendo que, em equilíbrio termodinâmico, a densidade de energia da radiação independe do material que forma as paredes, podemos concluir que qualquer variável extensiva da radiação em uma cavidade deverá ser proporcional ao volume da cavidade e depender apenas da temperatura. Em particular, a energia interna e a entropia da radiação serão $U = Vu(T)$ e $S = Vs(T)$, respectivamente. Podemos usar o eletromagnetismo clássico para calcular a pressão de radiação nas paredes da cavidade. Ela tem a forma de $P = u(T)/3$. Usando essas informações e a primeira lei da termodinâmica, demonstre a lei de Stefan-Boltzmann.

(b) Agora obtenha esse resultado usando física estatística, assumindo que a radiação eletromagnética é um gás de fótons.

   i. Calcule a função de partição $Z$ e mostre que o número médio de fótons com energia $\epsilon_j$ é

   $$\bar{n}_j = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial \epsilon_j} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_j} - 1}$$

   onde $\beta = 1/k_B T$.

   ii. Obtenha a lei de Stefan-Boltzmann. Você pode usar que o número total de fótons por unidade de volume e frequência entre $[\omega, \omega + \mathrm{d}\omega]$ é dado por

   $$g(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \kappa\frac{\omega^2\,\mathrm{d}\omega}{e^{\beta\epsilon_\omega} - 1}$$

   onde $\kappa$ é uma constante e $\epsilon_\omega = \hbar\omega$ é a energia de um fóton.

### (2011-1) Cristal magnético

Imagine que um material magnético unidimensional possa ser modelado como uma cadeia linear de $N+1$ spins. Cada spin interage com seus primeiros vizinhos de tal maneira que a energia do sistema seja $E = n\epsilon$ onde $n$ é o número de paredes de domínio separando regiões de spin $\uparrow$ das regiões de spin $\downarrow$, como representado na figura abaixo, sendo as paredes de domínio indicadas por linhas tracejadas. A energia por parede de domínio é $\epsilon$. Considere $N \gg 1$ e $n \gg 1$.

(a) Determine quantas maneiras as $n$ paredes de domínio podem ser arranjadas.

(b) Determine a entropia $S(E)$ do sistema contendo $n$ paredes de domínio.

(c) Determine a energia interna $E$ como função da temperatura, $E(T)$. Expresse seu resultado em termos de $N$, $\epsilon$, $T$ e constantes físicas apenas.

(d) Esboce a função $E(T)$, indicando os valores de $E$ para $T = 0$ e $T \to \infty$.

### (2010-2) Gás de partículas interagentes

A função de partição de um gás monoatômico de $N$ partículas interagentes pode ser escrita como:

$$Z = \left(\frac{V - Nb}{N}\right)^N \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2} \exp\left(\frac{N^2 a}{Vk_BT}\right)$$

onde $a$ e $b$ são constantes positivas e $m$ é a massa da partícula.

(a) Determine a energia livre de Helmholtz do gás.

(b) Determine a equação de estado desse gás, em termos da pressão, do volume específico $v = V/N$, da temperatura e de constantes.

(c) Determine a energia interna específica $u = U/N$ do gás.

(d) Considere que o gás sofra um processo de expansão livre no qual seu volume inicial $V$ é duplicado no interior de um recipiente feito de paredes adiabáticas. Calcule a variação da temperatura absoluta que ocorre no processo.

### (2010-1) Moléculas polares em um campo elétrico

Um gás ideal de moléculas diatômicas polares, cada uma com momento de dipolo elétrico $\boldsymbol{\mu}$, encontra-se a uma temperatura $T$ e está sujeito a um campo elétrico $\boldsymbol{\mathcal{E}}$. As orientações dos dipolos são definidas pelos ângulos $\theta$ $(0 \le \theta \le \pi)$ e $\phi$ $(0 \le \phi \le 2\pi)$ de um sistema de coordenadas esféricas cujo eixo $z$ é paralelo ao campo létrico. A probabilidade de encontrar uma molécula com orientação do dipolo dentro do elemento $\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$ vale $\rho\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$ onde a densidade de probabilidade $\rho(\theta, \phi)$ é dada por

$$\rho(\theta, \phi) = \frac{1}{A} \sin\theta e^{-\beta E}$$

e está normalizada de acordo com $\int \rho(\theta, \phi)\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = 1$. A constante $A$ é um fator de normalização, $\beta = 1/k_BT$é a constante de Boltzmann e $E$ é a energia de interação do momento de dipolo com o campo, dada por $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}$.

(a) Determine $A$ como função de $T$, $\mathcal{E}$ e $\mu$.

(b) O momento de dipolo médio por molécula é definido pela média $P = \mu\langle\cos\theta\rangle$. Determine $P$ como função de $T$ e $\mathcal{E}$.

(c) Esboce o gráfico de $P$ versus $\mathcal{E}$ para $T$ constante.

(d) A susceptibilidade elétrica é definida por $\chi = \partial P/\partial \mathcal{E}$. Determine $\chi$ a campo nulo e mostre que ela é inversamente proporcional à temperatura $T$. Notar que para pequenos valores de $x$ vale $\coth x \simeq 1/x + x/3$.

### (2009-2) Átomos localizados e não interagentes

Considere um sistema de $N$ átomos localizados e não interagentes. Cada átomo pode estar em um dos três estados quânticos rotulados pelo número quântico $k$, com $k = -1, 0, 1$. Um átomo tem a mesma energia $\varepsilon_1 > 0$ no estado $k = 1$ ou no estado $k = -1$. Um átomo no estado $k = 0$ tem energia $\varepsilon_0 = 0$. Determine

(a) A função de partição do sistema.

(b) A probabilidade $p_0$ de um átomo se encontrar no estado com energia 0. Determine o comportamento de $p_0$ nos limites de altas e baixas temperaturas e esboce o gráfico de $p_0$ versus $T$.

(c) As expressões para a energia interna e para a entropia como função da temperatura $T$. Determine os valores assintóticos da energia e da entropia nos limites de altas e baixas temperaturas. A terceira lei da termodinâmica é observada?

(d) Esboce o gráfico da entropia como função da temperatura.