4300259 – Termoestatística

Integrais Gaussianas

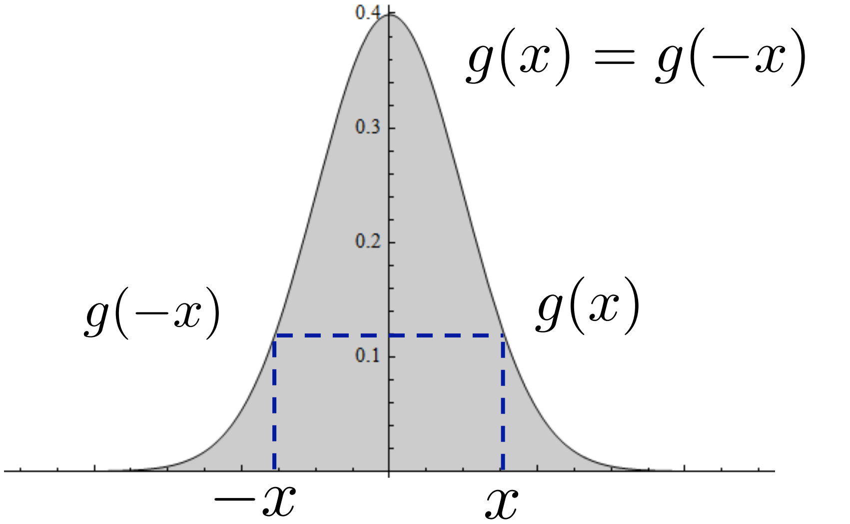
&

Teoria Cinética

1) $$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$

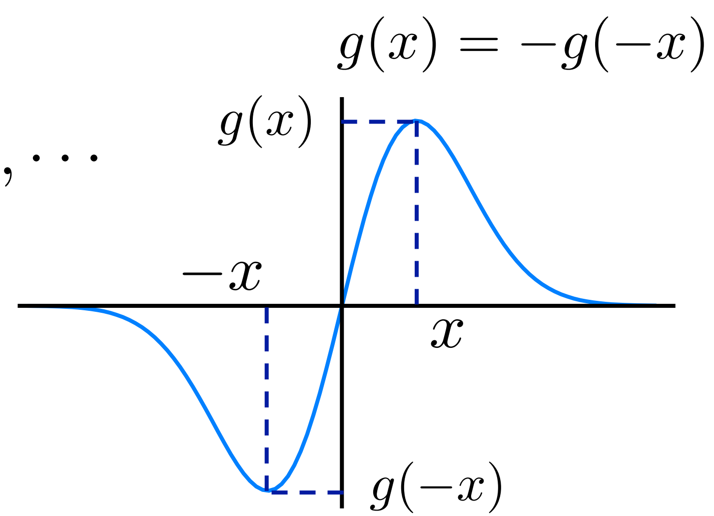
2) Sendo $g(x) = \exp(-\alpha x^2)$ uma função par, teremos:

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$



3) Sendo $g(x) = x^{2n+1} \exp(-\alpha x^2)$ uma função ímpar, onde $n = 0,1,2,\ldots$, teremos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = 0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$



4) Para $g(x) = x^{2n}\exp(-\alpha x^2)$, onde $n = 0,1,2,...,$ teremos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \frac{\pi^{1/2}}{\alpha^{(2n+1)/2}} \ , \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

5) Sendo $g(x) = x^{2n}\exp(-\alpha x^2)$ uma função par, onde $n = 0,1,2,...,$ teremos:

$$\int_{0}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx$$

6) Para $g(x) = x^{2n+1}\exp(-\alpha x^2)$, onde $n = 0,1,2,...,$ teremos:

$$\int_{0}^{\infty} x\, e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{\alpha}$$

$$\int_{0}^{\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \ , \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

Integrais Gaussianas:

1) Potências pares x^{2n}:

1.a) $$I_n(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^{2n}\, e^{-\alpha x^2} = \frac{(2n-1)!!\,\pi^{1/2}}{2^n\,\alpha^{(2n+1)/2}} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

$$(2n-1)!! = \begin{cases} 1\,, & \text{se} \quad n \leq 0 \\ 1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times (2n-1)\,, & \text{se} \quad n > 0 \end{cases}$$

1.b) $$I'_n(\alpha) = \int_0^{\infty} dx\, x^{2n}\, e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2} I_n(\alpha)$$

2) Potências ímpares x^{2n+1}:

2.a) $$J_n(\alpha) = \int_0^{\infty} x^{2n+1}\, e^{-\alpha x^2}\, dx = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

2.b) $$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n+1}\, e^{-\alpha x^2}\, dx = 0$$

Exercício: A distribuição normal é dada pela função $f(x) = N \exp(-\alpha x^2)$, onde N e α são constantes (não confundir N com o número de eventos!). Determine o valor da constante N que garante a condição

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1$$

Dica: não se esqueça do resultado geral

$$I_n(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^{2n}\, e^{-\alpha x^2} = \frac{(2n-1)!!\, \pi^{1/2}}{2^n\, \alpha^{(2n+1)/2}} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

$$(2n-1)!! = \begin{cases} 1\,, & \text{se} \quad n \leq 0 \\ 1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times (2n-1)\,, & \text{se} \quad n > 0 \end{cases}$$

Resolução: A integral de interesse corresponde ao caso $n = 0$ na fórmula geral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx$$
$$= N \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1 \implies N \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} = 1$$

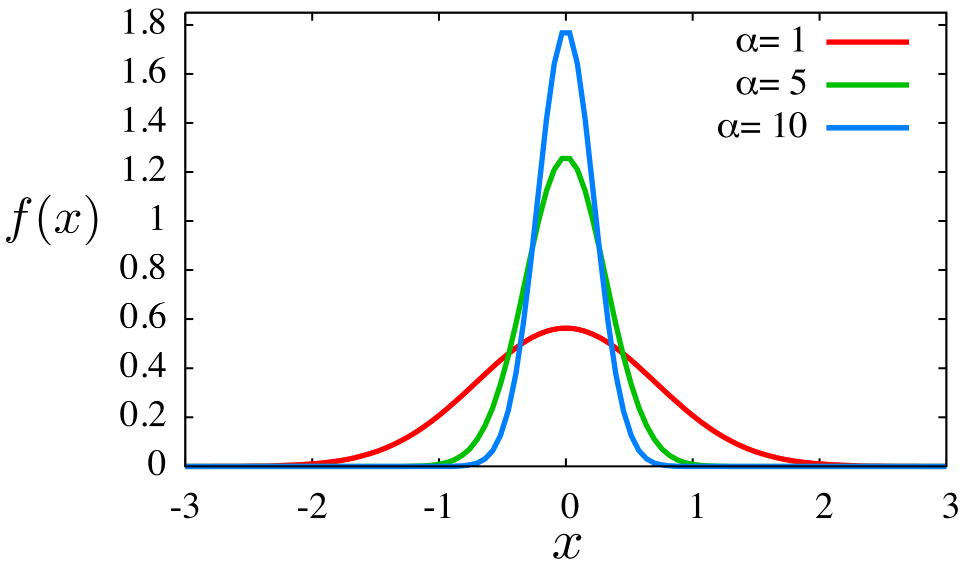
$$\boxed{N = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}}$$

Dessa forma, garantimos que a soma das probabilidades seja 1 para qualquer valor de α:

$$\boxed{f(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2}}$$

$$\boxed{f(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2}}$$

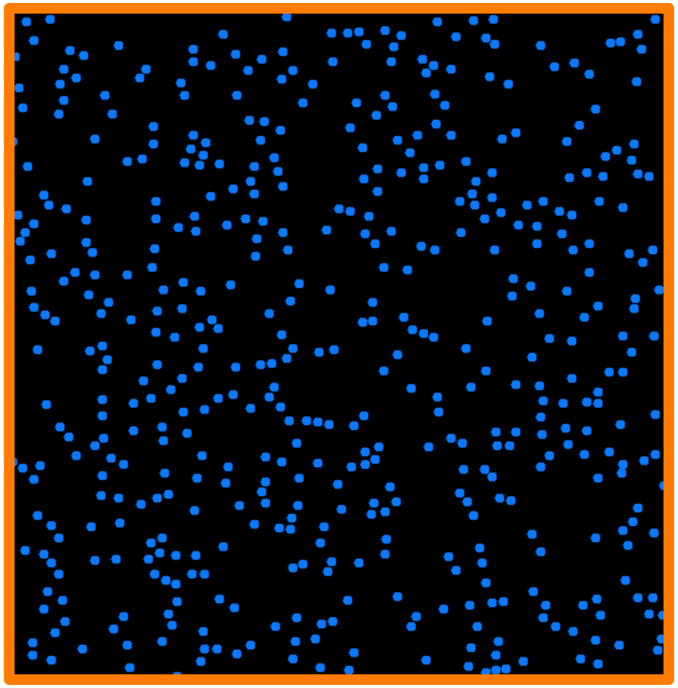
Exercício: Abaixo, são mostradas as curvas correspondentes para $\alpha = 1$, 5 e 10, obtidas com a normalização $N = (\alpha/\pi)^{1/2}$.



(a) Por que as curvas ficam mais estreitas e mais altas à medida que o expoente α aumenta?

(b) Que dimensão (unidades) tem o expoente α? E a função $f(x)$? Expresse sua resposta em termos das unidades da variável x.

Teoria Cinética: Modelo do Gás Ideal



– Moléculas de tamanho desprezível (puntiformes).

– Não há interação (em média as moléculas estão muito distantes).

– As moléculas colidem elasticamente entre si e contra as paredes do recipiente.

A proposta da Teoria Cinética é obter propriedades macroscópicas do gás (pressão, temperatura, etc.) a partir de médias sobre as partículas, que ocorrem em números *gigantescos*, $N \sim N_A \approx 6\times10^{23}$.

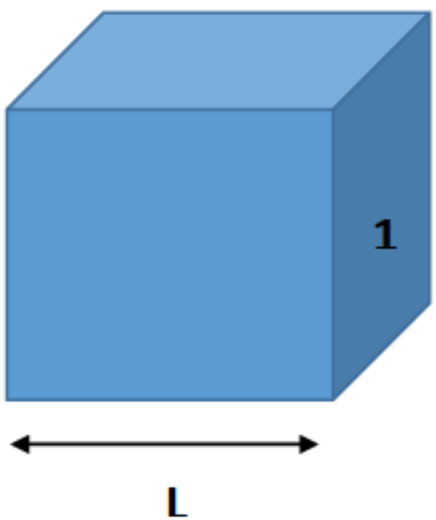
O modelo simplificado discutido a seguir (Krönig-Clausius) introduz ideias importantes.

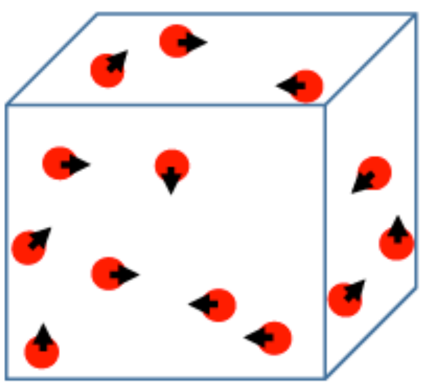
Teoria Cinética: Modelo Krönig-Clausius

– O gás está em equilíbrio (isolado mecânica e termicamente).

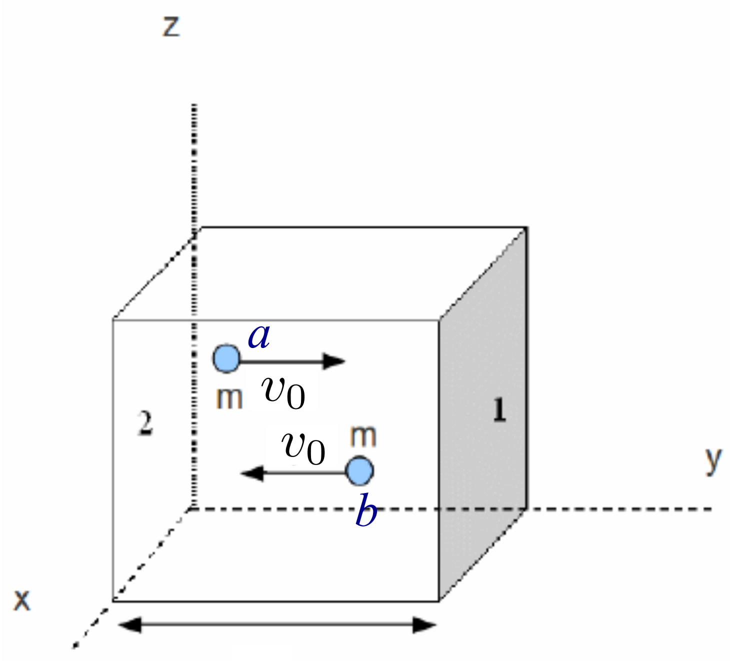
– Iremos desprezar colisões entre partículas. Há apenas colisões elásticas contra a parede.

– Vamos admitir que há $N/3$ moléculas movendo-se ao longo de cada direção cartesiana (o gás tem densidade uniforme)





– Iremos considerar um recipiente cúbico de lado L, (volume $V = L^3$), voltando a atenção a uma das paredes.



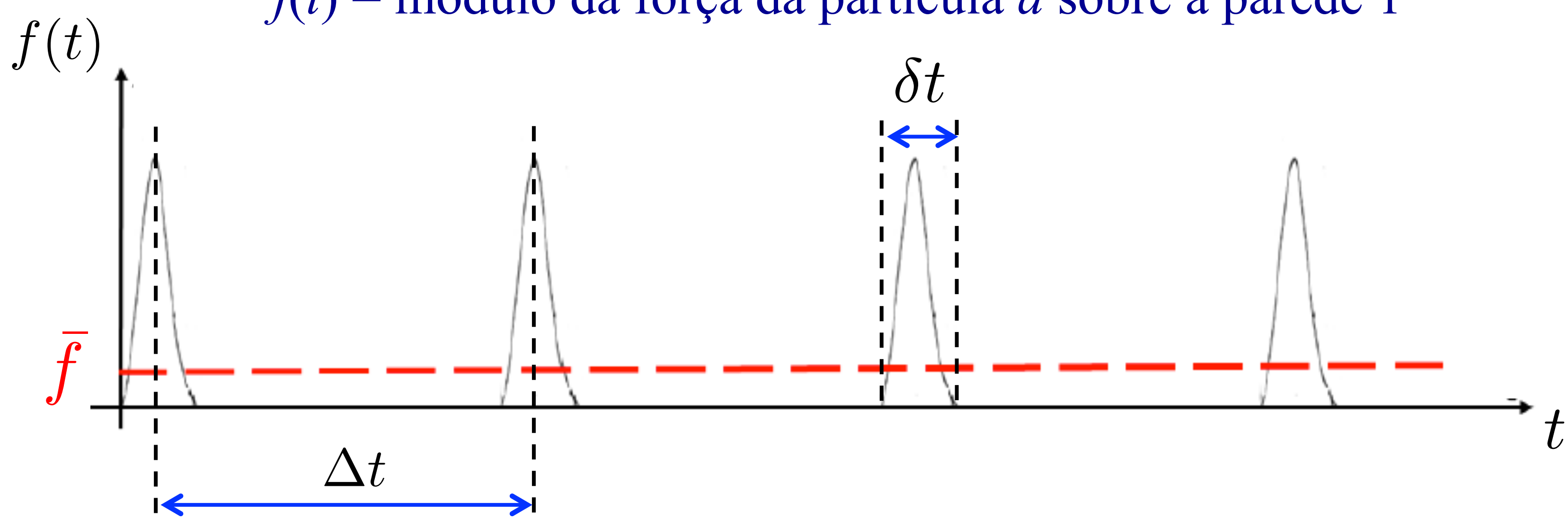
– **Escalas de tempo**:

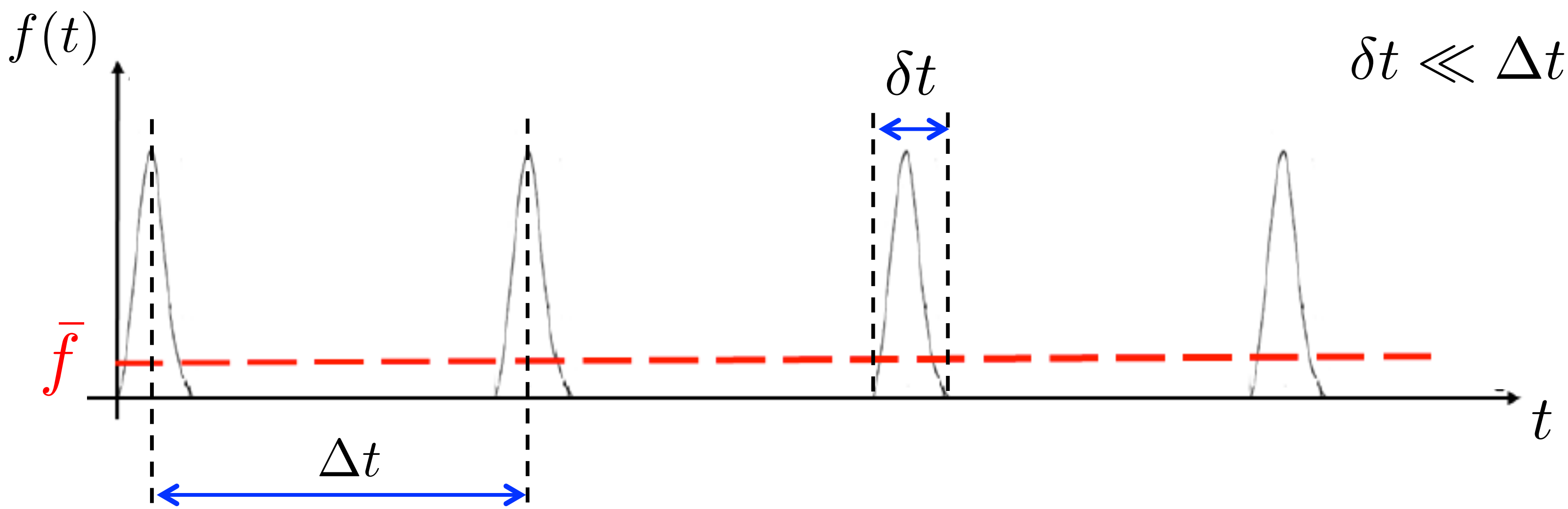
Δt = intervalo entre colisões sucessivas de uma mesma molécula contra uma mesma parede.

δt = duração de uma colisão contra a parede.

$$\delta t \ll \Delta t$$

$f(t)$ = módulo da força da partícula a sobre a parede 1





– Intervalo entre colisões sucessivas: $\Delta t = \frac{2L}{v_0}$

– Momento linear transferido à parede (Δp) em uma colisão:

$$\Delta p = -\Delta p_{\text{particula}} = -(p_f - p_i) = -[-mv_0 - (mv_0)] = 2mv_0$$

– Força média sobre a parede 1 (média temporal):

$$\langle f \rangle \equiv \bar{f} = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{mv_0^2}{L}$$

– Havendo *N*/3 partículas movendo-se na direção *x*, a pressão (força perpendicular média por unidade de área) sobre a parede 1 será:

$$P = \frac{N}{3}\frac{\langle f \rangle}{L^2} = \frac{N}{3}\frac{mv_0^2}{L^3}$$

$$\boxed{PV = N\,\left(\tfrac{1}{3}mv_0^2\right)}$$

– Admitindo que a Equação de Estado (empírica) seja válida para o modelo:

$$PV = N\,\left(\tfrac{1}{3}mv_0^2\right) = Nk_BT$$

$$\boxed{k_BT = \left(\tfrac{1}{3}mv_0^2\right) = \tfrac{2}{3}\left(\tfrac{1}{2}mv_0^2\right)}$$

– A expressão acima relaciona a temperatura à energia cinética das moléculas.