



Departamento de Física UNIVERSIDADE DE AVEIRO

Modelação em Física Estatística

2018.06.07

2º teste

1. Considere um gás ideal de Fermi-Dirac, formado por N partículas, sem spin, de massa m , que se encontram numa caixa cúbica de lado L . Cada partícula ocupa estados de energia $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ com

$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. O número de estados com energia entre ϵ e $\epsilon + d\epsilon$, é

dado por, $g(\epsilon)d\epsilon = \frac{4\pi V m}{h^3} \sqrt{2m\epsilon} d\epsilon$, onde V representa o volume da caixa.

a) Definindo a unidade de energia, $u_E = \frac{h^2}{2mL^2}$ e a unidade de temperatura $u_T = u_E/k_B$ mostra que se pode

escrever, nestas unidades, a energia de cada estado como $\epsilon_{\vec{k}} = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, a energia de Fermi como

$\epsilon_F = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$ e a temperatura de Fermi como, $T_F = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$.

b) Dá um argumento que mostre que a quantidade $\int_0^\infty \frac{\epsilon_F g(\epsilon) d\epsilon}{\exp(\beta(\epsilon - \mu)) + 1}$ deve ser independente da temperatura

quando o número de partículas e o volume está fixo apesar da temperatura aparecer explicitamente no parâmetro β e implicitamente no potencial químico μ , que é função de N , V e T .

c) Usando o resultado da alínea b) mostra que $C_V = \left(\frac{dE}{dT}\right)_{N,V} = \frac{d}{dT} \int_0^\infty \frac{(\epsilon - \epsilon_F) g(\epsilon) d\epsilon}{\exp(\beta(\epsilon - \mu)) + 1}$. Admitindo agora

que o potencial químico é independente da temperatura para $T \ll T_F = \epsilon_F/k_B$ e igual a $\mu = \epsilon_F$ mostra que

será uma boa aproximação escrever, $C_V \sim \frac{g(\epsilon_F)}{k_B T^2} \int_0^\infty \frac{(\epsilon - \epsilon_F)^2 \exp(\beta(\epsilon - \epsilon_F)) d\epsilon}{(\exp(\beta(\epsilon - \epsilon_F)) + 1)^2}$. Tendo em conta que

$\int_0^\infty \frac{x^2 e^x dx}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3}$ mostra ainda que $\frac{C_V}{N k_B} \sim \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F}$.

d) Usando as seguintes expressões válidas para $T \ll T_F$ (1) energia total por partícula,

$$e(T) = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right) ; (2) \text{ capacidade térmica por partícula } c_V(T) = k_B \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} ; (3) \text{ potencial}$$

químico $\mu(T) = \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right)$, obtém as correspondentes quantidades nas unidades de energia e temperatura definidas na alínea a).

e) Exprime as seguintes quantidades de um gás ideal clássico em termos das unidades de energia e temperatura definidas em a): (1) energia total por partícula de um gás ideal clássico, $e_{GI}(T) = \frac{3}{2} k_B T$; (2) a capacidade

$$\text{térmica por partícula } c_{V,GI}(T) = k_B \frac{3}{2} ; (3) \text{ o potencial químico } \mu_{GI}(T) = k_B T \ln \left(\frac{N}{V} \left(\frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \right)^3 \right)$$

f) Obtém uma expressão que permita calcular o potencial químico $\mu(T)$ a partir do conhecimento do número médio de partículas no estado de energia nula, n_0 .

2.

(a) Modifica a função GasBoseEinsteinv1.m criando a função GasFermiDiracv1.m para simular um gás ideal de Fermi-Dirac formado por N partículas, sem spin, de massa m, que se encontram numa caixa cúbica de lado L, a uma temperatura T. Note que precisa alterar a função em dois sítios apenas: (1) na construção do estado inicial do sistema (estado fundamenta) deve-se colocar uma partícula em cada estado, ocupando todos os estados de menor energia até colocar as N partículas. Repara que os estados não estão numerados em ordem crescente de energias (2) como cada estado só pode estar vazio ou ocupado por uma partícula haverá sempre N estados ocupados. Adicionalmente, a probabilidade de mudar uma partícula de estado será nula se o estado vizinho selecionado estiver ocupado e será exatamente igual à do caso Bose-Einstein se o estado vizinho estiver vazio.

b) Modifica o programa GasBoseEinstein.m para calcular T_F e para simular o sistema para as temperaturas

$T = T_F/20 : T_{max}/40 : T_{max}$, com $T_{max} = 2 T_F$. Representa graficamente os valores das quantidades físicas obtidos

por simulação e os valores teóricos esperados para $T \ll T_F$ e para $T \gg T_F$: Na figura 2 representa o

número médio de partículas em cada estado em função da energia do estado; na figura 4 a energia média por partícula em função da temperatura; na figura 5 a capacidade térmica por partícula em função da temperatura e na figura 6 o potencial químico, em função da temperatura. Nota que o potencial químico da simulação deve ser obtido a partir de n_0 de acordo com a expressão obtida em 1. f). Representa as expressões analíticas para $T \ll T_F$

nas temperaturas $T_1 = [0.05 : 0.05 : T_F]$ e para $T \gg T_F$ nas temperaturas $T_2 = [1.5 * T_F : 0.1 : 1.1 * T_{max}]$.

c) Apresenta os gráficos obtidos das simulações para N=200 e tmax=10000;