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.

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 $v_0=\sqrt{(2E_0/N)}$ (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

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

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 $5x10^3$ 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 $\Omega(E)=V^N\frac{\left(\frac{2\pi mE}{h^2}\right)^{3N/2}}{(3N/2)!N!}$ 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.