



Universidade Federal de Pernambuco

Departamento de Física

Exame Geral de Doutorado

Segundo Semestre de 2022

Mecânica Estatística

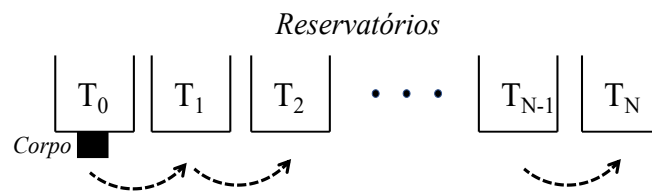
09/08/2022 - 09h00 às 12h00

(Escolha três dentre as quatro questões)

QUESTÃO 1 – TERMODINÂMICA: PROCESSOS REVERSÍVEIS

Considere uma série de $N+1$ reservatórios térmicos com temperaturas $T_0, T_1, T_2, \dots, T_N$ (com $T_n > T_{n-1}$). Um pequeno corpo, com capacidade térmica a volume constante C_V independente da temperatura, é colocado inicialmente em equilíbrio térmico com o reservatório térmico de temperatura T_0 . O corpo é então removido deste reservatório e colocado no reservatório térmico de temperatura T_1 até entrar em equilíbrio térmico com este. O processo é repetido até que, após N etapas, o corpo se encontra em equilíbrio térmico com o reservatório de temperatura T_N , conforme indicado na figura abaixo. Em seguida, a sequência é repetida no sentido inverso até o corpo ser novamente colocado no reservatório inicial de temperatura T_0 . Considere que a razão entre as temperaturas de reservatórios sucessivos é constante e dada por:

$$T_n/T_{n-1} = (T_N/T_0)^{1/N}.$$



Nos itens abaixo, despreze qualquer mudança de temperatura dos reservatórios e use a aproximação de que para valores grandes de N , tem-se $N(x^{1/N} - 1) \approx \ln x + (\ln x)^2/2N$.

- (a) (35%) Calcule a variação total de entropia do sistema (corpo e reservatórios) quando o corpo é aquecido de T_0 a T_N .
 - (b) (35%) Calcule a variação total de entropia do sistema (corpo e reservatórios) quando o corpo é em seguida resfriado de T_N a T_0 .
 - (c) (30%) A partir dos resultados anteriores, analise em que condições o processo total é reversível, se T_0 e T_N são mantidos constantes. Discuta este resultado à luz da segunda lei da termodinâmica.
-

QUESTÃO 2 – ENSEMBLE CANÔNICO CLÁSSICO

Considere N partículas distinguíveis não interagentes em equilíbrio térmico a uma temperatura T . Cada partícula só pode ocupar dois estados possíveis de energia $E_1 = 0$ e $E_2 = \epsilon$, onde $\epsilon > 0$.

- (a) (20%) Encontre a função de partição $Z(T)$ do sistema.
- (b) (25%) Calcule a capacidade calorífica do sistema em função da temperatura. Determine seu valor no limite de altas temperaturas.
- (c) (30%) Obtenha a energia livre F do sistema à temperatura T e calcule a entropia S em função da temperatura. Obtenha a entropia S nos limites de baixas e altas temperaturas e interprete seus resultados em ambos os casos.
- (d) (25%) Qual é o número médio de partículas $\langle n_1 \rangle$ e $\langle n_2 \rangle$ em cada um dos dois estados? Deduza uma expressão para a entropia S em termos das ocupações relativas $\langle n_1 \rangle/N$ e $\langle n_2 \rangle/N$.

Dados:

$$Z = \sum_{n_1, n_2, n_1+n_2=N} \frac{N!}{n_1!n_2!} e^{-\beta(n_1 E_1 + n_2 E_2)}.$$

QUESTÃO 3 – ESTATÍSTICA QUÂNTICA: FERMI-DIRAC

Considere férmions não-interagentes de *spin* 1/2 (elétrons) em duas dimensões (2D) com uma relação de dispersão linear dada por:

$$\varepsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm \hbar v_F |\vec{k}|,$$

onde v_F é a velocidade de Fermi e \vec{k} o vetor de onda. Os estados com energia positiva (ε_+) definem a banda de condução e os estados com energia negativa (ε_-) definem a banda de valência. Usando condições de contorno periódicas em uma região quadrada de área A e considerações de simetria, a densidade de estados de uma partícula pode ser expressa por:

$$D(\varepsilon) = D(-\varepsilon) = \frac{A}{\pi \hbar^2 v_F^2} |\varepsilon|,$$

Na temperatura $T = 0$ a banda de valência está completamente preenchida, enquanto que a banda de condução está completamente vazia. Em temperatura T finita, elétrons podem ser excitados da banda de valência para a banda de condução, criando buracos (estados desocupados) e elétrons (estados ocupados), respectivamente nestas duas bandas. Considere que o potencial químico $\mu(T) = 0$ em qualquer temperatura T e que a soma das probabilidades de se encontrar estados ocupados e desocupados é igual a 1.

- (a) (20%) Usando a distribuição de Fermi-Dirac, mostre que a probabilidade de encontrar um elétron com energia ε_+ é igual à probabilidade de encontrar um buraco na energia ε_- .
 - (b) (25%) A conservação do número de partículas requer que o número de elétrons (N_e) na banda de condução seja igual ao número de buracos (N_b) na banda de valência, $N_e = N_b$. Mostre que esta condição vale para qualquer valor de T .
 - (c) (35%) Encontre a energia interna total das excitações acima do estado $T = 0$, isto é, $U(T) - U(0)$, em termos de A, v_F, \hbar e da constante de Boltzman k_B . Observe que como estamos subtraindo $U(0)$ na banda de valência, você só precisa considerar a energia associada aos buracos.
 - (d) (20%) Use o resultado do item anterior para encontrar a capacidade calorífica na área constante $C_A(T) \propto T^\alpha$. Qual é o valor do expoente α ?
-

Dado:

$n! \int_0^\infty \frac{x^n}{e^x + 1} = (1 - 2^{-n}) \zeta(n+1)$, onde $\zeta(n+1) = \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^{n+1}}$ é a função zeta de Riemann.

$$\text{Número de ocupação para férmions: } n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

QUESTÃO 4 – SISTEMAS INTERAGENTES

A hamiltoniana de um sistema de *spins* tipo Ising, dispostos ao longo de um anel, como mostrado na figura abaixo, pode ser descrita por:

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

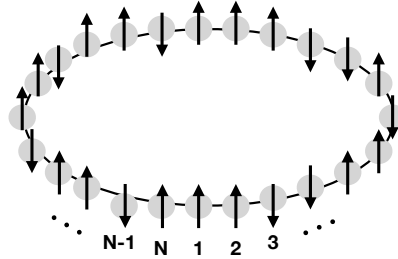
onde J é a energia de interação entre pares de spins e σ_i satisfaz às seguintes relações:

$$\sigma_i^2 = 1; \quad \sigma_i \sigma_j (i \neq j) = \pm 1; \quad \sigma_{N+1} = \sigma_1,$$

com,

$$e^{\frac{J\sigma_i\sigma_{i+1}}{k_B T}} = \cosh\left(\frac{J}{k_B T}\right) + \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh\left(\frac{J}{k_B T}\right).$$

.



- (a) (25%) Mostre que a função de partição, quando o sistema encontra-se em uma temperatura T , é dada pela expressão:

$$Z = 2^N \left\{ \left[\cosh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \right]^N + \left[\sinh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \right]^N \right\}$$

- (b) (25%) A partir da função de partição acima, escreva a expressão para a energia livre de Helmholtz F do sistema e obtenha o seu limite para $N \gg 1$.
- (c) (25%) Calcule a capacidade calorífica $C(T)$ para o sistema de *spins* no limite $N \gg 1$ e faça um esboço de sua dependência com a temperatura T . Comente, com base nesta dependência, os resultados obtidos para $T = 0$ e $T \rightarrow \infty$.
- (d) (25%) Calcule a entropia S do sistema no mesmo limite $N \gg 1$. Obtenha ainda os valores de $S(T)$ para os regimes de baixas e altas temperaturas, isto é, $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$. Discuta os resultados obtidos nestes regimes.
-