
Distribuição de Energia

META:

Estudar o comportamento da distribuição de energia e familiarizar o aluno com o uso de ferramentas estatísticas para analisar problemas de física.

OBJETIVOS:

Ao fim da aula os alunos deverão ser capaz de:

- Obter os microestados de um sistema.
- Identificar o tipo de ensemble que melhor descreve os experimentos bem como entender como podemos aplicar este conceito em sistemas encontrados no nosso dia-dia.
- Fazer uso das ferramentas estatísticas para determinar as propriedades macroscópicas do sistema tais como a temperatura de um sistema.

PRÉ-REQUISITOS

- Conteúdo da primeira aula;
- Tenham cursado ou estejam cursando a disciplina Introdução à Física Estatística.

3.1 Introdução

Caros alunos, nesta aula serão realizados experimentos para compreendermos um pouco mais as propriedades físicas de sistemas constituídos por muitas partículas tais como os gases, líquidos e sólidos. Quando falamos em muitas partículas estamos falando que estamos interessados em descrever o comportamento de sistemas com número de partículas da ordem de $6,02 \times 10^{23}$, nestas condições talvez seja impossível escrever as equações de movimento bem como conhecer a posição e a velocidade de todas as partículas em todo instante de tempo, mesmo conhecendo as forças de interação entre as partículas.

Compreender as propriedades macroscópicas como a temperatura e a capacidade térmica destes sistemas baseados puramente nas leis de Newton parece ser uma tarefa não muito fácil, quase impossível, mesmo para os mais potentes computadores disponíveis atualmente. Para descrever estes sistemas faremos uso da física estatística, através da teoria dos ensembles de Gibbs que permite conectar as características microscópicas com as propriedades macroscópicas encontradas na matéria. Vale salientar que os resultados aqui encontrados também podem ser usados para descrever as propriedades de sistemas químicos e biológicos encontrado na natureza, dentre outros.

3.2 Revisão

Sabemos que a termodinâmica consegue explicar muitas propriedades macroscópicas facilmente medidas em laboratório, como a temperatura, pressão e a capacidade térmica, mesmo sem considerar explicitamente as propriedades microscópicas das partículas que compõe o sistema. No entanto, sabemos também que as propriedades macroscópicas da matéria são uma consequência direta da interação de cada átomo do material com os demais átomos do meio onde está inserido e com o ambiente a sua volta, desta forma as propriedades macroscópicas do sistema são fortemente afetadas pelas características de seus constituintes, por isso é fundamental relacionar o comportamento macroscópico de um sistema com a sua estrutura interna (microscópica). A mecânica estatística estabelece uma ponte entre a ciência empírica da termodinâmica (macroscópica) com as propriedades da estrutura da matéria (microscópicas).

Considere um sistema isolado composto por um grande número N de partículas. Estas partículas podem ser encontradas em qualquer um dos vários estados de energia E_1, E_2, E_3, \dots permitido para o sistema. Em geral, os estados de energia podem ser:

Quantizados - como os estados vibracionais e rotacionais das moléculas e os estados estacionários dos elétrons em torno do núcleo.

Contínuo - como acontece com a energia cinética de translação das moléculas de um gás e o espectro de radiação beta na desintegração radioativa.

A forma como as partículas ocupam os níveis de energias varia no tempo e depende da interação das partículas entre si e destas com o meio a sua volta. Num determinado instante o número de partículas em cada um dos estados de energia pode ser descrito por, n_1 partículas com energia E_1 , n_2 partículas com energia E_2 , e assim por diante. Desta forma a energia total do sistema pode ser dada por:

$$U = \sum_i n_i E_i , \quad (3.28)$$

e o número total de partículas por:

$$N = \sum_i n_i . \quad (3.29)$$

A sequência de números (n_1, n_2, n_3, \dots) constitui uma partição do sistema. Esta sequência define um microestado do sistema consistente com o macroestado determinado pelo número de partículas, energia total, estrutura de todas as partículas e os parâmetros externos.

O problema chave da mecânica estatística é encontrar a partição ou a lei de distribuição mais provável para um sistema isolado, conhecendo a sua composição. Uma vez encontrada a partição mais provável o problema seguinte é encontrar um método para deduzir, a partir dela, as propriedades macroscópicas tais como a temperatura, energia média, calor específico do sistema. Os ensembles de Gibbs relaciona os microestados do sistema com suas propriedades macroscópicas. Os ensembles são definidos pela fun-

ção de distribuição que os caracteriza.

Os ensembles mais importantes na descrição de sistemas físicos são:

Microcanônico - Descreve o comportamento de sistemas fechados e isolados, isto é, neste sistema a energia e o número de partículas são mantidos constante.

Canônico - Descreve o comportamento de sistemas fechados mas em contato com um reservatório de calor. Neste sistema o número de partículas é mantido fixo mas a energia pode variar entorno de um valor médio.

Grã-Canônico - Descreve o comportamento de sistemas abertos e em contato com um reservatório de calor. Neste sistema o número de partículas e a energia pode variar.

Para determinar a lei de distribuição de um sistema, podemos tentar várias hipóteses plausíveis até obtermos uma lei de distribuição que esteja de acordo com os dados experimentais.

Atualmente são usadas três leis de distribuição, ou leis estatísticas, para descrever os sistemas físicos:

- Distribuição de Maxwell-Boltzmann (Clássica)
- Distribuição de Fermi-Dirac (Quântica)
- Distribuição de Bose-Einstein (Quântica)

Considere um sistema composto por um grande número de partículas idênticas, ou seja, partículas com mesma estrutura e composição como acontece com um gás composto por uma única espécie de moléculas ou com os elétrons livres em um metal. Suponha que

as partículas podem ocupar os estados de energia E_1, E_2, E_3, \dots e que há n_1, n_2, n_3, \dots partículas em cada estado conforme mostrado na Figura 3.1.

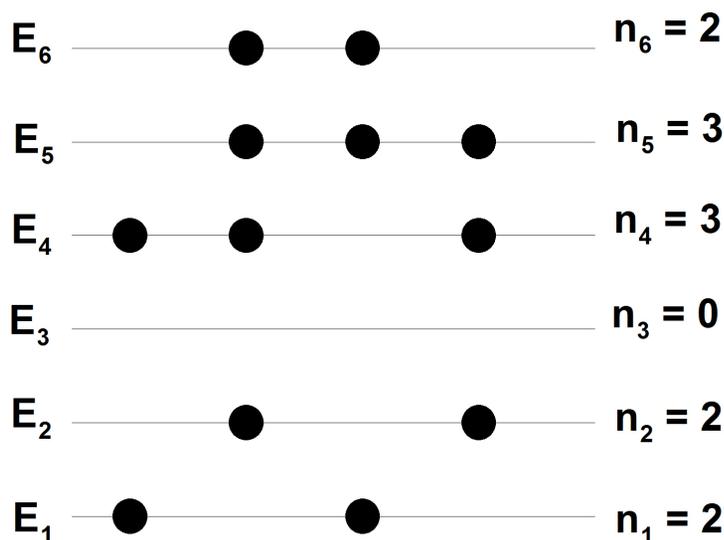


Figura 3.1: Distribuição de partículas entre os diversos estados de energia.

A energia total U e o número total de partículas N são dadas pelas equações 3.28 e 3.29, respectivamente. Se o sistema estiver isolado U e N são constantes.

A primeira tarefa da mecânica estatística é determinar a probabilidade P de ocorrência de uma dada partição (n_1, n_2, n_3, \dots). O segundo passo consiste em calcular a distribuição correspondente ao microestado de equilíbrio do sistema, ou seja, determinar a partição mais provável para o sistema dado o número de partículas N e a energia U .

Em um gás ideal clássico a distribuição de energia ou velocidade das partículas podem ser descritas pela distribuição de Maxwell-

Boltzmann. Esta distribuição não restringe o número de partículas que podem ocupar um determinado estado de energia como acontece na distribuição de Fermi-Dirac. Contudo alguns estados de energia podem ter uma maior probabilidade de estar ocupados que outros. Em geral, os níveis de energia podem ter diferentes probabilidades intrínsecas (g_i) de serem ocupados. Quanto maior o g_i , maior a probabilidade de o estado ser ocupado.

No equilíbrio, a probabilidade P é máxima e os números de ocupação n_i são proporcionais às probabilidades intrínsecas g_i . Sendo assim, quanto maior for o g_i mais provável é que uma partícula esteja no estado E_i .

As partículas em equilíbrio tendem a favorecer os estados de energia mais baixa, de forma que as partículas em estados com energia mais elevada tendem a passar para estados com energia mais baixa, ou seja, quanto maior for a energia E_i , menos provável é que a partícula esteja nesse estado quando se alcança o equilíbrio estatístico. Uma expressão que satisfaz esta exigência é uma exponencial negativa na forma $e^{-\beta E_i}$, onde $\beta = 1/k_B T$ é um parâmetro positivo que está relacionado com a temperatura. É plausível admitir que o número de ocupação da partição mais provável ou de equilíbrio deverá ser da forma:

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i}, \quad (3.30)$$

onde Z é chamada de função de partição e é dada por:

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}, \quad (3.31)$$

3.3 Procedimento Experimental

Para realizar este experimento utilizaremos dados (no mínimo 10) não viciados, ou seja, a probabilidade intrínseca de cada uma das faces é a mesma ($g = 1$). As informações deste experimento também poderão ser obtidos através do uso de software consulte seu professor.

Experimentos

- Os alunos deverão se juntar em grupos de no máximo cinco alunos.
- Cada aluno do grupo deverá efetuar 400 lançamentos de um grupo de 10 dados (no caso de 5 alunos serão obtidos 2000 lançamentos).
- Para cada um destes lançamentos serão anotados os números de ocorrências de cada um dos valores da face que apareceu voltada para cima em cada um dos dados. Use como modelo a tabela a seguir.

Considere que um dado com a face 1 para cima corresponde a uma energia de 1, se a face for 2, a energia é 2 e assim por diante. Em cada lançamento deverá ter n_1 ocorrências do número 1, n_2 ocorrências do número 2, etc. Cada lançamento corresponde a um microestado (n_1, n_2, n_3, \dots) , que não é obrigatoriamente o mais provável.

	VALOR								ENERGIA
Dado-1									
Dado-2									
Dado-3									
Dado-4									
Dado-5									
Dado-6									
Dado-7									
Dado-8									
Dado-9									
Dado-10									

Figura 3.2: Modelo de tabela a ser preenchida com os resultados dos lançamentos.

Utilizando a equação 3.28, calcule a energia total deste microestado e coloque também na tabela. Para cada um dos lançamentos subsequentes faça o mesmo cálculo para obter a energia total do sistema para cada dado microestado.

ATIVIDADES

1. Discuta com seus colegas sobre a validade da distribuição de Maxwell-Boltzmann para descrever o experimento aqui proposto.
2. Qual ensemble descreve melhor os resultados obtidos?



3. Construa um histograma mostrando a distribuição da energia total.

- Qual é a energia mais provável (ou distribuição de dados)?

4. Selecione aqueles lançamentos cuja energia total é igual a 20. Organize uma tabela indicando os números de ocorrências de cada face (microestados).

- Neste caso o ensemble usado para descrever os dados é o mesmo? Explique sua resposta.
- Calcule o número médio de ocorrência de cada uma das faces.
- Use a equação 3.30 que fornece uma relação entre o número médio de ocorrência de cada uma das faces com a energia de cada face e faça um gráfico apropriado que possibilite obter os valores numéricos de Z e de β . DICA: Faça uma linearização da equação 3.30 e use os coeficiente angular e linear para calcular o que é solicitado. Note que $N = 10$.
- Utilize o valor de β obtido no gráfico e substitua na equação 3.31.

– O valor de Z é confirmado?

5. Repita o procedimento 2 para valores diferente de energia (Use pelo menos mais dois valores de Energia).

6. Obtenha o valor da entropia e da temperatura para as três energias usadas.
7. Como estes parâmetros variam com a energia total?
8. Como você interpreta esta variação?
9. Elabore um relatório com os dados obtidos neste experimento respondendo todas as perguntas encontradas nas atividades aqui propostas. OBS: Use as recomendações para confecção do relatório dado na aula 2.

RESUMO



Na aula de hoje, vimos através de experimentos como obter os microestados de um sistema, aprendemos a determinar a função de partição e como encontrar o estado de energia mais provável (equilíbrio). Destacamos a importância dos ensembles de Gibbs na descrição de sistemas físicos e mostramos como obter as propriedades macroscópicas do sistema através desta teoria.



PRÓXIMA AULA

Na próxima aula iremos abordar nosso primeiro experimento sobre a física da matéria condensada. Neste experimento veremos, do ponto de vista fenomenológico, o efeito da temperatura nas propriedades elétricas dos materiais. Mais precisamente, entenderemos melhor os mecanismos de condução e a teoria de bandas em sólidos. Reveja a primeira aula. Bons estudos.



AUTO-AVALIAÇÃO

1. Eu sei o que é a partição de um sistema?
2. Eu sei determinar a partição de um sistema?
3. Eu sei distinguir os diferentes tipos de ensembles?
4. Conhecendo o ensemble eu sei determinar as propriedades macroscópicas do sistema?

LEITURA COMPLEMENTAR



- [1] SALINAS, Sílvio R. A., **Introdução a Física Estatística**, 2ª Edição, São Paulo: Editora da USP, 2008.

- [2] REIF, F., **Fundamentals of Statistical and Thermal Physics**, USA:Waveland Press, Inc., 2009.

- [3] KUBO, Ryogo, **Statistical Mechanics**,New Yourk: Elsevier, 1978.

- [4] Notas de aula, curso de laboratório de física estatística e da matéria condensada, DFI-UFS.