Instituto de Física
USP

Física Moderna I
Aula 05

Professora: Mazé Bechara

Aviso – duplas que devem escolher outros temas

- (2º

  - As duplas abaixo terão que escolher novo tema. Temas disponíveis: uma dupla para o 5-I e uma dupla para o 8-II e duas duplas no tema 9-II. Data limite 16/3

- Dupla 15: Lidia E. Santana e Vinicius Rodrigues
- Dupla 16: Marcos Everton Silva Custódio e Jairo Mendes da Silva (falta assinatura)
- Fabio Gregório Galindo , encontre uma dupla para, de comum acordo, se transformar em um trio. Data limite: 16/3

Aula 05 – Sólidos: medidas experimentais, modelos e a mecânica estatística clásssica

1. Do teorema de Boltzmann à distribuição de energias de um sistema de osciladores harmônicos unidimensionais. O valor médio da energia e o calor específico molar a volume constante.

2. Sistema de osciladores unidimensionais **com energias quantizadas $\varepsilon = n\varepsilon_o$ com n=0,1,2,3...** : a distribuição de energias e o valor médio da energia.

3. A energia média para o sistema com oscilações tridimensionais de energias quantizados – novo modelo para os sólidos. O calor específico molar a volume constante e sua dependência com a temperatura. Comparação com os resultados experimentais.

4. Sólidos condutores no modelo de Drude para a corrente: a energia dos diferentes constituintes, a energia média (pela equipartição de energia), o c_V previsto e o experimental.

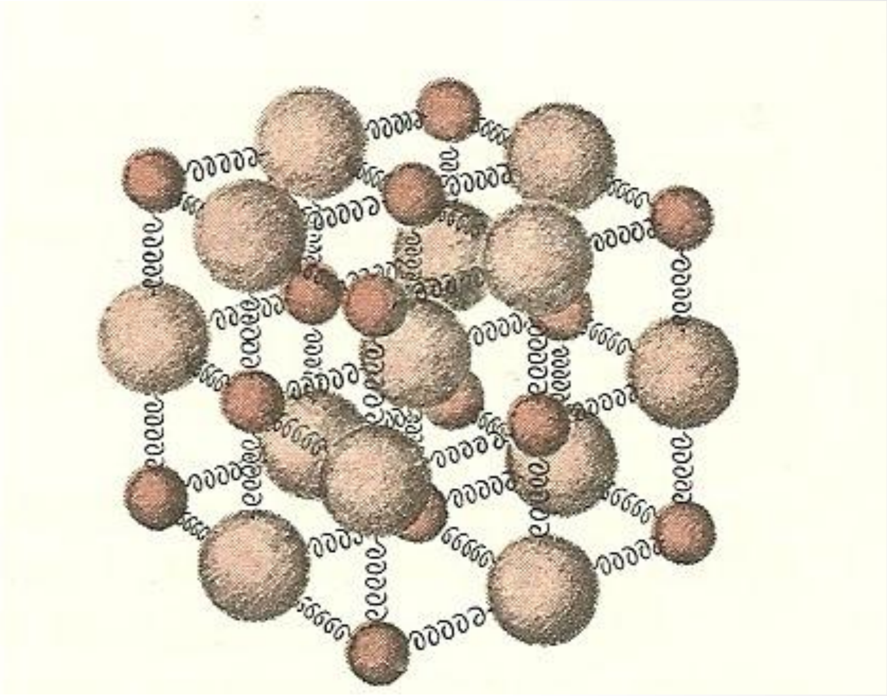
5. O interior dos constituintes da matéria (átomos não indivisíveis!): "sub-massas" e cargas e o efeito de seus movimentos.

Constituintes com movimento harmônico unidimensional: do teorema de Boltzmann até a distribuição de energia (contínua)

1. Demonstração formal em aula.
2. Discussão de significados.
3. O valor médio da energia proporcional à temperatura e o calor específico molar a volume constante independente da temperatura.

Um modelo de matéria sólida cristalina

- **Constituintes dos Sólidos (não amorfos ou cristalinos)** – átomos iguais ou diferentes interagindo com vizinhos como se fossem osciladores harmônicos tridimensionais.



Energias dos constituintes dos sólidos:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}mv^2 + E_{vibr} = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2 + \frac{1}{2}k_z z^2$$

Sistemas de muitos osciladores harmônicos unidimensionais com energias quantizadas

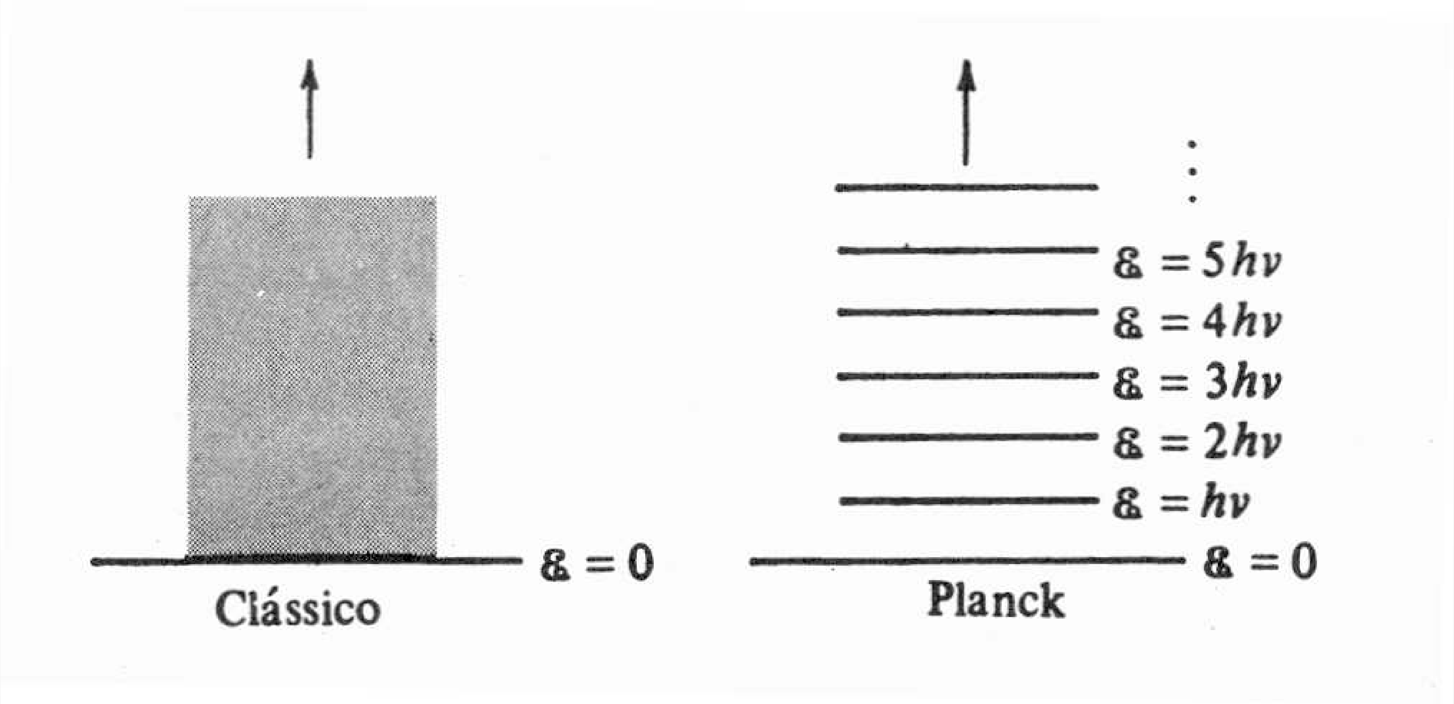
- O ponto de partida – proposta de Planck (1900) (a ser tratado nas próximas aulas) e adotado por Einstein para os sólidos.

$$\varepsilon = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}C_1x^2 = n_1\varepsilon_0 \qquad n_1 = 0,1,2,3...$$

- Por que? Por que a natureza física , surpreendendo a física clássica, seria assim n! Vamos ver o que resulta!

Diagrama de energias de sistemas de muitos osciladores harmônicos unidimensionais – energias contínuas (clássico) e discretas (Planck)

- *O ponto de partida – proposta de Planck (1900):* $\varepsilon_o = h\nu$



Sistema de muitos osciladores harmônicos unidimensionais com energias quantizadas

- *A distribuição de Boltzmann para energias discretas:*
- *Obs. Este tratamento foi feita por Einstein com base na proposta de Planck.*

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m v_x^2 + \frac{1}{2} C_1 x^2 = n_1 \varepsilon_0$$

$$n_1 = 0,1,2,3\ldots$$

$$f\left(\varepsilon_{n_1}\right) = \frac{dN\left(\varepsilon_{n_1}\right)}{N} = Ae^{-\frac{n_1 \varepsilon_0}{kT}}$$

$$\sum_{n_1=0}^{\infty} Ae^{-\frac{n_1 \varepsilon_o}{kT}} = 1$$

$$A = \frac{1}{\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\frac{n_1 \varepsilon_o}{kT}}}$$

A energia média dos muitos osciladores harmônicos unidimensionais com energias quantizadas

saiba demonstrar **(demonstração em aula)**

$$<\varepsilon> = \frac{\sum_{n_1=0}^{\infty} n_1 \varepsilon_o e^{-\frac{n_1 \varepsilon_o}{kT}}}{\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\frac{n_1 \varepsilon_o}{kT}}} = \frac{\varepsilon_o}{e^{\frac{\varepsilon_o}{kT}} - 1}$$

O valor médio é constante (independe de n_1) mas depende da temperatura T e da constante ε_o.

O calor específico molar a volume constante dos sólidos: sistema de muitos osciladores tridimensionais quantizados

- Do valor de energia média com quantização da energia ε dos osciladores ao calor específico molar a volume constante:

$$<\varepsilon>=\frac{3\varepsilon_o}{e^{\frac{\varepsilon_o}{kt}}-1}$$

$$c_v=N_o\frac{\partial<\varepsilon>}{\partial T}=\frac{3N_o\varepsilon_o^2 e^{\frac{\varepsilon_o}{kT}}}{kT^2[e^{\frac{\varepsilon_o}{kT}}-1]}$$

Saiba demonstrar que quando T tende a zero* (ou kT<< ε_o) c_v *tende a 3R, o resultado de Boltzmann sem quantização da energia.

c_v na matéria sólida – atinge o valor constante em temperatura que depende do sólido (na teoria de ε_o)

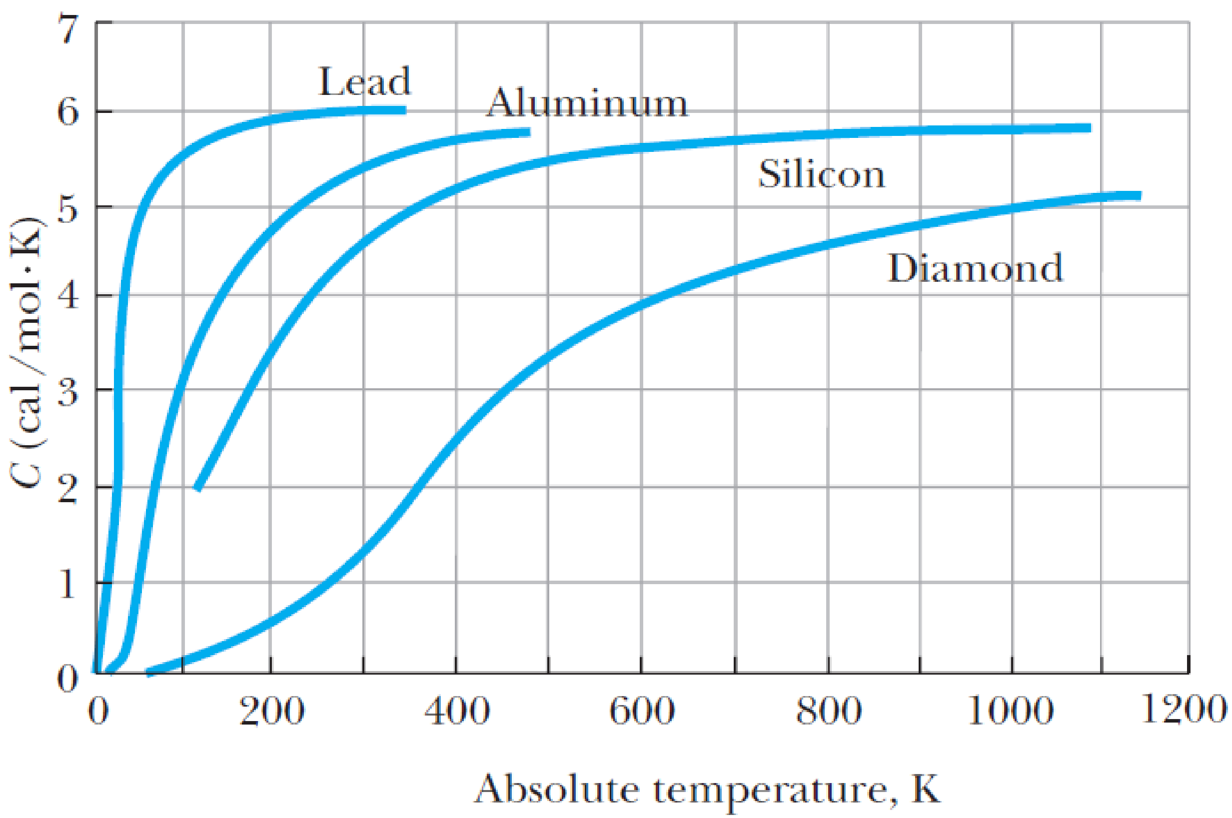


Figure 10.9 The dependence of specific heat on temperature for several solid elements.

Figura do **Serway, Moses e Moyer.**

c_v em diamante – T_E é a "temperatura de Einstein"

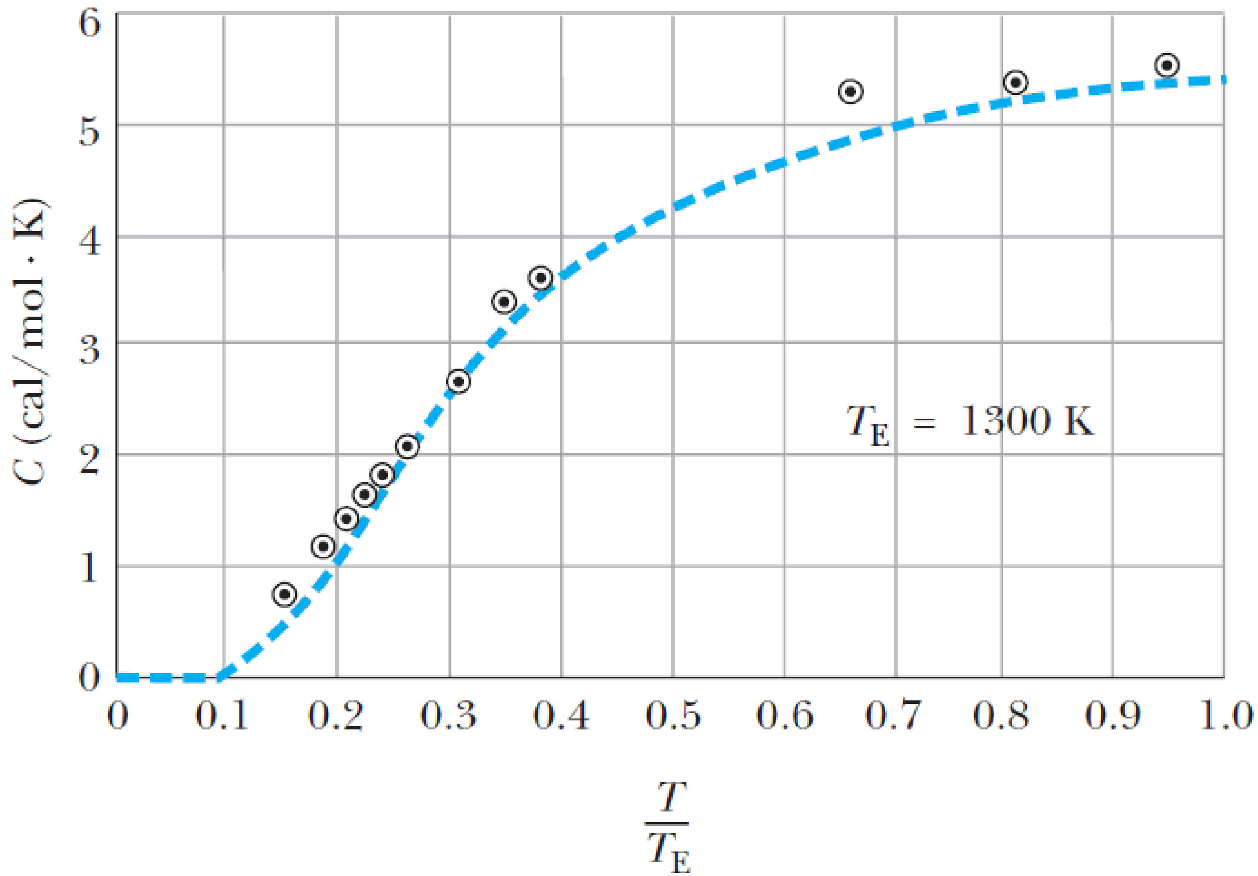


Figure 10.10 Einstein's specific heat formula fitted to Weber's experimental data for diamond. This figure is adapted from A. Einstein, *Ann. Physik.*, 4(22):180, 1907.

Figura do Serway, Moses e Moyer.

Teorema da EQUIPARTIÇÃO DA ENERGIA

Demonstrado na teoria estatística de Maxwell-Boltzmann, depois de ter sido considerado um princípio

Cada grau de liberdade, entendido como uma coordenada de posição $(x, y, z, \theta, \emptyset)$ **ou sua derivada** $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, \dot{\theta}, \dot{\emptyset})$**, que apareça QUADRATICAMENTE na expressão da energia de uma molécula de um sistema de N partículas, contribui para a energia média do sistema com a mesma quantidade** $\frac{1}{2}kT$**.**

Para o sólido modelado como átomos em oscilações harmônicas tridimensionais a energia média seria 3kT, e o calor especifico molar a volume constante 3R.

Modelo de Drude para a condução elétrica (1902)

Além da energia dos íons há a dos elétrons de condução:

$$\varepsilon_{ions} = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_y y^2 + \frac{1}{2}k_z z^2 \qquad \varepsilon_e = \frac{1}{2}m_e(v_{xe}^2 + v_{ye}^2 + v_{ze}^2)$$

E pelo teorema de equipartição: $$<\varepsilon> = \frac{9}{2}kT(?)$$

Este resultado não está de acordo com o experimental. Falha na teoria de Boltzmann que não se resolve só com a quantização da energia!
Chegou-se ao limite de validade da estatística clássica.

Mas isto já foi resolvido na Física no século XX. **(Veja em Física Moderna II)**

- O **spin dos constituintes definem outras estatísticas (quânticas) para sistemas de muitas partículas,** que coincidem com a de Boltzmann em alguns limites.

- **A estatística de Fermi e Dirac** mostra que o efeito do movimento dos elétrons de condução (s=1/2) é de aproximadamente 0,007% do efeito do movimento dos íons nos sólidos condutores, no qual estatística quântica coincide com a de Boltzmann. Daí a concordância do resultado experimental nos sólidos condutores e isolantes (dentro de 0,007%!) pela previsão clássica.

Os constituintes da matéria: "sub-massas" e cargas (múltiplas de e) em movimentos!