Departamento de Física
UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação em Física Estatística

2018.04.12

1º teste

1. A entropia de um Gás ideal Clássico formado por N partículas que se encontram num recipiente de volume V a uma temperatura T é dada por $S=Nk_B(\ln\frac{V}{N}-\ln\lambda_T^3+\frac{5}{2})$ onde $\lambda_T=\frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ representa o comprimento de onda de De Broglie térmico. Considere que um recipiente de volume V está dividido em duas partes de volume V/2 através de uma divisória que pode ser retirada sem provocar variação de energia no sistema, que todo o recipiente se encontra a uma temperatura T e, ainda, que a pressão dos dois lados da divisória é igual. Calcule:

a) A variação de entropia causada pela remoção da divisória quando os gases são constituídos por partículas iguais.

b) A variação da entropia causada pela remoção da divisória quando cada um dos dois gases (de um lado e de outro da divisória) são constituídos por partículas diferentes, com massas diferentes.

Resolução:

1.
a) Como as pressões são iguais o número de partículas de cada lado do recipiente é igual. Na situação inicial temos dois gases idênticos com N/2 partículas que ocupam um volume V/2 e portanto:

$$S_i=2\frac{N}{2}k_B(\ln\frac{V}{2N/2}-\ln\lambda_T^3+5/2)$$

Na situação final temos só um gás formado por N partículas que ocupa um volume V:

$$S_f=Nk_B(\ln\frac{V}{N}-\ln\lambda_T^3+5/2)$$

A variação de entropia é $\Delta S=S_f-S_i=0$ como seria de esperar para um processo reversível. A colocação e a remoção da divisória não altera o estado termodinâmico do sistema.

b) Neste caso também o número de partículas de cada lado da divisória é igual devido à igualdade das pressões. Considerando que esse número de partículas é N/2, quando os gases são diferentes a entropia inicial vem dada por:

$$S_i=\frac{N}{2}k_B(\ln\frac{V}{2N/2}-\ln\lambda_{T,1}^3+5/2)+\frac{N}{2}k_B(\ln\frac{V}{2N/2}-\ln\lambda_{T,2}^3+5/2)$$

com comprimentos de onda de De Broglie diferentes devido à diferença das massas. Depois da remoção da divisória continuamos a ter dois gases formados por N/2 partículas que ocupam um volume V e portanto entropia total:

$$S_f = \frac{N}{2} k_B (\ln \frac{V}{N/2} - \ln \lambda_{T,1}^3 + 5/2) + \frac{N}{2} k_B (\ln \frac{V}{N/2} - \ln \lambda_{T,2}^3 + 5/2)$$

A variação de entropia é $\Delta S = S_f - S_i = N k_B \ln 2$. Neste caso a variação de entropia é diferente de zero porque depois da remoção da divisória há uma mistura dos dois gases que é um proceesso irreversível. Colocando a divisória novamente a situação inicial não é restabelecida.

2.

a) Faça um programa que simula um Gás ideal de N partículas de massa m, que se movem a 3 dimensões em contacto térmico, através de um *demon*, com um Sólido de Einstein Clássico (de partículas iguais) cujas partículas também se movem a 3 dimensões. Considere uma unidade de massa u_M=m, uma unidade de energia, u_E e uma unidade de distância, u_L em termos das quais se obtêm as unidades de velocidade $u_v = \sqrt{(u_E / u_m)}$ e de constante elástica $u_K = u_E / u_L^2$. Nestas unidades é possível escrever as energias dos sistemas na forma: $E_{GI} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} v_i^2$ e $E_{SE} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} v_i^2 + \frac{1}{2} K \sum_{i=1}^{N} r_i^2$ onde todas as quantidades estão expressas nas unidades anteriormente definidas . Considere K=1 em unidades u_K.

Inicialmente, considere que uma energia E_0 é toda atribuída ao Gás ideal de modo que uma das componentes da velocidade das suas partículas é inicialmente igual a $v_0 = \sqrt{(2 E_0 / N)}$ (sendo as restantes componentes nulas).

Inicialmente a energia do *demon, E_d* , e do sólido de Einstein são nulas. Em cada passo uma das partículas do gás ideal, escolhida ao acaso, tem a sua velocidade perturbada aleatóriamente de uma quantidade $d\vec{v}$ provocando uma variação de energia do gás ideal, $dE_{GI} = \vec{v}_i . d\vec{v} + \frac{1}{2} dv_i^2$ e uma das partículas do sólido de Einstein, escolhida ao acaso, tem a sua velocidade e posição perturbadas de uma quantidade $d\vec{v}$ e $d\vec{r}$, respetivamente, provocando uma variação de energia $dE_{SE} = \vec{v}_i . d\vec{v} + \frac{1}{2} dv_i^2 + \vec{r}_i . d\vec{r} + \frac{1}{2} dr_i^2$. As perturbações no estado do Gás ideal e no estado do Sólido de Einstein só são aceites, quando a energia aumenta, se o *demon* tiver energia suficiente para fornecer o aumento de energia de cada sistema. Quando a energia de um dos sistemas diminui o *demon* adquire a energia perdida por esse sistema. Assuma que cada coordenada de velocidade é perturbada aleatóriamente com $d\vec{v}$ pertencente ao intervalo

$$(-v_0/20, -v_0/20, -v_0/20) \le d\vec{v} \le (v_0/20, v_0/20, v_0/20)$$

e que as coordenadas espaciais do sólido de Einstein são também perturbadas com $d\vec{r}$ no mesmo intervalo de variação. Cada passo é constituido por N perturbações do estado de uma partícula. Considere um total de $5 x 10^3$ passos nas simulações e N=20 partículas. Para o cálculo de médias temporais despreze os 500 passos iniciais.

b) Sabendo que o número de estados acessíveis a um Gás ideal clássico é $\Omega(E)=V^N\frac{\left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right)^{3N/2}}{(3N/2)!N!}$ e a um sólido de Einstein Clássico é $\Omega(E)=\frac{\left(\frac{2\pi E}{hw}\right)^{3N}}{(3N)!}$ determine, justificando, qual a relação entre temperatura e energia para cada um dos sistemas.

c) Mostre gráficamente que a temperatura de equilibrio, medida pelo *demon,* é dada por $T=2E_0/(9N)$. Justifique analiticamente este resultado.

d) Apresente um gráfico da energia interna média de cada um dos sistemas em função da temperatura. Considere valores da energia total, E_0 tais que $0.1\leq T\leq 1$ com a temperatura medida em unidades $u_T=u_E/k_B$. Compare os resultados numéricos com o esperado teóricamente.

Resolução:

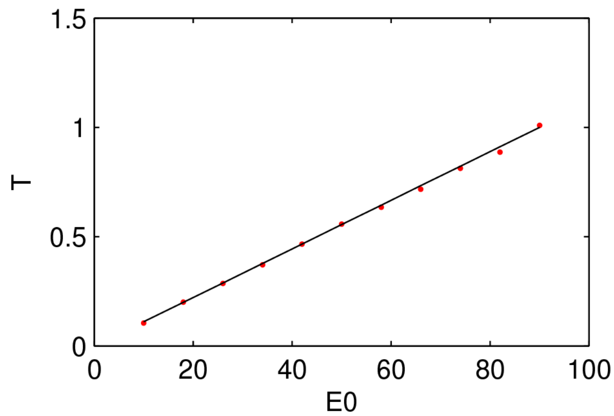
a) Ver ficheiros Matlab exercicio2.m e Exercicio2Funcao.m. O ficheiro Exercicio2Funcao.m simula os dois sistemas que trocam energia com um *demon* para um dado valor de número de partículas N, energia inicial E_0 e número de passos de simulação tmax e devolve na saída a energia do *demon,* Edt*,* a energia o gás ideal, EGIt, e a energia do sólido de Einstein, ESEt, em cada passo (de t=1 a t=tmax).

O ficheiro Exercicio2.m chama a função Exercicio2Funcao para valores de E_0 entre N/2 e 9N/2 , calcula valores médios desprezando os primeiros 10% dos passos de simulação e faz 5 gráficos: 1) Energia do demon em função do tempo, 2) Energia do gás ideal em função do tempo, 3) energia do gás ideal em função do tempo, 4) valor médio da energia do gás ideal e do sólido de Einsten em função da energia média do demon que é uma medida direta da temperatura. As curvas esperadas da relação entre energia e temperatura para cada sistema são representadas (estas curvas são calculadas na alínea b) 5) comparação entre a energia média do demon e a energia total inicial com o valor esperado da temperatura de equilíbrio, $T=2E_0/(9N)$ (ver alínea c)) .

b) A relação entre temperatura e energia obtém-se da relação $\frac{1}{T}=\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V}$ com $S=k_B\ln\Omega(E,V,N)$.

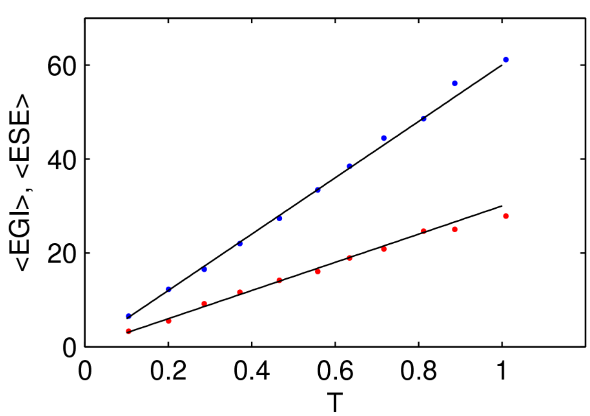
Para um gás ideal, $S=k_B(\frac{3N}{2}\ln E+...)$ e portanto $\frac{1}{T}=\frac{3N}{2E}$. Para um sólido de Einstein clássico, $S=k_B(3N\ln E+...)$ e portanto $\frac{1}{T}=\frac{3N}{E}$.

c) No equilibrio termodinâmico as temperaturas dos dois sistemas devem ser iguais e a soma das suas energias deve ser igual à energia total, E_0. Então devemos ter: $E_0=\frac{3}{2}N\,k_B T+3\,N\,k_B T=\frac{9}{2}N\,k_B T$. Com a energia em unidades u_E e a temperatura em unidades u_E/k_B temos $T=2E_0/(9N)$.



O gráfico compara o valor da temperatura de equilibrio esperada dos dois sistemas, para cada valor da energia total E_0 (reta) com a energia média do *demon* para cada valor da energia total (pontos a vermelho).

d)



Os pontos vermelhos representam a energia média do gás ideal e os pontos azuis a energia média do sólido de Einstein clássico em função da temperatura dada pela energia média do *demon*. As retas são os valores esperados calculados na alínea b).