FISICA ESTATISTICA (2002/2003)

Professor: José Fernando Mendes

Folha 4 - Sistema isolado. Sistema canónico

1. Um sistema é constituído po N dipólos eléctricos, com posições (dos centros de massa) fixas. Cada dipolo pode vibrar livremente em torno do seu cen tro de massa, e é constituído por duas cargas ($+q$ e $-q$) separadas por uma d istância fixa b. Seja I o momento de inércia de cada dipolo em relação ao se u centro de massa. Um campo electrico uniforme (E) é aplicado segundo uma direc cao fixa (eixo zz). As interaç ões entre dipolos são ignoradas.
1.1 Mostre que o Hamiltoniano de um dipolo é dado por:

$$\mathcal{H} = \frac{p_\theta^2}{2I} + \frac{p_\phi^2}{2I \sin^2\theta} - qbE\cos\theta \tag{1}$$

1.2 Deduza que a função de partição para cada dipolo é:

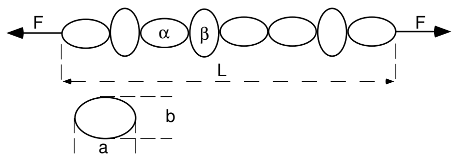
$$\mathcal{Z} = 2\left(\frac{I}{\beta}\right)\frac{sh(\beta qbE)}{\beta qbE} \tag{2}$$

1.3 Se o sitema estiver isolado (energia E_0), deduza que β é determinado por:

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{\beta}\left[2 - \frac{\beta qbE}{th(\beta qbE)}\right] \tag{3}$$

Mostre que existe uma e uma só solução se $E_0 \geq -qbE$.
1.4 Sendo $P = \sum_i qb\cos\theta_i$ o momento dipolar total (projecção segundo zz. Calcule $\langle P\rangle$ e $\langle(P - \langle P\rangle)^2\rangle$

3. Considere uma cadeia unidimensional com N moléculas, as quais podem estar em duas configurações diferentes, α e β, com energias ϵ_α e ϵ_β respectivamente e comprimentos a e b. A cadeia está sujeita a uma força de tensão F.



3.1 Justifique que as energias para cada uma das ligações é respectivamente:

$$E_\alpha = \epsilon_\alpha - F\,a \quad e \quad E_\beta = \epsilon_\beta - F\,b \tag{4}$$

3.2 Mostre que a função de partição para o sistema é: $\mathcal{Z}_N = \left(e^{\beta(Fa-\epsilon_\alpha)} + e^{\beta(Fb-\epsilon_\beta)}\right)^N$.
3.3 Calcule o valor médio do comprimento $< L >$ (da cadeia) em função de F e temperatura.
3.4 Assuma que $\epsilon_\alpha > \epsilon_\beta$ e $a > b$. Calcule o valor médio do comprimento $< L >$ para $F = 0$ como função da temperatura. O que são temperaturas baixas e altas, e calcule $< L >$ nesses limites.