

7600023 – Termodinâmica e Física Estatística

Diogo O. Soares-Pinto

Instituto de Física de São Carlos
Universidade de São Paulo

dosp@ifsc.usp.br

Introdução

Existem duas formas mais comuns de introduzir a Termodinâmica:

- Abordagem *fenomenológica*
As leis da Termodinâmica são postuladas e a teoria é construída a partir delas.
- Abordagem *estatística*
As propriedades termodinâmicas macroscópicas de um sistema são derivadas a partir da investigação dos graus de liberdade microscópicos usando métodos da Física Estatística. Neste caso, o objetivo principal é derivar leis fundamentais a partir de considerações microscópicas.
- **Importante:** Existem visões diferentes sobre os fundamentos da teoria e como esta deve ser introduzida. Isso pode não importar para as aplicações, mas alternativas distintas e aparentemente contraditórias causam confusão e são insatisfatórias do ponto de vista conceitual.

Como se “faz” Física?

Forma operacional:

- **Observações** $\Rightarrow$ Obtemos dados empíricos sobre o mundo: *Experimento*. Inicialmente é uma lista não estruturada; somente números ou qualquer outra forma de informação adquirida.
- **Explicação dos dados** $\Rightarrow$ Vamos adquirindo informação e deduzindo seu significado: “Se fizer X , então Y acontece”.
A lista aumenta a cada observação. O acúmulo de listas de outros observadores nos ajuda a melhorar nosso conhecimento sobre os dados.
Chegará o momento em que a lista será tão grande que se tornará difícil armazená-la. Portanto, uma maneira simples de administrar esses dados para explicá-los é uma forma de *compressão de dados*: Maneira fácil de armazenar sem ter que passar por toda lista novamente.

- **Entender os dados** $\Rightarrow$ Somente listas de dados comprimidos não é suficiente. Queremos entender esses dados: Útil para uma infinidade de tarefas.
Se entendermos os dados, conseguimos descrevê-los a partir de modelos simples: *Conceito de simplicidade*
 - Hamiltoniano: Em Física temos o preconceito a favor dessa quantidade por que, dentre outros motivos, é uma boa maneira de expressar/descrever os dados que recebemos de forma compacta.
 - Rede neural (aprendizado de máquina) que reproduz os dados.
 - ...
 - A própria lista de dados que temos.
- **Previsão** $\Rightarrow$ Queremos prever fenômenos e explicar o que pode vir acontecer se fizermos uma nova observação $\rightarrow$ Fazer hipóteses que podem ser descartadas e não confirmadas: Descartar hipóteses feitas de maneira excessiva.

- **Voltar ao primeiro passo.** Iteração através desse processo: fazendo hipóteses e descartando hipóteses. Com isso conseguimos construir a forma/descrição mais compacta do universo (Hamiltoniano na Física). Assim, teremos uma lista de modelos que fizemos do universo, incluindo cada um que rejeitamos, até sobrar uma lista incrivelmente pequena de modelos que se aplicam ao universo: Saímos do conjunto de todas as explicações e chegamos a pontos que favorecemos.
- Com o passar do tempo, temos cada vez menos explicações consistentes com todas as nossas observações. Então, começamos a desenvolver preconceitos a favor de determinadas explicações com base na “simplicidade”.
Sempre existe pelo menos uma explicação que é consistente com todas as observações que foram feitas: a lista de todos os dados observacionais coletados. Não é simples e, em geral, nem permite o entendimento a partir dela.

Explicações simples (em Física): Hamiltoniano que depende de um número finito, ou uma lista finita, de parâmetros desconhecidos. A lista ser finita, pelo menos no caso que desejamos explicar, é importante por que é definida a partir dos experimentos feitos: *lista infinita significa infinitos experimentos*, o que é impraticável.

Modelo microscópico: Lista de graus de liberdade que queremos explicar com um número finito de parâmetros.

Estrutura de uma teoria física

Uma teoria física deve consistir, idealmente, de:

- Uma estrutura matemática: Teoria matemática rigorosa e bem definida, baseada em poucos axiomas claramente definidos. Esta teoria matemática também deve ter teoremas, que são consequências lógicas dos axiomas.
- Certas regras de interpretação que descrevem o significado das quantidades matemáticas em termos dos experimentos.
- Se a teoria física for útil, pelo menos algumas das quantidades da estrutura matemática for um observável no sentido de que estão associados, através das regras de interpretação, com certos conceitos tirados do experimento.

Podem existir outras quantidades (puramente teóricas) que não possuem interpretação a partir de um experimento:

A teoria assumirá uma forma particularmente simples se todas as quantidades da estrutura matemática forem observáveis.

Dois motivos para essa escolha dessa formulação de simplicidade da teoria:

⇒ Os únicos resultados diretamente aplicáveis da teoria são os que contêm somente quantidades observáveis. Desta forma, o conteúdo útil da teoria física se mantêm inalterado se abrirmos mão de todas as quantidades puramente teóricas → Essas são quantidades que representam os aspectos redundantes de teoria. Sua ausência trás pouca ou nenhuma consequência observável: **Teorias físicas distintas (com diversas quantidades teóricas) podem ser equivalentes se todos seus resultados observáveis concordarem.**

- Se todas as quantidades forem observáveis, então todas as suposições contidas na estrutura matemática terão um significado direto em termos do experimento.
- Se uma extensão da teoria for necessária de tal forma que ainda não existam quantidades puramente teóricas, a teoria original deve estar contida nesta nova versão.

⇒ Esta formulação permite um número reduzido de regras de interpretação:

- É suficiente definir somente as regras de interpretação para as quantidades diretamente observadas. A interpretação de qualquer quantidade derivada a partir dessas fica determinada por sua definição em conjunto com as originais. Tentativas de interpretar explicitamente as quantidades derivadas das originais, além de redundante, pode levar a inconsistências.
- Conceitos indiretos são construídos a partir de conceitos diretos → Quantidades derivadas são obtidas a partir de quantidades originais da estrutura matemática. Portanto, conceitos diretamente obtidos do experimento são *demonstráveis*, enquanto conceitos indiretos são *explicáveis* em termos dos diretos → Aqueles aspectos do experimento que estão associados por regras de interpretação com quantidades originais sejam tão diretos quanto possível; dessa forma, a falta de precisão inerente a essas regras será reduzida ao mínimo.

Estrutura ideal para uma teoria física:

Conclusão

- Uma teoria física deve consistir de uma parte matemática baseada em axiomas e certas quantidades, junto com um conjunto de regras de interpretação.
- As regras de interpretação devem atribuir as quantidades originais um significado em termos do experimento.
- Aspectos do experimento descritos pelas regras de interpretação devem ser os mais diretos possível.
- Quanto mais diretamente obtidos, a partir de experimentos, forem as quantidades, maior será a aplicabilidade da teoria física.
- Uma teoria que esteja de acordo com esses ideais será chamada de teoria física *ideal* de uma teoria expressa na *forma ideal*:
Permite entender os dados e prever fenômenos.

Formulação da Termodinâmica

A Termodinâmica é provavelmente a teoria física com maior gama de aplicações. Isto pode sugerir que a teoria é particularmente receptiva a uma formulação ideal e que suas quantidades são obtidas diretamente... Uma análise sobre a formulação da Termodinâmica vai nos mostrar que está longe de ser ideal. Entretanto, podemos pensar nessa teoria da seguinte forma:

Se as teorias físicas fossem pessoas, a Termodinâmica seria a bruxa da aldeia. Ao longo de três séculos, ela sorriu silenciosamente enquanto outras teorias surgiam e desapareciam, sobrevivendo a grandes revoluções na Física, como o advento da relatividade geral e da mecânica quântica. As outras teorias a acham um tanto estranha, de alguma forma de natureza diferente do restante, mas todos vêm a ela em busca de conselhos e ninguém ousa contradizê-la. Einstein, por exemplo, chamou-a de “a única teoria física de conteúdo universal, que estou convencido de que dentro da estrutura de aplicabilidade de seus conceitos básicos nunca será derrubada”. [J. Phys. A 49, 143001 (2016)]

Formulação baseada em três leis que podem ser enunciadas da seguinte maneira:

- **Lei zero da Termodinâmica:** *Se dois sistemas (termodinâmicos) estão em equilíbrio com um terceiro, eles estão em equilíbrio entre si.*
- **Primeira lei da Termodinâmica:** *Se um sistema experimenta (passa por; está sujeito a) um processo adiabático, o trabalho feito sobre o sistema depende somente dos estados inicial e final.*
- **Segunda lei da Termodinâmica:**
 - Clausius: *Nenhum processo é possível cujo único resultado é que o calor é transferido de um corpo para outro mais quente.*
 - Kelvin (e Planck): *Nenhum processo é possível cujo único resultado é que um corpo é resfriado e trabalho é feito.*
 - Carathéodory: *Em qualquer vizinhança de qualquer estado existem estados que não podem ser alcançados a partir dele por um processo adiabático.*

Termodinâmica

- A Termodinâmica está principalmente interessada nas transformações de calor em trabalho mecânico e vice-versa. Por calor entenda uma forma de energia que pode ser transformada em outras formas de energia.
- Em 1824, Carnot obteve um entendimento razoavelmente claro sobre as *limitações* envolvendo as transformações de calor em trabalho: Essecialmente a segunda lei da termodinâmica.
- Em 1842, Mayer descobriu a equivalência entre calor e trabalho mecânico, fazendo o primeiro anúncio do princípio de conservação de energia: Primeira lei da termodinâmica.
- Equivalência de calor e energia dinâmica a partir da interpretação cinética: Fenômenos térmicos são oriundos de movimentos desordenados de partículas → Estudo do calor como ramo especial da mecânica: Ensemble com um número enorme de partículas cujas propriedades são importantes em média ⇒ Mecânica Estatística.

- Em Termodinâmica: Leis fundamentais são consideradas como postulados baseados na evidência experimental. Conclusões são obtidas sem necessidade de mecanismos cinéticos do fenômeno.
- Esses resultados são independentes das condições simplificadoras consideradas na mecânica estatística. Portanto, os resultados são bastante precisos.
- Em contrapartida, eventualmente não é satisfatório obter esses resultados sem ser capaz de os detalhes microscópicos do mecanismo. Portanto, a teoria cinética e a mecânica estatística têm importante complementar a Termodinâmica.
- Existe uma terceira lei da Termodinâmica. Enquanto a primeira e a segunda têm sua fundamentação estatística na mecânica clássica, a terceira tem sua fundamentação estatística na mecânica quântica.