Solução ficha TP3

III

Contagem de microestados (distribuição microcanónica)

14. Considere N spins independentes [(distinguíveis): Localizados nos nodos de uma rede], momento magnético μ, num campo magnético exterior B. a) Enumere o nº de micro-estados compatíveis com os parâmetros macroscópicos N, B, E

$$E = -m\mu B + (N-m)\mu B \qquad m \text{ spins } // B$$

$$= -(2m - N)\mu B$$

Fixando N e B, então $E \equiv E(m)$

$$-\frac{E - N\mu B}{2\mu B} = m = \frac{N}{2} - \frac{E}{2\mu B}$$

De quantas maneiras podemos ter m spins para cima num conjunto de N? Temos

$$\Omega(m,N) = \frac{N!}{m!\,(N-m)!}$$

b) Admita que $S = k \ln \Omega$ (onde k é uma constante qualquer com as dimensões da entropia termodinâmica. Usando a definição de temperatura ($\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N}$) [Note: Stirling: $\ln N! \sim N \ln N - N$]
Obtenha $T(m,B)$

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} = \frac{\partial S(m)}{\partial m} \cdot \frac{\partial m}{\partial E} = -\frac{\partial S}{\partial m} \frac{1}{2\mu B}$$

$$S = k \ln\left(\frac{N!}{m!\,(N-m)!}\right) \quad ; \quad \frac{\partial S}{\partial m} = k \frac{\partial}{\partial m}\left(\ln\left(\frac{N!}{m!\,(N-m)!}\right)\right)$$

$$\frac{\partial S}{\partial n} = k \frac{\partial}{\partial n}\left[\ln\left(\frac{N!}{n!\,(N-n)!}\right)\right] =$$

$$= k \frac{\partial}{\partial n}\left[\ln N! - \ln n! - \ln (N-n)! \right]$$

Considere a aproximação de Stirling:

$$\ln N! \sim N \ln N - N$$

$$= k \frac{\partial}{\partial n}\left[N \ln N - N - n \ln n + n - (N-n)\ln(N-n) + (N-n)\right]$$

$$= k \left[-\ln n - \cancel{1} + \cancel{1} + \ln(N-n) + \cancel{\frac{N-n}{N-n}} - \cancel{1} \right]$$

$$\frac{\partial S}{\partial n} = k\left[-\ln n + \ln(N-n) \right]$$

$$\frac{1}{T} = -\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)\frac{1}{2\mu B} = -\frac{k}{2\mu B}\ln\left[\frac{N-n}{n}\right]$$

Note que, para um sistema isolado T é uma quantidade derivada

c) Obtenha a energia média por spin

$$\frac{1}{T} = -\frac{k}{2\mu B}\ln\left[\frac{N-n}{n}\right]$$

$$-\frac{2\mu B}{kT} = \ln\left[\frac{N-n}{n}\right] \Leftrightarrow \frac{N-n}{n} = e^{-\frac{2\mu B}{kT}} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow N = n\left(1 + e^{-\frac{2\mu B}{kT}}\right) \Rightarrow \frac{n}{N} = \frac{1}{1+e^{-\frac{2\mu B}{kT}}}$$

$(\beta = 1/kT)$

$$\frac{m}{N} = \frac{e^{\beta\mu B}}{e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B}}$$

Mas, como vimos,

$$E = -(2m - N)\mu B = -N\mu B\left(2\frac{m}{N} - 1\right) =$$

$$= -N\mu B\left[2\frac{e^{\beta\mu B}}{e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B}} - 1\right]$$

$$\frac{E}{N} = -\mu B\left[\frac{e^{\beta\mu B} - e^{-\beta\mu B}}{e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B}}\right] = -\mu B \tanh[\beta\mu B]$$

d) Obtenha a probabilidade de um spin estar $\uparrow$ (alinhado com $\vec{B}$) ou $\downarrow$ (anti-paralelo ao campo):

$$p_\uparrow = \frac{m}{N} = \frac{e^{\beta\mu B}}{e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B}}$$

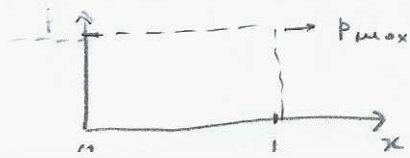
$$p_\downarrow = 1 - p_\uparrow = \frac{e^{-\beta\mu B}}{e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B}}$$

15.

a) Obtenha o número de estados com energia $E \in [0, E[$ para uma partícula clássica numa caixa 1d de comprimento L

(veja que esta contagem é "difícil" em Mecânica Clássica)

Um micro-estado é aqui especificado por uma posição e momento linear da partícula: (x, p)



$\rightarrow p_{max} = \pm\sqrt{2mE}$ $\Rightarrow$ Área: $2\, p_{max} L$

A contagem de estados só pode ser feita se arbitrarmos células no espaço de fase $\Delta x\,\Delta p$. (Note que $\Delta x\,\Delta p$ tem as dimensões de h). Então:

$$\Gamma(E) = 2\,\frac{L\,(2mE)^{1/2}}{\Delta x\,\Delta p}$$

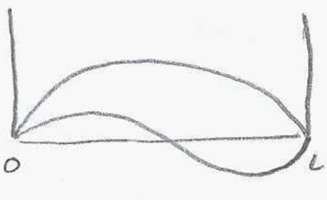
(Nº de estados com energia entre 0 e E)

b) Obtenha a densidade de estados correspondente (Nº de estados com energia entre E e $E+dE$):

$$g(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} = \frac{\cancel{2}L}{\Delta x\,\Delta p}\,\frac{1}{\cancel{2}}\sqrt{\frac{2m}{E}} = \frac{L\sqrt{2m}}{\Delta x\,\Delta p}\,\frac{1}{\sqrt{E}}$$

16. Obtenha o número de estados com energia entre 0 e E para uma partícula quântica numa caixa 1d de comprimento L:

Considere a onda de de Broglie associada à partícula



O modo fundamental: $\lambda = 2L$

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} \quad \text{(de Broglie)}$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{2m\,4L^2} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

A contagem é aqui trivial:

$$\Gamma(E) = n = \sqrt{\frac{8mL^2}{h^2}E_n} = \frac{2L}{h}\sqrt{2mE}$$

$$\left(g(E) = \frac{1}{2\sqrt{E}}\,\frac{2L}{h}\sqrt{2m} = \frac{L}{h}\sqrt{\frac{2m}{E}} \equiv \text{densidade de estados} \right)$$

17. Um electrão está confinado numa caixa 1D de comprimento L, e a sua energia é $144\ \frac{h^2}{8mL^2}$. Qual o valor de $\Gamma(E)$?

18. Obtenha $\Gamma(E)$ para um oscilador harmónico $d=1$

a) caso clássico

b) caso quântico

a) $$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$1 = \underbrace{\frac{p^2}{2mE}}_{b^2} + \frac{x^2}{\underbrace{2\ E/m\omega^2}_{a^2}}$$ (elipse

$$\Gamma(E) = \frac{\text{area da elipse}}{\Delta x\ \Delta p} = \frac{\pi\ ab}{\Delta x \Delta p} = \frac{2\pi\ E}{\omega\ \Delta x\ \Delta p}$$

b) $$E_m = \left(m + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\Gamma(E) = m = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = \underbrace{\frac{E}{\frac{h}{2\pi}\omega}}_{} - \frac{1}{2}$$

valor clássico

se $\Delta x\ \Delta p = h$

19 a) Obtenha $\Gamma(E)$ e $g(E)$ para uma partícula numa caixa 3d (quântico):

$$E = \frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right]$$

$$\frac{2\pi}{\lambda_x} = k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} \rightarrow E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

caixa cúbica $$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

Os inteiros n_x, n_y, n_z enumeram os microestados possíveis

cada trio de inteiros define um ponto no espaço dos $\vec{k}$'s

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

cada estado ocupa um volume $\frac{\pi^3}{L^3}$; Logo

$$\Gamma(E) = \frac{1}{8}\,\frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\pi^3/L^3} = \frac{V\,4}{3\pi^2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$g(E) = \frac{V}{6\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{3}{2}E^{1/2}$$

19b) Estime o nº de microestados acessíveis a uma molécula numa caixa de 1 litro. (Considere o caso do azoto) à temperatura ambiente

$$E = \frac{3}{2}kT \qquad V = 10^{-3}\,m^3 \qquad T = 300\,K$$

$m_N = 28 \cdot 1{,}67 \times 10^{-27}$ kg (estimar isto: 7 protões + 7 neutrões × 2)

$k = 1{,}38 \times 10^{-23}$ J/K $\qquad h = 6{,}6 \times 10^{-34}$ J.s

$$g(E)\,\Delta E = \frac{10^{-3}}{6\pi^2}\left(\frac{2m \cdot 4\pi^2}{h^2}\right)^{3/2}\frac{3}{2}E$$

tome $\boxed{\Delta E \sim 10^{-27}\,J}$

$$= \frac{10^{-3}}{6\pi^2}\,16\,(\ldots) = 10^{22} \;!!$$

c) Estime o nº de estados entre $[0, E[$ para N partículas independentes numa caixa de volume V

$$\Gamma_1(E) = \frac{N}{N}\frac{4\pi}{3}\frac{V}{h^3}(2mE)^{3/2}$$

$$\Gamma_N(E) = \frac{1}{N!}\left(N\frac{4\pi}{3h^3}\right)^N\left(\frac{V}{N}\right)^N\left(2m\frac{E}{N}\right)^{3N/2}\cdot N^{3N/2}$$

$$\Gamma_N(E) = \frac{1}{N!}\left(N^{5/2}\frac{4\pi}{3h^3}\right)^N\left(\frac{V}{N}\right)^N\left(2m\frac{E}{N}\right)^{3N/2}$$

d) Uma contagem mais precisa de $\Gamma_N(E)$ conduz a

$$\Gamma(E, V, N) = \frac{1}{N!}\left(\frac{V}{h^3}\right)^N\frac{(2\pi m E)^{\frac{3N}{2}}}{\frac{3N}{2}!}$$

e) Use esta expressão para obter a entropia de um gás (semi-clássico) isolado num volume V:

$$S = k\ln(\Gamma_N)$$

$$\ln\Gamma_N = -\ln(N!) + N\ln\left(\frac{V}{h^3}\right) + \frac{3N}{2}\ln(2\pi m E) - \ln\left(\frac{3N}{2}!\right)$$

Usando a fórmula de Stirling: $\ln N! \sim N\ln N - N$

$$\ln\Gamma_N \simeq -N\ln N + N + N\ln V - \frac{3N}{2}\ln(h^2) + \frac{3N}{2}\ln(2\pi m E) -$$

$$-\frac{3}{2}N\ln\left(\frac{3N}{2}\right) + \frac{3N}{2}$$

$$\ln\Gamma_N = N\ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3}{2}N\ln\left(\frac{2\pi m E}{\frac{3N}{2}h^2}\right) + \frac{5}{2}N$$

$$S = NK \left[\ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{4\pi m E}{3N h^2}\right) + \frac{5}{2} \right]$$

e) Use o resultado da alínea anterior para obter a equação de estado para a energia de um gás perfeito

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V} = NK \frac{3}{2} \frac{\frac{4\pi m}{3N h^2}}{4\pi m E / 3N h^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E = \frac{3}{2} NKT$$