Introdução à Mecânica Estatística
Primeira Prova-9/10/2018

- Prova sem consulta e proibido o uso de calculadoras.

1) Considere um gás clássico de N moléculas diatômicas, rígidas e não interagentes dentro de um recipiente de volume V a uma dada temperatura T, descritas pela seguinte Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{p_\phi^2}{2I\sin^2\theta}. \quad (1)$$

a) Ache a função de partição $\zeta(T,V)$ de cada molécula bem como a função de partição $Z(T,V,N)$ do sistema. Justifique as considerações feitas. (1,5)
b) Ache a energia interna $U(T,V,N)$ e a pressão $p(T,V,N)$. Interprete o resultado para U usando o princípio da equipartição de energia. (1,0)
c) Ache a grande função de partição do sistema $\Xi(T,V,z)$. (1,00)
d) Ache as propriedades termodinâmicas $U(T,V,z)$ e $N(T,V,z)$ e mostre que as relação entre U e N é similar aquela obtida no tem c). (1,00)

2) Considere um sistemas de N partículas não interagentes em contato com um reservatório térmico a temperatura T. Cada partícula pode ter energia $0, \epsilon > 0$ ou 3ϵ.
a) Obtenha uma expressão para a função canônica de partição e calcule a energia interna por partícula. (1,5)
b) Calcule a entropia por partícula $s(T)$ e esboce um gráfico de s contra T. (1,25)
c) Calcule o calor específico $c(T)$ e esboce um gráfico de $c(T)$ contra T.(0,75)

3) a) Enuncie os ensembles microcanônico, canônico e grande-canônico, explicitando claramente suas diferenças. (0,5)
b) Mostre que a entropia definida por $S = -k_B \sum_j P_j \ln P_j$ (sendo P_j a probabilidade de um dado estado microscópico j) vale tanto para o ensemble microcanônico quanto para os ensembles canônico e grande-canônico. *Dica: Utilizando a distribuição de probabilidades apropriada em cada um dos casos, verifique que a fórmula acima nos leva a relações conhecidas para as quantidades estudadas nos ensembles microcanônico, canônico e grande-canônico.* (1,5)

Formulário

- $dU = TdS - PdV + \mu dN$, $F = U - TS$, $dF = -SdT - PdV + \mu dN$, $S = k_B \ln \Omega$, $\Phi = F - \mu N$, $d\Phi = -SdT - PdV - Nd\mu$.
- $Z = \sum_{estados} e^{-\beta\mathcal{H}}$, $F = -\frac{1}{\beta}\ln Z$, $\beta = 1/k_B T$.
- $U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z(T,V,N)$, $Z = \frac{\zeta^N}{N!}$ $\zeta = \int \frac{dqdp}{h} e^{-\beta\mathcal{H}}$
- $\Xi(T,V,z) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z(T,V,N)$, onde $Z(T,V,N)$ é a função de partição canônica.
- $N = z\frac{\partial}{\partial z}\ln\Xi(T,V,z)$, $U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\Xi(T,V,z)$
- $e^x = \sum_{N=0}^{\infty}\frac{x^N}{N!}$
- $P_j = \frac{1}{Z}e^{-\beta E_i}$, $P_j = \frac{1}{\Xi}e^{-\beta E_j + \beta\mu N_j}$, onde $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$ e $\Xi = \sum_i e^{-\beta E_j + \beta\mu N_j}$.

$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\Xi + \frac{\mu}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln\Xi$

$N = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\ln\Xi$