Introdução à Física Estatística
FOICE
Maria Eduarda G. Freitas

Resumo Teórico

De forma genérica, uma probabilidade num espectro contínuo está relacionada com um diferencial de uma grandeza e um espaço total, como:

$$dP_n = \frac{dn}{n}$$

Em contraste com a probabilidade que conhecemos no discreto:

$$P_A = \frac{N_A}{N_{total}}$$

Relação entre entropia e número de microestados:

$$S = k_B \ln \Omega$$

Definição constante de Boltzmann e surgimento da função de partição:

$$\frac{P_n}{e^{-\beta \cdot E_n}} = \frac{1}{Z};\ \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Cálculo função de partição:

$$\sum_i \frac{1}{Z} \cdot e^{-\beta E_i} = 1 \iff Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

Cálculo de energia média (análogo a qualquer valor médio):

$$\overline{E} = \frac{1}{Z} \sum_i E_i \cdot e^{-\beta E_i}$$

Valores médios são aditivos. Relação entre energia interna média e energia molecular média:

$$\overline{U} = N\overline{E}$$

Fórmula de desvio padrão:

$$\sigma_E^2 = \overline{E^2} - (\overline{E})^2$$

1 Aquecendo

1.1 Fez uma, fez todas

(a) Dada uma agulha de 4 cm de comprimento, quando jogada ao acaso num assoalho feito de 2 tábuas de 4 cm de largura, qual a probabilidade de que a agulha caia atravessando uma das junções?

(b) Dada uma agulha de comprimento l, jogada num plano dividido por infinitas retas paralelas distando t umas das outras, qual a probabilidade dela cair tocando uma das retas?

O problema acima foi proposto pelo Conde de Buffon, um naturalista, matemático e cosmólogo francês. Buffon propôs um método estatístico, hoje reconhecido como um Método de Monte Carlo, para o cálculo de π - que é ilutrado no problema da "Agulha de Buffon" de que tratamos acima.

2 Problemas introdutórios

2.1 Média degenerada

Suponha que você tem 10 átomos de um elemento (digamos, Arnóbio): 4 com energia 0 eV, 3 com energia 1 eV, 2 com energia 4 eV e 1 com energia 6 eV.

(a) Calcule a energia média dos átomos, somando os valores de energia e dividindo-os por 10 (que é o número de átomos).

(b) Calcule a probabilidade de um dos átomos escolhido aleatoriamente tenha cada valor E de energia, para os quatro valores de E.

(c) Agora calcule a energia média novamente, usando $\overline{E} = \sum E_i \cdot P_i$.

2.2 Demonstrando é mais gostoso

Prove que, para qualquer sistema em equilíbrio com um reservatório a temperatura T, o valor médio da energia é:

$$\bar{\epsilon} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} lnZ$$

onde β é o fator de Boltzmann. Essas fórmulas podem ser úteis quando se tem uma expressão definida para a função de partição.

2.3 Incerto quanto à própria capacidade?

Demonstre que:

$$\overline{E^2} = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

Então use esse resultado para encontrar a capacidade calorífica de um gás, $\frac{\partial \overline{E}}{\partial T}$, em função do desvio padrão da energia média.

3 Mais problemas

3.1 X-tudão do Magnetismo

Tu nem leu errado! Encontre a função de partição de um dipolo paramagnético de dois estados, a probabilidade de cada estado, e a energia de N dipolos desse juntinhos.

3.2 Rodoxígênio

Para uma molécula de oxigênio, a constante de energia ϵ é aproximadamente $0,00018$ eV. Estime a função de partição rotacional para uma molécula de O_2 em temperatura ambiente.

3.3 Outro problema pra resolver na sala idealmente

Deduza o Teorema da Equipartição utilizando a função de partição e considerando que ele só se aplica a sistemas com "graus de liberdade" quadráticos, em que a energia é da forma:

$$E(q) = cq^2$$

onde c é uma constante e q é uma variável qualquer (momento, posição ou momento angular).

3.4 Liberdade na reta

Considere um "grau de liberdade" clássico que seja linear em energia, ao invés de quadrático: $E = cq$ para alguma constante c (como a energia cinética de uma partícula relativística em uma dimensão, escrita em termos de seu momento). Repita a dedução do Teorema da Equipartição e compare o resultado com o original.

Para sistemas de partículas que não interagem, mas são distinguíveis:

$$Z_{total} = Z_1 Z_2 Z_3 ... Z_N$$

Para sistemas de partículas que não interagem, e são indistinguíveis (MAS em que a densidade de partículas é baixa):

$$Z_{total} = \frac{1}{N!} Z_1^N$$

A prova fica como exercício para o leitor, porque o restante das coisas que eu achei pra colocar envolviam função de energia livre de Hemholtz, e aí a gente já sai da minha frente.