Lista 1 - 7600041 - Mecânica Estatística

1. **Estados termodinâmicos**
   Na lista de estados termodinâmicos abaixo, diga se é um estado de equilíbrio, um estado estacionário fora do equilíbrio, ou um estado não estacionário. Explique o seu raciocínio. Em alguns casos, o estado não é verdadeiramente estacionário ou de equilíbrio, mas muito perto disso. Discuta em quais condições ele pode ser tratado como um estado de equilíbrio ou estacionário.

   (a) Uma xícara de café quente num dia agradável.
   (b) Uma garrafa de vinho guardada numa adega.
   (c) O Sol.
   (d) A atmosfera da Terra.
   (e) O elétrons no circuito de uma lanterna desligada.
   (f) O elétrons no circuito de uma lanterna ligada.
   (g) Um pedaço de minério de Ferro em contato térmico com você por um longo período de tempo.
   (h) Um pedaço de minério de Polônio em contato térmico com você por um longo período de tempo.
   (i) Você.

2. **Equilíbrio/"Termalização"**
   Considere dois cachorros A e B, um do lado do outro, onde pulgas podem pular aleatoriamente de um para o outro. Sabe-se que a probabilidade de uma pulga permanecer em um determinado cachorro por um intervalo de tempo entre t e $t + \mathrm{d}t$ é dada por $P(t)\mathrm{d}t = \tau^{-1}e^{-t/\tau}\mathrm{d}t$, onde τ é uma constante de tempo.
   Pede-se que a dinâmica desse sistema seja simulada no computador. Use o software que lhe for conveniente (Fortran, Python, Mathematica, etc.). Considere que o tempo de pulo é desprezível, e que existem N pulgas. Para a sua simulação, sorteie aleatoriamente uma das N pulgas. Então, com probabilidades iguais, faça com que ela pule para o outro cachorro ou fique naquele onde encontra. Repita esse processo várias vezes.

   (a) Após repetir o processo acima M vezes, quanto tempo (em média) se passou? (*Dica*: Reif 1.12.)
   (b) Faça um gráfico do número de pulgas no cachorro A, N_{A}, como função do tempo dado que a condição inicial é $N_{\mathrm{A}}(0) = N$. (Use $N = 2^k$, com $k = 4, 6, \ldots, 12$, e instantes de tempo convenientes para que os regimes de transiente e estacionário/equilibrado/"termalizado" sejam identificados. Note que a escala de tempo do problema é τ.)
   (c) O que você nota a medida que N cresce?
   (d) Refaça os gráficos do item (b) diversas vezes e grafique a média $\overline{N_{\mathrm{A}}}(t)$ como função do tempo. Coloque barras de erro e explique como elas são calculadas.
   (e) Com esses gráficos, como você identifica o tempo de termalização? Como ele depende de N?
   (f) Grafique a razão $\Delta N_{\mathrm{A}}/\overline{N_A}$ (medida em tempos muito longos, i.e., muito maiores que o tempo de termalização) como função do número de pulgas N. Qual o comportamento dessa razão como função de N? Esse resultado era esperado? (Aqui, ΔN_{A} é o desvio padrão da distribuição de N_{A}.)
   (g) Considere agora que há 3 cachorros dispostos em linha reta e que as pulgas pulem de A $\rightleftharpoons$ B, e de B $\rightleftharpoons$ C. Considerando que a condição inicial é a mesma ($N_{\mathrm{A}}(0) = N$), como muda o tempo de relaxação/"termalização"? E caso haja K cachorros dispostos em linha reta?
   (h) Como você resolverias as questões anteriores (ou parte delas) analiticamente?

3. **Passeio aleatório ou polímero?**
   Considere uma partícula que vive em 2D que, entre a i-ésima e a $(i+1)$-ésima colisão, se desloca de $\mathbf{d}_i$. Ou seja, após N passos, o deslocamento total é $\mathbf{D} = \mathbf{d}_1 + \ldots + \mathbf{d}_N$. Suponha que todos esses pequenos deslocamentos tenham a mesma magnitude $d_i = d$. Seja ϕ_i o ângulo entre dois desses vetores consecutivos, e considere-os como variáveis aleatórias independentes e igualmente distribuídas por $P(\phi) = Ae^{\lambda\cos\phi}$, onde $-\pi \leq \phi < \pi$, A é a constante de normalização, e $\lambda \geq 0$ é uma constante cujo significado deve se tornar mais claro a seguir.

   (a) Calcule a constante de normalização A.
   (b) Mostre que a função correlação $\overline{\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_{i+r}} = d^2e^{-r/r_0}$.

(c) Calcule r_0 como função de λ. Quanto vale r_0 nos limites $\lambda \to 0$ e $\lambda \to \infty$?

(d) Que interpretação se dá para r_0 e, consequentemente, para λ?

(e) Como o passeio aleatório acima pode ser usado para modelar um polímero? Qual interpretação se dá para um polímero que tem λ muito grande e λ muito pequeno?

4. **Microcanônico e Termodinâmica**
Considere um sistema isolado de $N \gg 1$ partículas de spin-1/2 fracamente interagentes imersas em um campo magnético externo de magnitude H. A energia total do sistema é então $E = -(n_\uparrow - n_\downarrow)\mu H$, onde μ é o momento magnético das partículas, e $n_\uparrow$ ($n_\downarrow$) é o número de spins paralelos (anti-paralelos) ao campo.

(a) Sendo que a energia total do sistema se encontra entre E e $E + \delta E$, com $1 \ll \delta E/\mu H \ll N$, calcule o número total de estados acessíveis $\Omega(E)$.

(b) Usando a fórmula de Stirling $\ln n! \approx n \ln n - n$ para $n \gg 1$, reescreva $\ln \Omega$ como função de E.

(c) Assumindo que E esteja numa região onde $\Omega(E)$ é grande, ou seja, longe dos extremos $\pm N\mu H$, aplique a aproximação Gaussiana no item (a) para obter uma expressão simples para Ω como função de E.

(d) Usando que $\beta \equiv \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E}$, escreva a relação entre a energia total do sistema e sua temperatura absoluta.

(e) Em que circunstância a temperatura é negativa? O que isso implica para $n_\uparrow$ e $n_\downarrow$?

(f) Redefinindo $\Omega\,(E)$ como o número de estados com energia menor que E, a temperatura se torna negativa? (Vide Temperatura Negativa na aba de Links na página do curso.)

(g) Calcule a magnetização M do sistema como função do campo magnético externo e da temperatura absoluta. Sem campo externo ($H = 0$), é possível ter magnetização não nula? Que ingrediente se faz necessário para se ter magnetização não nula na ausência de campo externo?

5. Reif: 1.19, 1.20, 2.3, 2.7, 3.3