UFABC – FIS104 Mecânica Estatística 2015 (2 quad.)
LISTA 3 - Ensemble canônico

1. Considere um gás de osciladores harmônicos unidimensionais não interagentes em equilíbrio a uma temperatura T. Encontrar a função de partição $Q_N(V,T)$, a energia livre de Helmholtz $F(V,T)$, a energia interna, a pressão, a entropia, o potencial químico e o calor especifico a volume constante no caso (a) clássico e (b) quântico.

2. Paramagnetismo: Considere um gás de N dipolos magnéticos idênticos, distinguíveis, praticamente estáticos, que podem se orientar livremente num campo magnético externo H. Calcule a magnetização média por unidade de volume M_{z0} e a susceptibilidade magnética χ. Mostre que se verifica a lei de Curie do paramagnetismo. Faça os cálculos no caso (a) clássico e (b) quântico.

3. Considere um sistema com dois níveis de energia E_0 e E_1, os quais são ocupados por N partículas clássicas distinguíveis e não interagentes. (a) Encontre a função de partição canônica do sistema. (b) encontre a energia média por partícula para uma temperatura T. (c) Considere $E_1 > E_0 > 0$. Determine a energia média por partícula nos limites $T \to 0$ e $T \to \infty$. Que fração das partículas ocupam o nível E_0 quando $T = 0$? Que fração das partículas ocupam o nível E_0 quando $T \to \infty$?

4. Considere um gás de moléculas poliatômicas não-interagentes com momentos de inércia $I_1 = I_2$ e I_3. Suponha que os graus de liberdade rotacionais são descritos pelo Hamiltoniano clássico:
$$H_{ROT} = \frac{p_\theta^2}{2I_1} + \frac{p_\psi^2}{2I_3} + \frac{(p_\phi - p_\psi \cos\theta)^2}{2I_1 \sin^2\theta}, \tag{1}$$
onde (θ, ϕ, ψ) são os ângulos de Euler, e $(p_\theta, p_\phi, p_\psi)$ os momentos correspondentes. Calcule a função de partição, a energia libre de Helmholtz e a energia interna para os graus de liberdade rotacionais.

5. Um cristal perfeito possui N sítios de rede e M espaços intersticiais. É necessária uma energia Δ para remover um átomo de um sítio e colocá-lo em um interstício. Considere que o número n de átomos deslocados (i.e. fora dos sítios) é pequeno, i.e. $n \ll N$, $n \ll M$.

   (a) quantas maneiras existem de remover n átomos de N sítios?

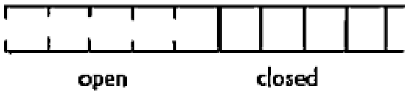
   (b) quantas maneiras existem de colocar n átomos em M interstícios?

   (c) Utilize o conjunto microcanônico para calcular a entropia como função da energia total E, e defina a temperatura.

   (d) Mostre que o número médio de átomos deslocados, n, à temperatura T é dado por:
   $$\frac{n^2}{(N-n)(M-n)} = e^{-\Delta/kT}. \tag{2}$$
   Obtenha n para $\Delta \gg kT$, e para $\Delta \ll kT$.

(e) Utilize o presente modelo para descrever defeitos em um sólido. Considere $N = M$ e $\Delta = 1\,\mathrm{eV}$. Determine a concentração de defeitos para $T = 1000$ K e $T = 300$ K.

6. O desenrolamento de uma molécula de ADN de cadeia dupla pode ser modelado como a abertura de um zíper. O ADN tem N ligações, cada uma das quais pode estar em dois estados, um estado fechado com energia 0, e um estado aberto com energia Δ. Uma ligação pode ser aberta apenas se todos os links a sua esquerda já estão abertos, como ilustrado na figura.



   (a) Mostre que a função de partição da cadeia de DNA é

$$Q_N = \frac{1 - e^{-(N+1)\Delta/kT}}{1 - e^{-\Delta/kT}}. \tag{3}$$

   (b) Encontre o número médio de ligações abertas no limite de baixa temperatura $kT \ll \Delta$.

7. Uma partícula pode existir em apenas três estados rotulados pelo índice n, com $n = 1, 2, 3$. As energias ϵ_n destes estados dependem de um parâmetro, $x > 0$, com duas das energias degeneradas,

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = bx^2 - \frac{1}{2}cx, \qquad \epsilon_3 = bx^2 + cx, \tag{4}$$

onde b e c são constantes.

   (a) Encontre a energia livre de Helmholtz por partícula $f(x, T) = F_N(x, T)/N$ para um conjunto de N partículas, supondo que não há nenhuma interação inter-partícula.

   (b) Se permitimos que x varie mantendo T constante, ele adotará um valor de equilíbrio $\overline{x}$ que minimiza a energia livre. Encontre $\overline{x}$ como uma função de T. Mostre que existe uma transição de fase, e encontre a temperatura de transição. Suponha que $\overline{x}$ é pequeno, e expanda $\partial f(x, T)/\partial x$ em série de potências de x até ordem x^2.

Este modelo pode ser usado para descrever os íons de um cristal sujeito a uma deformação uniforme caracterizada pelo parâmetro x. A transição de fase é conhecida como transição de fase cooperativa de Jahn-Teller.