



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) **(1,5 valores)** 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, $T_F = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$.

Resolução:

a) Cada eletrão tem acessível estados caracterizados por $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$ com $n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

que têm energias $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 4\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$. Então $\epsilon'_{\vec{k}} = \frac{\epsilon_{\vec{k}}}{u_E} = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. A energia de Fermi é calculada

da equação: $N = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon$. Substituindo a expressão de $g(\epsilon)d\epsilon$ e resolvendo para ϵ_F obtém-se

$\epsilon_F = \left(\frac{3N}{4\pi V}\right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}$ e portanto $\epsilon'_F = \frac{\epsilon_F}{u_E} = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$. A temperatura de Fermi define-se a partir de

$k_B T_F = \epsilon_F$. Como $u_T = u_E/k_B$ temos $T'_F = \epsilon'_F$.

b) **(1,5 valores)** 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.

Resolução: A energia de Fermi é uma quantidade independente da temperatura e $N = \int_0^{\infty} \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{\exp(\beta(\epsilon - \mu)) + 1}$

pelo que quaisquer derivadas a N constante, nomeadamente a derivada em ordem à temperatura, devem ser nulas. A variação na temperatura do potencial químico deve compensar quaisquer outras variações na temperatura para que o integral permaneça independente da temperatura.

c) **(3 valores)** 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 $\frac{C_V}{N k_B} \sim \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F}$.

Resolução: A temperatura $T \ll T_F = \epsilon_F / k_B$ o potencial químico torna-se independente da temperatura e

podemos fazer a derivação em ordem à temperatura do integral usando $\frac{d}{dT} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} + 1} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{(\epsilon - \epsilon_F) e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)}}{(e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} + 1)^2}$. Como a quantidade $\frac{e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)}}{(e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} + 1)^2} \rightarrow 0$ para $\epsilon \gg \epsilon_F$ e para

$\epsilon \ll \epsilon_F$ a função a integrar contribui para o integral para valores de energia próximos de ϵ_F . Então podemos substituir no integral $g(\epsilon)$ por $g(\epsilon_F)$ e obter:

$$C_V \sim \frac{g(\epsilon_F)}{k_B T^2} \int_0^{\infty} \frac{(\epsilon - \epsilon_F)^2 \exp(\beta(\epsilon - \epsilon_F)) d\epsilon}{(\exp(\beta(\epsilon - \epsilon_F)) + 1)^2}.$$

Fazendo agora a substituição $x = \beta(\epsilon - \epsilon_F)$ temos $dx = \beta d\epsilon$ e os limites de integração podem considerar-se

entre 0 e ∞ , na nova variável. Então
$$\int_0^{\infty} \frac{(\epsilon - \epsilon_F)^2 e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} d\epsilon}{(e^{\beta(\epsilon - \epsilon_F)} + 1)^2} = \frac{1}{\beta^3} \int_0^{\infty} \frac{x^2 e^x dx}{(e^x + 1)^2} = (k_B T)^3 \frac{\pi^2}{3} .$$
 Como

$$g(\epsilon_F) \epsilon_F = \frac{4\pi V m}{h^3} \sqrt{2m} \epsilon_F^{3/2} \quad \text{e} \quad \epsilon_F = \left(\frac{3N}{4\pi V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} \quad \text{temos} \quad g(\epsilon_F) \epsilon_F = \frac{3N}{2} .$$

Substituindo na expressão para C_V temos,
$$C_V \sim \frac{k_B^2 T g(\epsilon_F) \epsilon_F}{\epsilon_F} \frac{\pi^2}{3} = N k_B \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} .$$

d) **(1,5 valores)** Usando as seguintes expressões válidas para $T \ll T_F$ (1) energia total por partícula,

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

$$\text{químico } \mu(T) = \epsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right) , \text{ obtém as correspondentes quantidades nas unidades de energia e}$$

temperatura definidas na alínea a).

Resolução: (1) Na unidade $u_E = \frac{h^2}{2mL^2}$ temos $e'(T) = e(T)/u_E = \frac{3}{5} \epsilon'_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right)$ e portanto

$$e'(T) = \frac{3}{5} \left(\frac{3N}{4\pi} \right)^{2/3} \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right) . (2) \text{ A unidade de calor específico é a unidade de energia sobre a}$$

unidade de temperatura, isto é, $u_{c_V} = u_E/u_T = k_B$ e portanto, $c'_V(T) = c_V(T)/u_{c_V} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} . (3) \text{ O}$

potencial químico tem dimensões de energia $\mu'(T) = \mu(T)/u_E = \epsilon'_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right)$ ou seja

$$\mu'(T) = \left(\frac{3N}{4\pi} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right) .$$

e) **(1,5 valores)** 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 térmica por partícula $c_{V,GI}(T) = k_B \frac{3}{2}$; (3) o potencial químico

$$\mu_{GI}(T) = k_B T \ln \left(\frac{N}{V} \left(\frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \right)^3 \right)$$

Resolução:

(1) energia por partícula, $e'_{GI} = e_{GI}/u_E = \frac{e_{GI}}{k_B u_T} = \frac{3}{2} T'$ (2) calor específico, $c'_{V,GI}(T) = c_V(T)/u_{cv} = \frac{3}{2}$

(3) $\mu'_{GI}(T) = \mu_{GI}(T)/u_E = T' \ln \left(N \sqrt{\left(\frac{u_E}{\pi k_B T} \right)^3} \right)$ ou seja $\mu'_{GI}(T) = T' \ln (N (\pi T')^{-3/2})$. Como

$$T'_F = \left(\frac{3N}{4\pi} \right)^{2/3} \text{ podemos escrever } N = \frac{4\pi}{3} T'^{3/2}_F \text{ e obter } \mu'_{GI}(T) = T' \ln \left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{T'_F}{T'} \right)^{3/2} \right) .$$

f) **(1,0 valores)** 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 .

Resolução: Como esperamos que o número de partículas no estado de energia 0 se comporte como

$$n_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} + 1} \text{ podemos resolver para } \mu \text{ e obter } \mu' = T' \ln \frac{n_0}{1 - n_0} .$$

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

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

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 $Tt=[0.05:0.05:TF]$ e para $T \gg T_F$ nas temperaturas $Tt2=[1.5*TF:0.1:1.1*Tmax]$.

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

Resolução: Ver programas em matlab.

2. a) O estado fundamental pode ser construído com o código:

```
[aa,i]=sort(energias); % ordena o estado por energias
np(i(1:N))=1; % coloca uma partícula nos N estados de menor energia
noc=N;
lista(1:noc)=i(1:N); % armazena a lista dos estados que têm partículas
ll(i(1:N))=1:noc; % armazena a ordem do estado ocupado na lista dos estados que têm partículas
```

Nota: há outras formas equivalentes de construir o estado fundamental

O número de estados ocupados não varia sendo sempre igual a N. Então o número de estados ocupados nocf no estado final é sempre igual a noc.

Só pode ser aceite a proposta de mudança da partícula para o estado vizinho se este estiver vazio. Então deve considerar-se a seguinte condição de aceitação da mudança de partícula de estado:

```
if (rand(1) < pa && np(estadov)==0)
```

```
....
```

```
end
```

ou em alternativa considerar que $pa=0$ se $np(estadov) >=1$

2. b)

Era necessário calcular as quantidades $T_F = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{2/3}$ e definir $T=TF/20:Tmax/40:Tmax$, com $T_{max}=2 T_F$,

Calcula-se $\mu' = T' \ln \frac{n_0}{1-n_0}$. a partir de $i=find(energia==0)$; $n0=np_med(i)$;

Os valores numéricos obtidos da simulação devem ser comparados com:

$$e'(T) = \frac{3}{5} \left(\frac{3N}{4\pi} \right)^{2/3} \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right), \quad c'_v(T) = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} \quad \text{e} \quad \mu'(T) = \left(\frac{3N}{4\pi} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right) \quad \text{para}$$

$$T \ll T_F \quad \text{e} \quad e'_{Gl} = \frac{3}{2} T', \quad c'_v(T) = \frac{3}{2}, \quad \mu'_{Gl}(T) = T' \ln \left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{T'_F}{T'} \right)^{3/2} \right) \quad \text{para} \quad T \gg T_F.$$
