



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física

Exame Geral de Doutorado
Segundo semestre de 2024

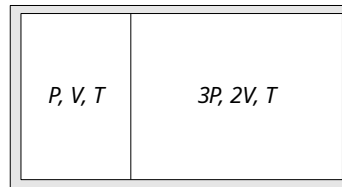
Mecânica Estatística

06/08/2024 - 09:00 às 12:00

(Escolha três dentre as quatro questões)

QUESTÃO 1: TERMODINÂMICA

Considere um sistema termicamente isolado consistindo de dois volumes, V e $2V$, de um gás ideal separado por uma parede termicamente condutora e móvel, mas que inicialmente se encontra fixa. O gás de volume V tem, inicialmente, temperatura T e pressão P ; o gás de volume $2V$ tem, inicialmente, pressão $3P$ e temperatura T , como mostrado na figura abaixo.



A parede é então **liberada para mover-se**. Quando o equilíbrio é alcançado:

- (a) (40%) Obtenha a pressão de equilíbrio em termos da pressão P .
 - (b) (20%) Qual é a variação na energia interna de cada gás e qual a variação da energia interna total do sistema?
 - (c) (40%) Qual é a variação na entropia total do sistema? Escreva seu resultado em termos de P , V e T .
-

QUESTÃO 2: ENSEMBLE CANÔNICO

Um "gás de rede" consiste em uma rede de N sítios independentes, onde cada sítio pode estar vazio, com energia zero, ou ocupado por uma partícula, com energia ϵ . Além disso, cada partícula possui um momento de dipolo magnético de módulo igual a μ . Suponha que, na presença de um campo magnético H , cada momento só pode estar paralelo ou antiparalelo ao campo. Podemos escrever a energia de cada sítio na forma

$$E_1 = n(\epsilon - j\mu H),$$

onde $n = 0$ se o sítio estiver vazio, ou $n = 1$ se ele estiver ocupado, e $j = \pm 1$ dependendo da orientação do momento em relação ao campo magnético.

- (a) (20%) Determine a função de partição canônica de um sítio, $Z_1(\beta, H)$, onde $\beta = 1/k_B T$.
- (b) (20%) Determine a função de partição canônica do gás de rede, $Z(\beta, H)$.
- (c) (20%) Mostre que a energia média do sistema pode ser escrita como

$$\langle E \rangle = - \left(\frac{\partial \{\ln[Z(\beta, H)]\}}{\partial \beta} \right)_H.$$

- (d) (20%) Calcule a energia interna do sistema $U(\beta, H)$.
- (e) (20%) Calcule a função de magnetização do sistema $M(\beta, H)$.

Dados:

$$M = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \{\ln Z\}}{\partial H} \right)_\beta.$$

QUESTÃO 3: ESTATÍSTICA DE BOSE-EINSTEIN (GÁS DE FÔNONS)

Considere um sólido cristalino tridimensional com energia do estado fundamental dada por E_0 . Supondo pequenas perturbações em relação ao estado fundamental, a energia do cristal pode ser representada pela soma de E_0 com a energia de $3N$ osciladores harmônicos quânticos independentes, ou seja,

$$E = E_0 + \sum_{i=1}^{3N} n_i \hbar \omega_i,$$

onde n_i representa o número de quanta de energia associados ao modo de frequência $\omega_i = v_s k_i$, onde v_s é a velocidade do som no meio em questão e k_i o módulo do vetor de onda associado ao i -ésimo oscilador.

O modelo de Debye considera o cristal como um meio contínuo isotrópico, de volume V , de modo que

$$\sum_i \rightarrow \frac{3V}{2\pi^2} \int_0^{k_D} dk k^2.$$

A frequência de Debye, $\omega_D = v_s k_D$, caracteriza a maior frequência (ou, equivalentemente, o menor comprimento de onda) do modo de fônon no sólido.

- (a) **(20%)** Considerando a condição de normalização, onde o número total de estados até a frequência de Debye ω_D é igual ao número de graus de liberdade vibracionais ($3N$ para N átomos), calcule o valor de ω_D .
- (b) **(30%)** Sabendo que a distribuição de fônons satisfaz a estatística de Bose-Einstein, determine a energia interna do sólido de Debye. Deixe seu resultado em termos da integral de Debye $D(x)$, definida como:

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^3}{e^t - 1} dt$$

- (c) **(25%)** Analise o limite de alta temperatura e mostre que, nesse limite, a energia interna satisfaz o teorema da equipartição de energia.
- (d) **(25%)** Determine a capacidade calorífica a volume constante C_V do sólido nos limites $T \ll \Theta_D$ e $T \gg \Theta_D$, onde $\Theta_D = \hbar \omega_D / k_B$ é a temperatura de Debye.

Dados:

$$n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1}$$

$$\int_0^\infty \frac{t^3}{e^t - 1} dt = \frac{\pi^4}{15}$$

QUESTÃO 4: MODELO DE ISING

O modelo de Ising unidimensional ferromagnético a campo nulo é dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{N+1} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1},$$

com $J > 0$ e $\sigma_i = \pm 1$ para todos os $N + 1$ sítios.

(a) (40%) Calcule a função de partição Z_{N+1} e prove que

$$Z_{N+1} = 2 [2 \cosh(\beta J)]^N,$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$. Dica: Note que $\mathcal{H}_{N+1} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - J \sigma_N \sigma_{N+1} = \mathcal{H}_N - J \sigma_N \sigma_{N+1}$. Use um procedimento recursivo.

(b) (30%) Obtenha expressões para a energia livre de Helmholtz F , entropia S , e a energia interna U .

(c) (30%) É possível mostrar que a função de correlação de spin é dada por $\Gamma_{i,j} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = [\tanh(\beta J)]^{|i-j|}$, onde $|i-j|$ é a distância entre os sítios i e j . Mostre que isso significa que a função de correlação decai exponencialmente com o aumento da distância $|i-j|$ na escala do chamado comprimento de correlação ξ . Encontre ξ e comente sobre o comprimento de correlação no limite de $T \rightarrow 0$.
