Prova de Mecânica Estatística - Exame de qualificação
Doutorado em Física da matéria condensada - UFAL

1) Derive a equação de estado de um gás ideal monoatômico confinado em um volume V usando o ensemble grand-canônico clássico(considere um contato permeável com um grande reservatório de temperatura T).

solução

O Hamiltoniano do gás ideal monoatômico é dado por:

$$H_N = \sum_{n=1}^{N} p_n^2/2m$$

Vamos calcular agora a função de Grand-partição $\mathcal{Z}$, definida por:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta\mu N}}{N!h^{3N}} V^N \int d^{3N}pe^{-\beta H_N}$$

logo temos

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{-\alpha N}}{N!h^{3N}} V^N (2\pi m/\beta)^{3N/2}$$

fazendo $\lambda = h/\sqrt{(2\pi mkT)}$ temos

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} (\frac{Ve^{-\beta\mu}}{\lambda^3})^N = \exp \frac{e^{-\beta\mu}V}{\lambda^3}$$

O potencial grand-canônico é dado por :

$$\Phi = \log \mathcal{Z} = \frac{e^{-\beta\mu}V}{\lambda^3}$$

Logo usando as derivadas termodinâmicas apropriadas temos:

$$N = -\frac{\partial\Phi}{\partial(\beta\mu)} = \frac{e^{-\beta\mu}V}{\lambda^3}$$

$$U = -\frac{\partial\Phi}{\partial\beta} = \frac{3}{2\beta} \frac{e^{-\beta\mu}V}{\lambda^3}$$

$$\beta p = \frac{\partial\Phi}{\partial V} = \frac{e^{-\beta\mu}}{\lambda^3}$$

Logo combinando estas equações chegamos nas equações de um gás ideal monoatômico

$$E/N = \frac{3}{2}kT$$

e

$$pV = NkT$$

2)Em 1906 Berthelot propôs uma equação de estado para um gás ideal :

$$(p + \frac{a}{kTv^2})(v - v_0) = kT$$

onde a e v_0 são constantes, $v = V/N$. Suponha que um dado gás diatômico satisfaa a equação de Berthelot e suponha as seguintes condições:$v \to \infty$ e $\epsilon = U/N = \frac{5}{2}kT$ onde ϵ é a energia interna por partícula. (a)Determine a energia

livre de Helmothz $f = F/N$ por partícula (a resposta deve ser expressa em função de uma constante de integração).
(b) Determine o calor específico a volume constante por partícula.

.

solução

a) Em termos de $\beta = 1/kT$, a equação de Berthelot é dada por:

$$\beta p = -\frac{a\beta^2}{v^2} + \frac{1}{v - v_0}$$

seja $f = F/N$ temos $\beta p = \frac{\partial f}{\partial v}$. Logo podemos integrar a equação anterior para obter f.

$$f = \frac{a\beta^2}{v} + \log\left(v - v_0\right) + A(\beta),$$

onde $A(\beta)$ é uma função que precisamos encontrar. A energia por partícula ϵ é dada por :

$$\epsilon = \frac{\partial f}{\partial \beta} = -\frac{2a\beta}{v} + A^{'}(\beta).$$

Utilizando a condição dada $v \to \infty$ e $\epsilon = U/N = \frac{5}{2}kT$ temos

$$A^{'}(\beta) = -\frac{5}{2\beta}$$

Logo, a menos de uma constante de integração, a energia livre de Helmothz $f = F/N$ é dada por

$$f = \frac{a\beta^2}{v} + \log\left(v - v_0\right) + \frac{5}{2\beta}.$$

b) A energia livre por partícula é dada por :

$$\epsilon = \frac{\partial f}{\partial \beta} = -\frac{2a}{kTv} + \frac{5}{2}kT$$

Logo, o calor específico a volume constante é dado por :

$$C_v = \frac{\partial \epsilon}{\partial T} = \frac{2a}{kTv^2} + \frac{5}{2}k$$

3) Considere um gás clássico relativístico. A relação entre a energia e o momento de uma dada parícula deste gás é dada por:

$$E(|\vec{p}|) = c|\vec{p}|$$

onde c é a velocidade da luz. Calcule a pressão P(N,T) e a energia interna U(N,T) deste gás e mostre que $pV = U/3$.

solução

A função de partição de um sistema de N partículas não interagentes em um volume V é dada por:

$$Z = \frac{V^N}{h^{3N}N!}(4\pi \int_0^\infty e^{-\beta c p} p^2 dp)^N$$

mas:

$$\int_0^\infty e^{-\beta c p} p^2 dp = \frac{1}{(\beta c)^3} \int_0^\infty e^{-x} x^2 dx = \frac{2}{(\beta c)^3}$$

Logo temos

$$Z = \frac{(8\pi)^N V^N}{(\beta ch)^{3N} N!}$$

a energia livre de Helmothz é dada por

$$F = N[\log(V/N) - 3\log\beta + constantes]$$

A pressão e a energia interna são dados por:

$$\beta p = \frac{\partial F}{\partial V} = \frac{N}{V}$$

$$U = -\frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{3N}{\beta}$$

logo combinando as equação acima temos $pV = U/3$.

4)Considere um sistema de N férmions não interagentes com uma densidade de estados $D(\epsilon)$. Determine, no regime de baixas temperaturas ($kT << \epsilon_F$), a dependência do potencial químico com a temperatura. dados : expansão da integral do número de férmions :

$$I = \int_0^\infty \frac{D(\epsilon)d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/kT}+1} = \int_0^\mu D(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6}D^{'}(\mu)(kT)^2 + \frac{7\pi^4}{360}D^{'''}(\mu)(kT)^4 + ...$$

solução

O número de partículas é dada por:

$$N = \int_0^\infty \frac{D(\epsilon)d\epsilon}{e^{(\epsilon-\nu)/kT}+1}$$

Em baixa temperatura podemos usar a expansão dada para a integral de N, logo:

$$N = \int_0^\mu D(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6}D^{'}(\mu)(kT)^2.$$

Em $T = 0$, $\mu = \epsilon_F$. Logo, em baixa temperatura podemos escrever $\mu = \epsilon_F + \delta\mu$ e fazer uma expansão da integral de N em torno de ϵ_F. :

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon)d\epsilon + D(\epsilon_F)\delta\mu + \frac{\pi^2}{6}D^{'}(\epsilon_F)(kT)^2.$$

Lembrando que $N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon)d\epsilon$ temos:

$$\delta\mu = -\frac{\pi^2 k^2 T^2 D^{'}(\epsilon_F)}{6D(\epsilon_F)}$$

logo

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2 k^2 T^2 D^{'}(\epsilon_F)}{6D(\epsilon_F)}$$

.