



Departamento de Física UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação em Física Estatística

2018.07.09

Exame de Recurso

1. Um gás formado por partículas de massa m que se movem a uma dimensão, sem interação entre si, dentro de um recipiente de comprimento L , tem uma energia $E = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$.

a) Considerando uma aproximação semiclássica a função de partição de uma partícula pode escrever-se:

$$Z_1 = \int_0^L dx \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}}{h} . \text{ Calcula a função de partição do sistema e mostra que a energia média tem a forma}$$

$$\langle E \rangle = N \frac{k_B T}{2} .$$

b) Mostra que o potencial químico do sistema vem dado por: $\mu = -k_B T \ln \left(\frac{L}{N} \frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{h} \right)$.

c) Usando unidades de distância, $u_L = a$, uma unidade de momento $u_p = \frac{h}{a}$, uma unidade de massa

$$u_M = 2m \text{ e uma unidade de energia } u_E = \frac{u_p^2}{u_M}, \text{ mostra que se pode escrever } E' = \sum_{i=1}^N p_i'^2 . \text{ Mostra}$$

também que nestas unidades, $\mu' = -T' \ln \left(\frac{L'}{N} \sqrt{\pi T'} \right)$ onde a unidade de temperatura é, $u_T = \frac{u_E}{k_B}$.

d) Considera o caso em que as partículas são partículas rígidas de diâmetro a de tal forma que a distância mínima entre duas partículas não pode ser inferior a esta distância. Nesse caso somos levados a considerar que o sistema é um gás de rede em que cada partícula pode ter posições apenas sobre uma rede para além de possuir um momento linear p' que se pode considerar um grau de liberdade interno de cada partícula. Este tipo de sistema foi

analisado na secção VI.3 dos apontamentos onde foi calculada a função grande-canónica. Usando as unidades definidas na alínea anterior mostra que se obtém $\mu' = -T' \ln \left(\frac{L' - \langle N \rangle}{\langle N \rangle} \sqrt{\pi T'} \right)$. No ensemble grande-

canónico mostra ainda que se tem $\frac{\langle E' \rangle}{\langle N \rangle} = \frac{T'}{2}$.

2.

a) Na secção 7.2.2 do livro de Gould e Tobochnik é introduzido um *demon químico* como forma de simular um sistema de partículas. Este *demon* troca energia e partículas com o sistema. O sistema total formado pelo sistema em estudo e pelo *demon* é um sistema isolado de tal forma que a probabilidade do *demon* ter energia E_d e

número de partículas N_d , $P(E_d, N_d)$, é proporcional ao número de estados do sistema com energia

$E - E_d$ e número de partículas $N - N_d$, onde E e N representam, respetivamente, a energia total e o número

total de partículas. Demonstra, justificando, que, $P(E_d, N_d) \sim \exp(-\beta(E_d - \mu N_d))$.

b) Considera um gás ideal clássico a uma dimensão formado por partículas de massa m que se encontram num recipiente de comprimento L . Numa aproximação semiclássica, o espaço de fases (x, p) pode ser discretizado

com $\Delta x \Delta p = h$. Usando as unidades definidas em 1. c) o espaço de fases (x', p') é uma rede quadrada

bidimensional na qual as variáveis tomam valores inteiros, $x' = i, i = 1, \dots, L'$ e

$p' = j - p'_m - 1, j = 1, \dots, 2p'_m + 1$ onde p'_m é o máximo valor do momento que é necessário considerar

(o inteiro mais próximo não inferior a \sqrt{E}). No algoritmo sugerido por Gould e Tobochnik não é permitido que

mais que uma partícula ocupe um ponto do espaço de fases (x', p') o que é uma boa aproximação para gases a

baixas densidades. Explica o algoritmo e comenta as linhas da função **SimChemDemon(teq,tmax,L,N,E)** fornecida em anexo indicando como o algoritmo está implementado nessa função e qual o significado das variáveis definidas.

c) Elabora um programa que utiliza a função considerada em 2. b) e simula um gás com $N=400$ partículas, para uma energia total $E=200$, com um tempo de equilíbrio $teq=1000$ mcs (passos de Monte Carlo por partícula), e um tempo de simulação $tmax=10000$ mcs. Esse programa deve representar graficamente na figura 1 os valores observados da Energia do *demon*, E_d e do número de partículas do *demon*, N_d em função do tempo (faça dois subplots). Deves também calcular o valor médio da energia do *demon*, $Edmedio$, e o número médio de partículas no *demon*, $Ndmedio$. Adicionalmente deves definir a variável $hNE=zeros(N+1,E+1)$ e calcular os seus valores, isto é, o número de vezes em que o *demon* teve número de partículas, N_d e energia E_d ao longo da simulação. Calcula também a temperatura do *demon* fazendo um ajuste a uma reta de $\log(hNE(Ndmedio+1, :))$ e o seu potencial químico através de um ajuste de $\log(hNE(:, Edmedio+1))$. Para fazer estes fits pode usar as instruções:

```
i=find(hNE(ceil(Ndmedio)+1,:)>0); ifit=i(1:max([3,floor(length(i)/5)]));aT=polyfit(Ev(ifit),log(hNE(ceil(Ndmedio)+1,ifit)),1);
i=find(hNE(:,ceil(Edmedio)+1)>0); ifit=i(1:max([3,floor(length(i)/5)]));amu=polyfit(Nv(ifit)',log(hNE(ifit,ceil(Edmedio)+1)),1);
```

Apresenta resultados para $L=1000$. Mostra na figura 2 os pontos e as retas de ajuste.

d) Elabora um programa que considera densidades de partículas, $\rho=0.1:0.1:0.9$; e faz simulações para os diferentes valores de L (sempre com $N=400$, $E=200$). Na figura 4 mostra em dois subplots a temperatura e o potencial químico medidos em cada simulação. Compara esses valores representando na mesma figura, como uma linha, a expressão deduzida em 1. c). Os valores do potencial químico para densidades maiores são em geral ligeiramente maiores que o previsto pela expressão. Explica este resultado.

e) Modifica a função **SimChemDemon(teq,tmax,L,N,E)**, criando uma outra,

SimChemDemonHC(teq,tmax,L,N,E) que simula um sistema em que não pode existir mais que uma partícula com uma mesma coordenada x . Na criação do estado inicial não podemos permitir que exista mais que uma partícula com a mesma coordenada espacial e o *demon* não pode criar partículas com valores de x onde já existe uma partícula. Elabora um programa que repete as mesmas simulações efetuadas em 2.d) e compara agora com a expressão obtida para o potencial químico em 1. d). Qual a principal diferença relativamente ao observado em 2. d)?

```

function [Edt,Ndt]=SimChemDemon(teq,tmax,L,N,E)
pm=ceil(sqrt(E));
jmax=2*pm+1;
ps=zeros(L,jmax);
x=zeros(L,1);
p0=ceil(sqrt(E/N));
Es=0;
N0=floor(E/(p0*p0));
for k=1:N0
    ix=randi(L);
    jp0=(2*(randi(2)-1)-1)*p0+pm+1;
    cond=ps(ix,jp0)>0;
    while(cond)
        ix=randi(L);
        jp0=(2*(randi(2)-1)-1)*p0+pm+1;
        cond=ps(ix,jp0)>0;
    end
    ps(ix,jp0)=1;
    x(ix)=x(ix)+1;
    Es=Es+p0*p0;
end

Nd=N-N0;
Ed=E-Es;
figure(3)
    [i1,i2]=find(ps>0);
    plot(i1,i2-pm-1, '.'); axis([1, L, -pm,pm])
    xlabel('x'); ylabel('p'); set(gcf,'Position',[1,10, 300, 200]); drawnow;
for t=1:teq+tmax
    for ip=1:N
        ix=randi(L);
        jp=randi(2*pm+1);
        Ep=(jp-pm-1)^2;

        if ps(ix,jp)==0
            if (Nd>0 && Ep<=Ed )
                Ed=Ed-Ep;
                x(ix)=x(ix)+1;
                Nd=Nd-1;
                ps(ix,jp)=1;
            end
        else
            Nd=Nd+1;
            Ed=Ed+Ep;
            ps(ix,jp)=0;
            x(ix)=x(ix)-1;
        end
    end
end
if t>teq
    Ndt(t-teq)=Nd; Edt(t-teq)=Ed;
    if(mod(t,tmax/100)==0)
        fprintf(' t=%f\n',t)
        figure(3)
        [i1,i2]=find(ps>0);
        plot(i1,i2-pm-1, '.'); axis([1, L, -pm,pm])
        xlabel('x'); ylabel('p'); set(gcf,'Position',[1,10, 300, 200]);drawnow;
    end
end
end
end
end

```