Primeira Lista de Exercícios de Mecânica Estatística

Fabio de Moraes Canedo
7994642

27 de agosto de 2018

1 P1

Estudamos aqui o caso do qutrit. Trata-se de um sistema com três estados de energia, a saber:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0 \\ E_2 &= \epsilon + \Delta \\ E_2 &= \epsilon - \Delta \end{aligned} \tag{1}$$

A quantidade mais importante para estudar as propriedades de equilíbrio desse sistema é a função de equipartição, definida por:

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \tag{2}$$

A partir dessa, todas as outras quantidades de interesse podem ser extraídas. Aplicando, então, as energias supramencionadas, obtemos:

$$Z = 1 + 2e^{-\beta\epsilon} \cosh(\beta\Delta) \tag{3}$$

Um plot dessa função pode ser observada na Figura 1.0.1

Para obtermos agora, como outras quantidades termodinâmicas se comportam, utilizamos, por exemplo, a identidade:

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \tag{4}$$

De onde podemos obter:

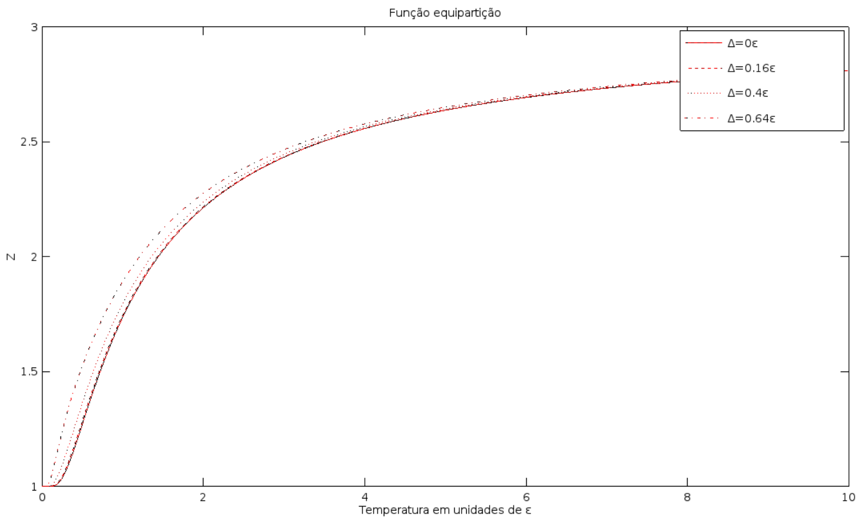

Figura 1.0.1: Função equipartição como função da temperatura em unidades de ϵ.

$$U = \frac{2(\epsilon \cosh(\beta\Delta) - \Delta \sinh(\beta\Delta))}{e^{\beta\epsilon} + 2\cosh(\beta\Delta)} \tag{5}$$

A forma dessa função, a chamada energia interna, pode ser observada na Figura 1.0.2

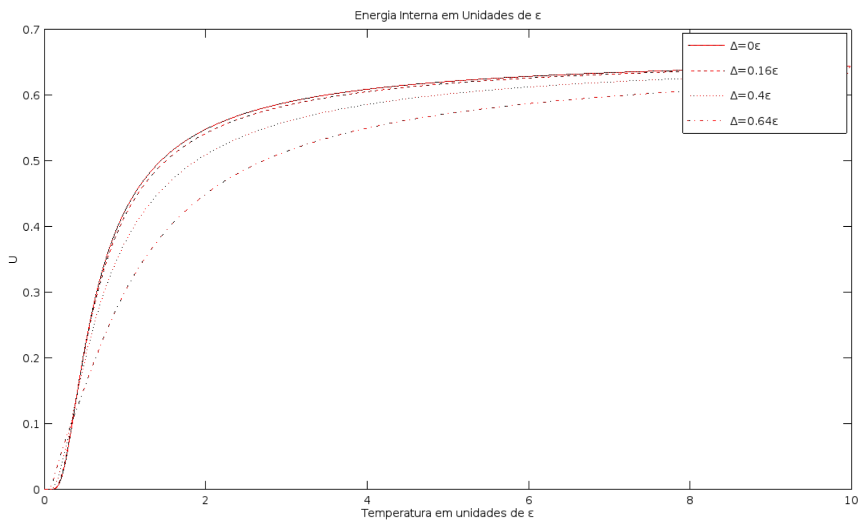

Figura 1.0.2: Energia Interna como função da temperatura do sistema calculada em unidades de ϵ.

A partir da energia interna, é possível obter também a capacidade térmica:

$$C = \frac{2\beta^2 \left(e^{\beta\epsilon}\left((\Delta^2 + e^2)\cosh(\beta\Delta) - 2\Delta\epsilon\sinh(\beta\Delta)\right) + 2\Delta^2\right)}{(2\cosh(\beta\Delta) + e^{\beta\epsilon})^2} \tag{6}$$

A forma dessa última pode ser observada na Figura 1.0.3.

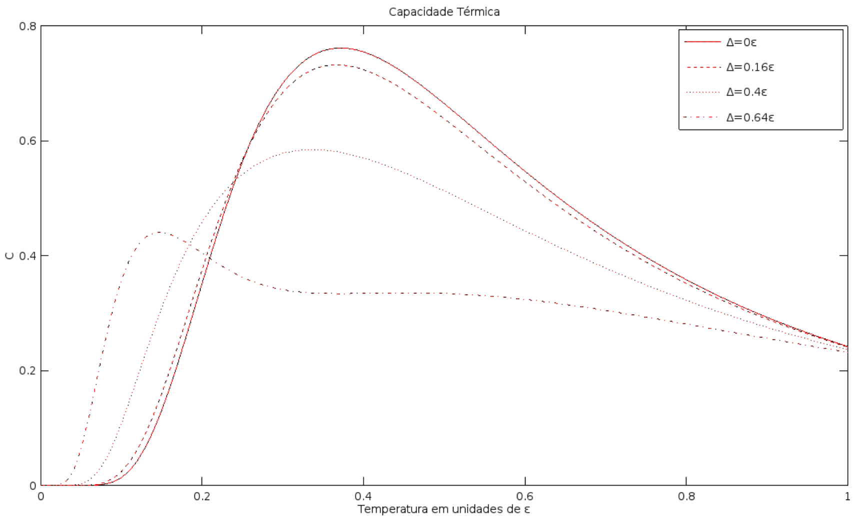

Figura 1.0.3: Capacidade Térmica como função da temperatura do sistema calculada em unidades de ϵ.

Para $T \to \infty$, teremos a capacidade térmica indo para zero. Isso está consistente com as características do sistema, para ilustrar esse ponto, basta pensarmos nas probabilidades de ocupação de cada estado, definidas por:

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \tag{7}$$

Como $T \to \infty \Rightarrow \beta \to 0$, teremos todas as probabilidades iguais a $\frac{1}{Z}$, isso resulta em estados equiprováveis e a uma energia igual à média das energias dos estados. Isso implica que a energia interna tem um limite finito bem definido, portanto, fica cada vez mais difícil acrescentar energia no sistema, de maneira que a capacidade térmica tende a zero.

Outras duas quantidades de interesse a ser calculadas são a enerfia livre de Helmholtz e a entropia do sistema, F e S, respectivamente. Estas são dadas pelas expressões:

$$\begin{aligned} F &= \frac{\ln(Z)}{\beta} \\ S &= \beta(U + F) \end{aligned} \tag{8}$$

Ambas estão plotadas nas Figuras 1.0.4 e 1.0.5.

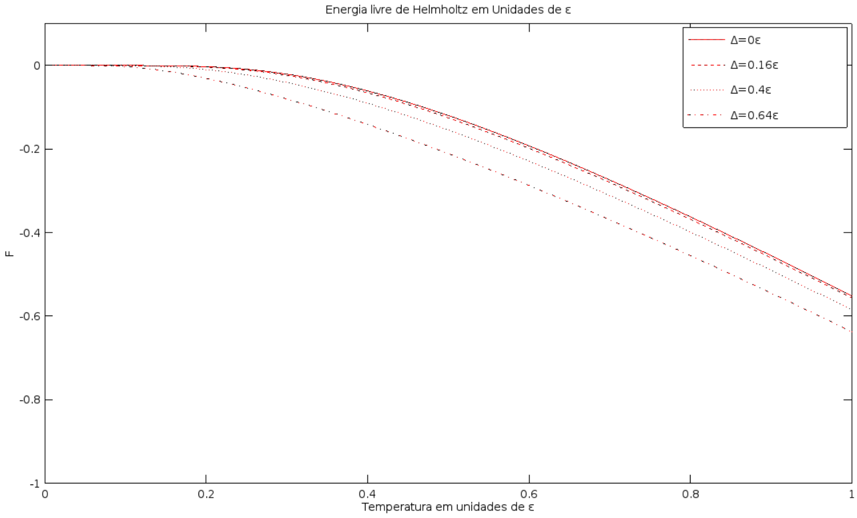

Figura 1.0.4: Energia Livre de Helmholtz como função da temperatura do sistema calculada em unidades de ϵ.

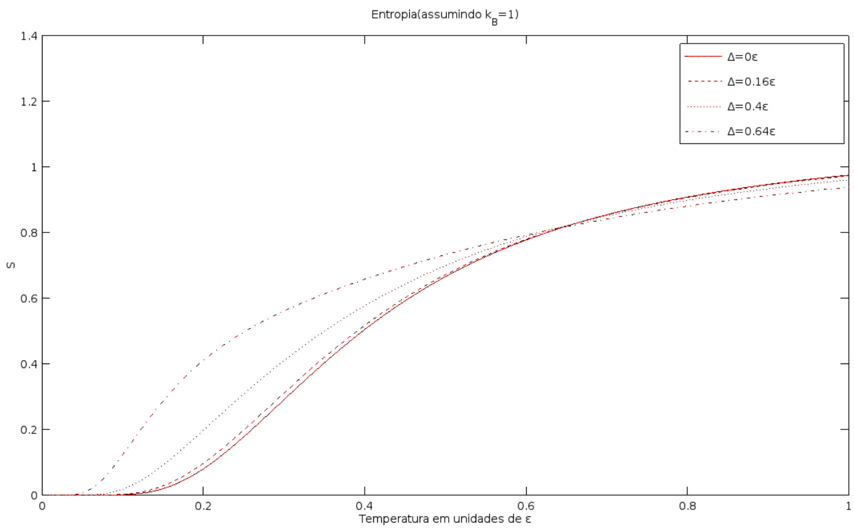

Figura 1.0.5: Entropia como função da temperatura do sistema calculada em unidades de ϵ.

É interessante notar que, para valores mais altos de Δ, a entropia possui um pico que fica maior e se desloca para a esquerda. Para $\Delta = \epsilon$ a entropia do sistema à temperatura zero na realidade é diferente de 0. Isso ocorre porque, nesse caso, o estado fundamental é degenerado e teremos $P_1 = P_3 = 0.5$ e zero para o outro estado. Utilizando a definição de entropia:

$$S = -\sum_i P_i \ln P_i \tag{9}$$

Portanto, para $T \to 0$, teremos $S \to \ln(2)$

2 P2

Para esse problema, teremos uma Hamiltoniana definida por:

$$H = kS_x^2 + \lambda S_z \tag{10}$$

Onde:

$$Sx = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, Sz = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

A Hamiltoniana escrita em forma de matriz fica então:

$$H = \begin{pmatrix} \lambda & \frac{k}{2} & 0 \\ \frac{k}{2} & 0 & \frac{k}{2} \\ 0 & \frac{k}{2} & -\lambda \end{pmatrix} \tag{12}$$

Os autovalores podem ser achados pelas raízes do polinômio característico, e serão:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0 \\ E_2 &= -\sqrt{\frac{k^2}{2} + \lambda^2} \\ E_3 &= \sqrt{\frac{k^2}{2} + \lambda^2} \end{aligned} \tag{13}$$