Lista V - Mecânica Estatística

Lyliana Myllena Santos de Sousa - 11223740
Lyliana.sousa@usp.br

1.a)

A função de partição grande canônica do sistema é dada por: $\Xi(T, V, \mu) = \sum_i \text{Exp}(-\beta E_i + \beta \mu N_i)$, para o nosso caso, temos a fatorização da função de partição de sistemas não interagentes. Assim, $\Xi(T, V, \mu) = \sum_i \text{Exp}(-\beta E_i + \beta \mu N_i) = Q^N = (\sum_i \text{Exp}(-\beta E_i + \beta \mu N_i))^N$, onde $N = \frac{V}{v_0}$ e para a fugacidade sendo $Z = \text{Exp}(\beta \mu)$. Com isso, tenho três condições possíveis cada célula, sendo elas:

- N = 0 E = 0
- N = 1 E = 0
- N = 2 E = ϵ

$Q = \sum_i \text{Exp}(-\beta E_i + \beta \mu N_i) =$

$\text{Exp}(-\beta 0_i + \beta \mu 0) + \text{Exp}(\beta \mu) + \text{Exp}(-\beta \epsilon + 2 \beta \mu) = 1 + Z + Z^2 \text{Exp}(-\beta \epsilon)$

Portanto, a nossa função partição grande canônica é dada por:

$\Xi(T, V, \mu) = (1 + Z + Z^2 \text{Exp}(-\beta \epsilon))^{\frac{V}{v_0}}$

1.b)

Sendo N o o número médio de partículas no sistema, podemos obter esse valor pela expressão:

$$N = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \text{Ln}\,\Xi}{\partial \mu}\right) = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \text{Ln}\left(1 + Z + Z^2 \text{Exp}(-\beta \epsilon)\right)^{\frac{V}{v_0}}}{\partial \mu}\right) = \frac{1}{\beta}\frac{V}{v_0}\left(\frac{\partial \text{Ln}\left(1 + \text{Exp}(\beta \mu) + \text{Exp}(2 \beta \mu)\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)\right)}{\partial \mu}\right) =$$

$$\frac{1}{\beta}\frac{V}{v_0}\frac{\beta\,\text{Exp}(\beta \mu) + 2 \beta\,\text{Exp}(2 \beta \mu)\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}{1 + \text{Exp}(\beta \mu) + \text{Exp}(2 \beta \mu)\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)} = \frac{1}{\beta}\frac{V}{v_0}\frac{\beta Z + 2 \beta Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}{1 + Z + Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)} = \frac{V}{v_0}\frac{Z + 2 Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}{1 + Z + Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}$$

Como foi dito no enunciado do exercício, podemos utilizar o parâmetro $c = \frac{N}{(V/v_0)}$. Com isso, tenho a seguinte expressão:

$$c = \frac{N}{(V/v_0)} = \frac{Z + 2 Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}{1 + Z + Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)} \Longrightarrow c(1 + Z + Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)) =$$

$$Z + 2 Z^2\,\text{Exp}(-\beta \epsilon) \Longrightarrow (2 - c)\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)\,Z^2 + (1 - c)\,Z - c = 0$$

Observe que a fugacidade é descrita por uma equação de segundo grau, com isso, tenho que:

$$Z = \frac{-(1-c) \pm \sqrt{(1-c)^2 + 4c(2-c)\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}}{2(2-c)\,\text{Exp}(-\beta \epsilon)}$$

3.a)

Como para cada conexão pode estar encaixada, com energia nula, ou desencaixada, com uma energia $\epsilon > 0$. Assim, para as n primeiros conexões desencaixadas, a energia total do sistema será igual a: $E_n = \epsilon\, n$

3.b)

Para n primeiras conexões estando desencaixadas, temos M =N-1, sendo M as configurações compatíveis com o sistema, pois estamos assumindo que as duas metades do ziper nunca se desconectaram e se separam.

3.c)

Usualmente, uma função partição é definida como sendo: $Z = \sum_{n=0}^{M} \text{Exp}(-E_n\,\beta)$. No entanto, possuímos uma degeneração G^n, pois existem G^n maneira das conexões se organizarem. Assim, nossa função partição é dada por uma série geométrica:

$$Z = \sum_{s=0}^{N-1} G^n\, \text{Exp}(-E_n\,\beta) = \sum_{s=0}^{N-1} G^n\, \text{Exp}(-\epsilon\, n\,\beta) = \sum_{s=0}^{N-1} [G\, \text{Exp}(-\epsilon\ \beta)]^n = \frac{1-(G\,\text{Exp}(-\epsilon\ \beta))^N}{1-G\,\text{Exp}(-\epsilon\ \beta)} .$$

3.d)

Para $N \to \infty$, temos que a energia livre é dada por: $F = -K_B\, T\, \text{Ln}\, N = K_B\, T\, \text{Ln}\ N^{-1}$, disso temos uma note que a energia livre para N⟩⟩1, temos uma descontinuidade na energia, pois aparece Ln0. Observando a função partição, temos que: $G\,\text{Exp}(-\epsilon\ \beta) \neq 1$. Se G Exp(- ϵ β) = 1 , temos uma singularidade onde a sua temperatura é considerada um temperatura crítica:

$$G\,\text{Exp}(-\epsilon\ \beta) = 1 \Longleftrightarrow \text{G} = \text{Exp}(\epsilon\ \beta) = \text{Exp}(\epsilon/\text{K}_\text{B}\ \text{T}_\text{c}) \Longleftrightarrow \text{Ln G} = \epsilon/\text{K}_\text{B}\ \text{T}_\text{c} \Longleftrightarrow T_c = \epsilon/\text{K}_\text{B}\ \text{Ln}\ \ \text{G}$$