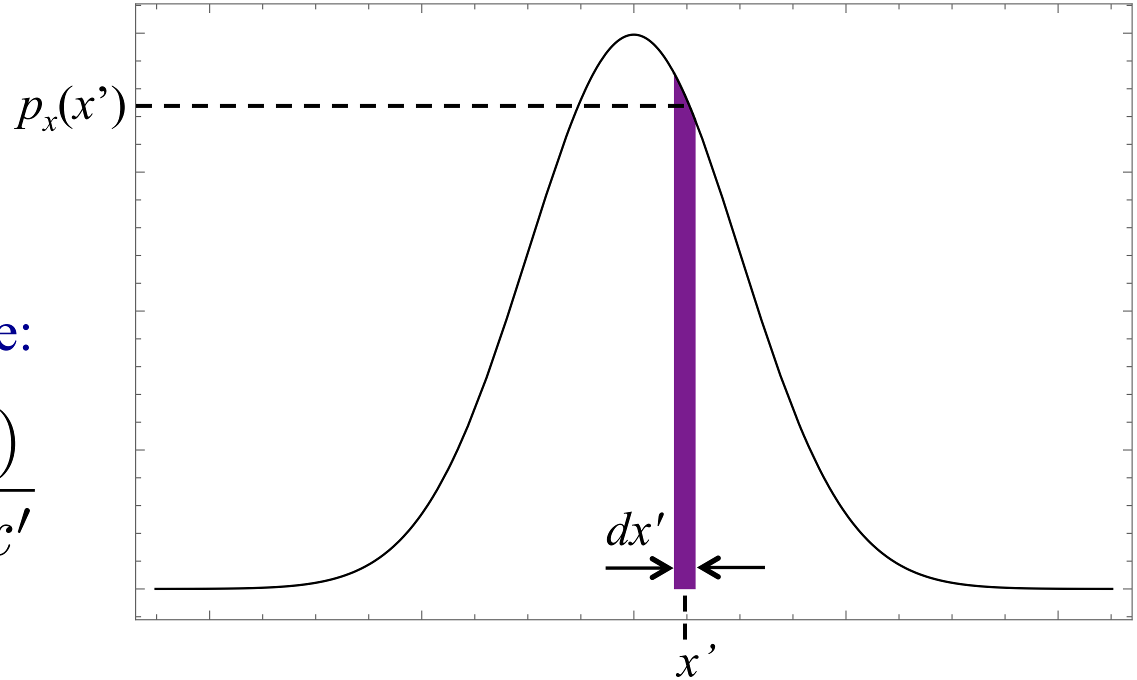
4302401 – Mecânica Estatística

Noções de Probabilidade – II



– Densidade de Probabilidade:

$$p_x(x') = \lim_{\substack{\Delta x' \to 0 \\ N \to \infty}} \frac{n(x')}{N \Delta x'}$$

– Probabilidade Cumulativa: $P_x(x') = \int_{-\infty}^{x'} p_x(x'')\, dx''$

– prob($a \leq x < b$): $\int_a^b p_x(x')\, dx' = P_x(b) - P_x(a)$

– prob($x' \leq x < x' + dx'$): $p_x(x')\, dx'$

– Valores Médios:

$$\langle x \rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x')\, x'\, dx'$$

$$\langle x^2 \rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x')\, x'^{\,2}\, dx'$$

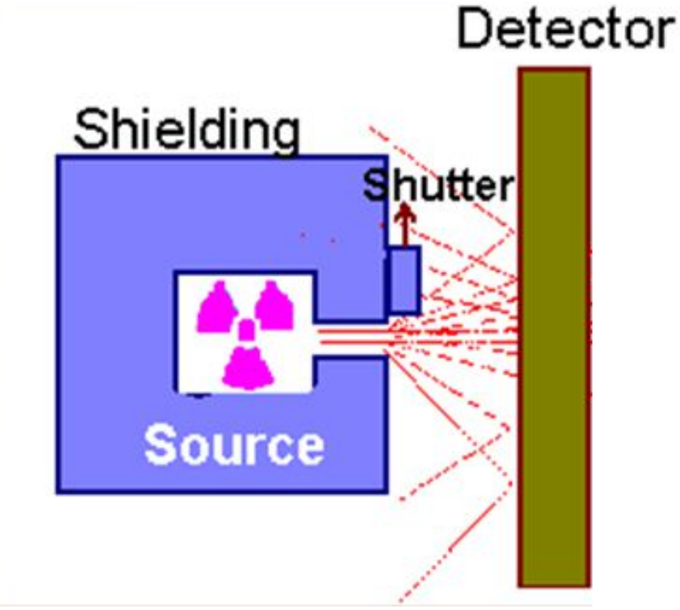
$$\langle f(x) \rangle \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} p_x(x')\, f(x')\, dx'$$

– Variância (quadrado do desvio padrão, σ):

$$\mathrm{var}(x) \;=\; \sigma^2(x) \;=\; \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

– **Exemplo**: Uma fonte contendo grande número de núcleos radioativos encontra-se no interior de uma cavidade blindada. O obturador (*shutter*) é aberto no instante $t = 0$, permitindo que fótons (radiação γ) emitidos nos eventos de decaimento sejam detectados. A densidade de probabilidade associada ao instante de detecção do primeiro evento de decaimento é:

$$p(t) = \begin{cases} \tau^{-1} e^{-t/\tau} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$



OBS: foi utilizada notação simplificada, $p_t(t') = p(t)$.

(a) Mostre que $p(t)$ é normalizada, obtenha a probabilidade cumulativa, e esboce gráficos de $p(t)$ e $P(t)$.

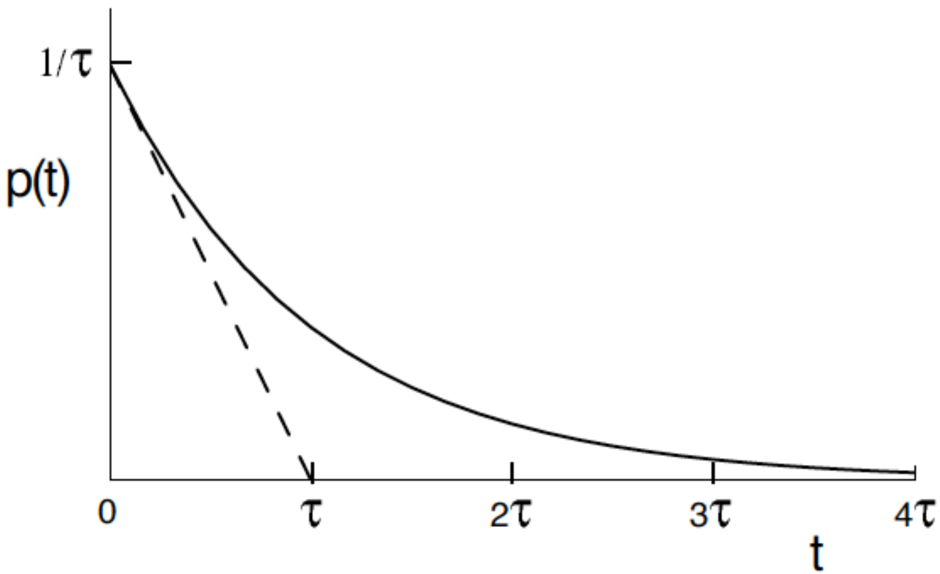
(b) Obtenha o valor esperado (médio) $< t >$ e o desvio padrão, $\sigma = [\mathrm{var}(t)]^{1/2}$.

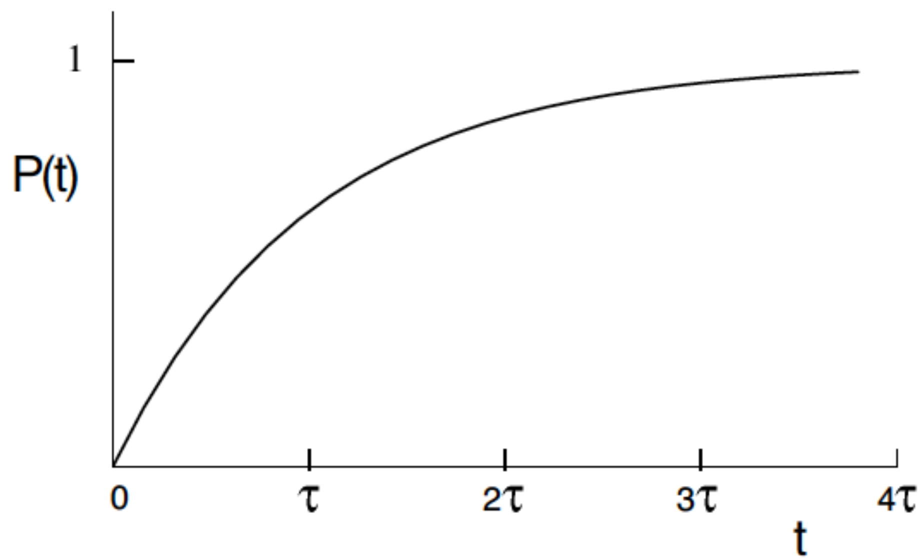
Normalização (soma das probabilidades igual a 1):

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(t)\,dt \;=\; \int_0^{\infty} e^{-t/\tau}\,\frac{dt}{\tau} = \int_0^{\infty} e^{-y}\,dy \;=\; 1$$

Função probabilidade cumulativa:

$$P(t) \;=\; \int_{-\infty}^{t} p_t(\zeta)\,d\zeta = \int_0^{t} e^{-\zeta/\tau}\,\frac{d\zeta}{\tau} = \int_0^{t/\tau} e^{-y}\,dy \;=\; 1 - e^{-t/\tau}$$





Valor médio:

$$\langle t \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p(t)\, t\, dt = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t\, e^{-t/\tau}\, dt =$$

$$= -\frac{\tau}{\tau} \left[t e^{-t/\tau} \right]_0^{\infty} + \frac{\tau}{\tau} \int_0^{\infty} e^{-t/\tau}\, dt = \tau$$

Variância e desvio padrão:

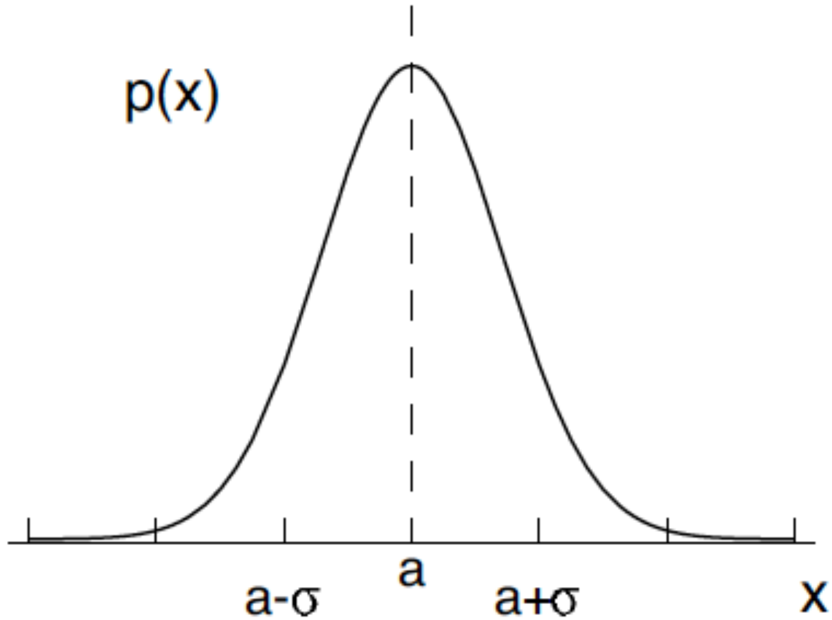
$$\langle t^2 \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} t^2\, e^{-t/\tau}\, dt = -\frac{\tau}{\tau} \left[t^2 e^{-t/\tau} \right]_0^{\infty} +$$

$$+ 2\frac{\tau}{\tau} \int_0^{\infty} t\, e^{-t/\tau}\, dt = 2\tau^2$$

$$\sigma = \sqrt{\langle t^2 \rangle - \langle t \rangle^2} = \sqrt{2\tau^2 - \tau^2} = \tau$$

– **Exemplo**: A densidade de probabilidade Gaussiana é um exemplo particularmente importante, com aplicações em várias áreas:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}]$$



(a) Mostre que $p(x)$ é normalizada. (b) Obtenha o valor médio <*x*> e o desvio padrão para a densidade gaussiana.

<u>Dica</u>:

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

(a) Normalização (mudança de variável, $u = x - a$):

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sqrt{\pi\, 2\sigma^2} = 1$$

(<u>OBS</u>: faça $\alpha = 1/(2\sigma^2)$ e utilize a identidade do enunciado.)

(b) Uma vez mais, $u = (x - a)$ e $\alpha = 1/(2\sigma^2)$:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\, p(x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} u e^{-\alpha u^2} du + a \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha u^2} du\right] = a$$

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\, p(x)\, dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (u+a)^2\, e^{-\alpha u^2} du =$$

$$= a^2 + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} u^2\, e^{-\alpha u^2} du$$

Perceba que

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2\, e^{-\alpha u^2} du = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \alpha} e^{-\alpha u^2} du = -\frac{d}{d\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha u^2} du =$$

$$= -\frac{d}{d\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

Finalmente, o desvio padrão será:

$$\sqrt{\mathrm{var}(x)} = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\left(a^2 + \frac{1}{2\alpha}\right) - a^2} = \sigma$$

– **Exemplo**: As vibrações de uma molécula diatômica podem ser descritas por um oscilador harmônico quântico, cuja energia é dada por

$$E_n = n\hbar\omega,\ n = 0,1,2,3,...$$

desde que a energia potencial seja definida de forma que a energia do estado fundamental (n = 0) seja zero. Acima, $\hbar = h/(2\pi)$ é a constante de Planck reduzida, e ω é a frequência angular do oscilador. Para um gás à temperatura T, a probabilidade de ocorrência do n-ésimo nível de energia vibracional é

$$p(n) = \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] e^{-n\beta\hbar\omega}$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$, e k_B é a constante de Boltzmann. (a) Mostre que as somas das proabilidades $p(n)$ é normalizada. (b) Calcule o valor esperado (médio) da energia para as moléculas do gás.

(a) Normalização (soma de PG infinita):

$$\sum_{n=0}^{\infty} p(n) = \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega} =$$

$$= \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \frac{1}{\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right]} = 1$$

(b) Valor médio da energia:

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} p(n) E_n = \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega}\, n\hbar\omega =$$

$$= -\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \frac{\partial}{\partial\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega} =$$

$$= -\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \frac{\partial}{\partial\beta} \frac{1}{\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right]} = \hbar\omega \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{\left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right]}$$

– Mesmo para probabilidades discretas, podemos definir funções densidade e cumulativa nos mesmos termos anteriores (utilizados para as probabilidades contínuas):

$$p_n(x) = \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \sum_{n=0}^{\infty} e^{-x\beta\hbar\omega}\, \delta(x-n)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_n(x)dx = \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x\beta\hbar\omega}\, \delta(x-n)\, dx =$$

$$= \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right] \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\hbar\omega} = 1$$

$$P_n(x) = \int_{-\infty}^{x} p_n(x')\, dx' = \left[1 - e^{-\beta\omega}\right] \sum_{n=0}^{n_{\max}} e^{-n\hbar\omega}$$

Acima, $n_{\max}$ é o maior valor de n menor ou igual a x.