Lista 2 - Física Estatística FCI0319

Para correção, entregue somente os exercícios marcados por ♣.
1. Reif: ♣6.2, 6.3, 6.4, 6.6, 6.8, ♣6.10(a), 6.11, 6.13, 6.14

♣2. Simulando gases ideais e demônios
Sugestão: Leia a seção 4.9 do H. Gould e J. Tobochnik.
Considere um gás ideal de $N \gg 1$ partículas pontuais não interagentes de massa m contido num recipiente d-dimensional onde há um demônio muito especial. Considere que as colisões com as paredes do recipiente são perfeitamente elásticas.
Inicialmente, todas as partículas têm a mesma velocidade $\mathbf{v}_0 = v_0\hat{x}$ e o demônio tem energia mínima $E_d = 0$.
Desejamos estudar o processo de termalização do gás que se dá através da interação com o demônio. Esta interação (a ser implementada pelo seu código de computador) pode ser simulada da seguinte maneira:

1. Em um dado instante de tempo, o demônio escolhe aleatoriamente uma das partículas para interagir.

2. Ele então tenta mudar velocidade da partícula de $\mathbf{v}$ para $\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \mathbf{u}$, onde $\mathbf{u}$ é um vetor de magnitude aleatória escolhida uniformemente entre 0 e u_0 e aponta aleatoriamente para qualquer direção. Se a trabalho sobre o sistema não for positivo, i.e., se $W = \frac{m}{2}\left(v'^2 - v^2\right) \leq 0$, então o demônio consegue realizar a mudança de velocidade absorvendo a energia perdida pelo sistema, ou seja, $E_d \to E_d - W$. Caso contrário, a mudança de velocidade só acontece se o demônio tiver energia suficiente para realizá-la, ou seja, desde que $E_d \geq W$.

3. O demônio itera os passos 1 e 2 $M \gg N$ vezes. Em cada iteração, o tempo é acrescentado de δt.

Responda as seguintes perguntas:
(a) Na simulação proposta, por que pode-se desconsiderar as colisões entre as partículas do gás e as paredes do recipiente?
(b) No regime estacionário (após M iterações), a energia do demônio se torna uma variável aleatória descrita pela distribuição

$$P(E_d) = \beta e^{-\beta E_d}, \tag{1}$$

onde $\beta^{-1} = k_B T$. Justifique a Eq. (1) e calcule o valor de β correspondente.
Implemente a simulação descrita acima em $d = 1$ dimensão com $v_0 = 1$ e $m = 2$ (em unidades convenientes).
(c) Usando $N = 10$ e $u_0 = 0.2$, grafique $\langle E_d \rangle$ como função do "tempo" (número de iterações). Use $M = 500$. Para obter a média, faça a mesma simulação 1000 vezes.
(d) Repita o item (c) para $N = 20$, 40 e 80.
(e) Repita os itens (c) e (d) para $u_0 = 0.4$ e coloque todas essas 8 curvas num único gráfico.
(f) Analise os seus gráficos discutindo como tempo de termalização depende de u_0 e N.
(g) Desejamos agora analizar a distribuição de equilíbrio de E_d. Para isso, realize apenas uma simulação para $N = 80$ e $N = 160$ com $u_0 = 0.2$ e 0.4 (4 simulações no total) usando $M = 10^5$. Discarte as primeiras 100 iterações quando o sistema ainda está equilibrando. Dos valores de E_d restantes, faça os histogramas normalizados correspondentes e compare-os com a Eq. (1).
(h) Ainda com relação à simulação do item (g), faça os histogramas normalizados de velocidades correspondentes e compare com a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann $P(v)$. Para melhorar sua estatística, use as velocidades das partículas em 1000 "instantes de tempo" distintos (iterações distintas) escolhidos aleatoriamente ao longo das $M = 10^5$ iterações de sua simulações (excluindo as iterações iniciais de equilibração).
(i) O que muda para dimensões superiores $d > 1$? Quanto vale o valor de β correspondente?

3. Ensemble das pressões
Este ensemble descreve a situação em que existe tanto interação térmica quanto interação mecânica entre um sistema A e outro sistema B muito maior do que A. O sistema total formado por A e B é um sistema isolado com energia total E e volume total V fixos. Considere que o sistema maior B é ao mesmo tempo um reservatório térmico (com $\beta^{-1} = k_\mathrm{B}T$ constante como no ensemble canônico) e um reservatório mecânico, o que quer dizer que exerce uma pressão constante p enquanto sofre pequenas variações relativas de volume.
(a) Mostre que a probabilidade de encontrar o sistema A em um microestado r com energia E_r e volume V_r é $\propto e^{-\beta(E_r + pV_r)}$.

(b) Além de $\left|\frac{\partial\beta}{\partial E}\Delta E\right| \ll \beta$, onde $\Delta E \ll E_{\mathrm{B}}$ é a quantidade de energia trocada entre os sistemas (como no ensemble canônico), quais são as condições (matemáticas) que o sistema B deve satisfazer para que a aproximação do ensemble seja boa?

(Obs.: O ensemble das pressões não é muito usado. A ideia deste problema é fazer você pensar sobre o significado geral de um reservatório e praticar a dedução que leva à distribuição de Boltzmann no ensemble canônico.)

♣4. Oscilador harmônico quântico em 2D

Considere um sistema de N partículas distinguíveis e não interagentes cujos estados de partícula única têm energia $E_{n_1,n_2} = (n_1 + n_2)\,\epsilon$, onde $\epsilon > 0$ é uma constante de energia, e n_1 e n_2 são inteiros que definem o estado ($n_i = 0, 1, 2, \ldots$).

(a) Qual a degenerescência do estado de partícula única que tem energia $E_n = n\epsilon$ (com $n = 0, 1, 2, \ldots$)?

(b) Calcule a função de partição deste sistema assumindo que ele está em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura T.

(c) Obtenha expressões para a energia interna e entropia em função da temperatura.

(d) Quais os valores da entropia e do calor específico nos limites de altas e baixas temperaturas?