



4302401 – Mecânica Estatística

Descrição Estatística

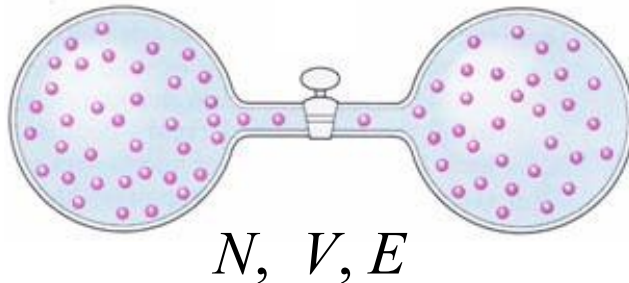
dos

Sistema Físicos

Referências: Reif, Secs. 2.1 a 2.5

Salinas, Secs. 2.1 e 2.2

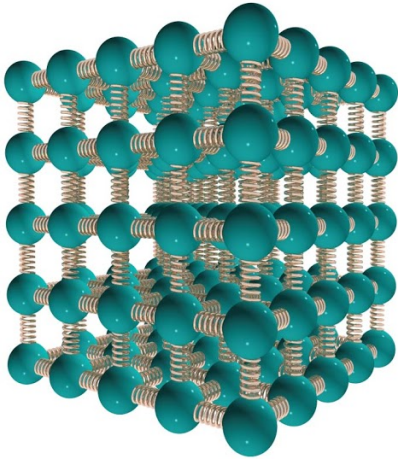
Macroestados e Microestados



N, P, T

- **Descrição Macroscópica (Macroestado):** variáveis de estado
- **Descrição Microscópica (Microestado):** conjunto de números quânticos que caracterizam estados das partículas.
- **Microestados Acessíveis:** O macroestado do sistema de interesse estabelece restrições sobre os microestados. Apenas os *microestados acessíveis* no macroestado são fisicamente aceitáveis.

– **Exemplo:** Sistema de Osciladores (Sólido de Einstein):



Modelo: A energia interna de um sólido corresponde à energia vibracional dos átomos, descritos como osciladores harmônicos quânticos tridimensionais (isotrópicos e independentes).

– Sistema de $N = 3N_{\text{átomos}}$ osciladores com frequência angular ω :

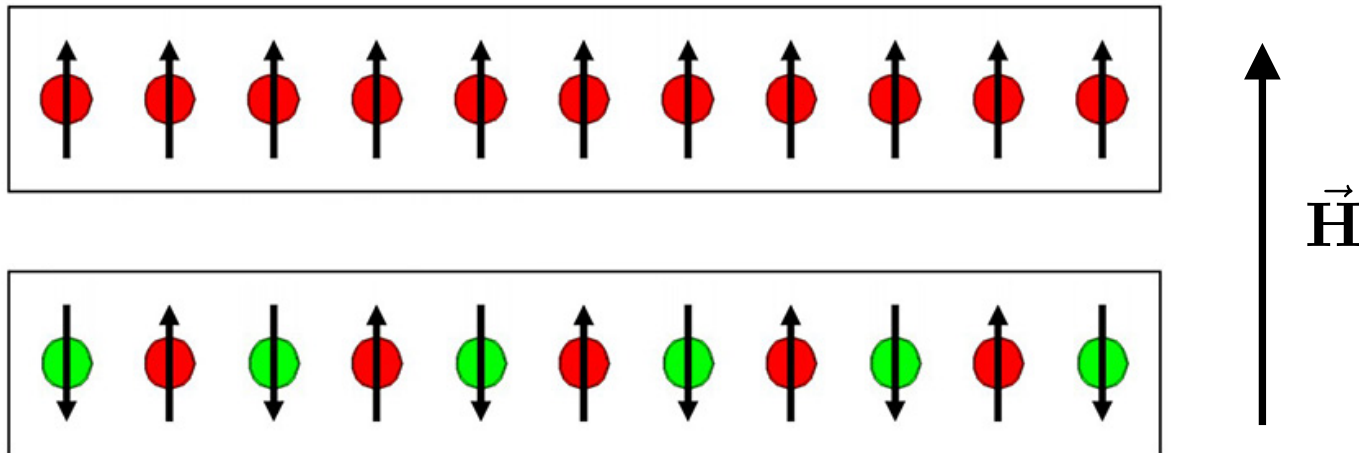
$$E = \sum_{i=1}^N \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(M + \frac{N}{2} \right)$$

$$M = \sum_{i=1}^N n_i \quad (\text{número de quanta vibracionais})$$

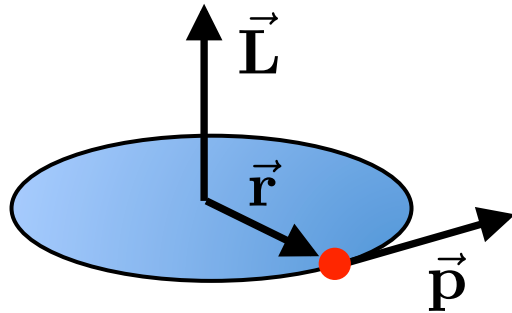
– **Número de microestados acessíveis:** O macroestado é definido pela energia interna E (número de quanta, M). O número de microestados (Ω) corresponde às maneiras distintas de distribuir M quanta entre N osciladores:

$$\Omega(E, N) = \frac{(M + N - 1)!}{M! (N - 1)!}$$

– **Exemplo:** Rede de Spins: Modelo para a magnetização em um cristal iônico isolante, no qual os sítios do cristal (rede) têm spin $\frac{1}{2}$.



– Momento magnético de spin ($s = 1/2$):



$$\vec{\mu}_{\text{cl}} = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{L}$$

momento magnético
orbital (carga clássica)

$$\vec{\mu} = -\mu_s \mathbf{S}$$

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$\mathcal{H} = -\vec{\mathbf{H}} \cdot \vec{\mathbf{S}} = H \hat{\mathbf{z}} \cdot \vec{\mathbf{S}}$$

$$= -H \mu_s \left(\pm \frac{\hbar}{2} \right) \equiv \mp H \mu_0$$

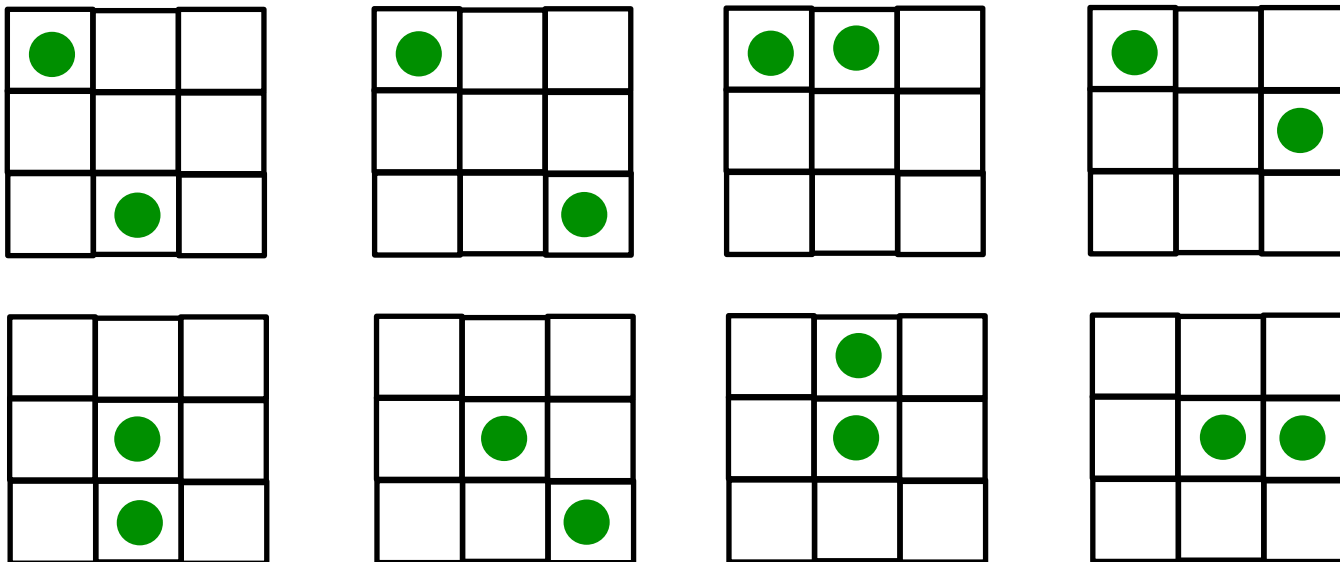
– Sistema com $N = (N_1 + N_2)$ spins, onde N_1 é o número de spins “para cima” ($+\hbar/2$) e N_2 é o número de spins “para baixo” ($-\hbar/2$):

$$E = \sum_{i=1}^N \underbrace{-\mu_0 H \sigma_i}_{\sigma_i = \pm 1} = -(N_1 - N_2) \mu_0 H$$

– **Número de microestados acessíveis:** macroestado definido pela energia E (isto é, $N_1 - N_2$) e número de sítios de spin (N):

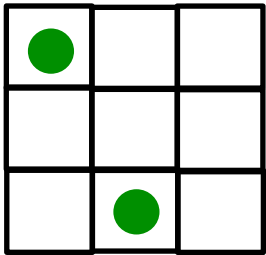
$$\Omega(E, N) = \frac{N!}{N_1! N_2!}$$

– **Exemplo:** Gás de rede não interagente. Máximo de uma partícula por célula (consistente com interação repulsiva de curto alcance). N partículas e $M > N$ células, tal que o volume do gás é $V = Mv_0$.



– **Número de microestados acessíveis:** macroestado definido pelo número de partículas (N) e densidade $\rho = N/M$:

$$\Omega(\rho, N) = \frac{M!}{N! (M - N)!}$$



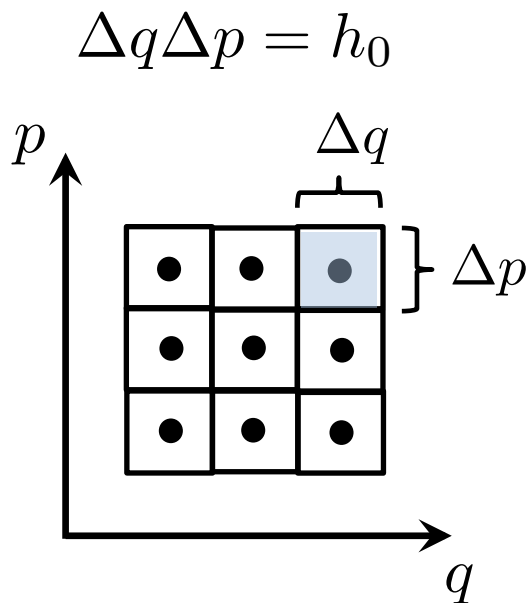
– Número de maneira distintas de acomodar N partículas em M células (máximo de 1 por célula):

$$M (M - 1) (M - 2) \cdots (M - N + 1)$$

– Redundância (partículas idênticas):

$$\begin{aligned} & \frac{M (M - 1) (M - 2) \cdots (M - N + 1)}{N!} = \\ & = \frac{M (M - 1) \cdots (M - N + 1) (M - N)!}{N! (M - N)!} = \frac{M!}{N! (M - N)!} \end{aligned}$$

– **Sistema Clássico.** Estado caracterizado pelas coordenadas canônicas das partículas (coordenadas e momentos generalizados, $(\{q_i\}, \{p_i\})$).



– A figura ilustra estados de uma partícula no espaço de fases, que em princípio pode ser discretizado em células com volume h_0 .

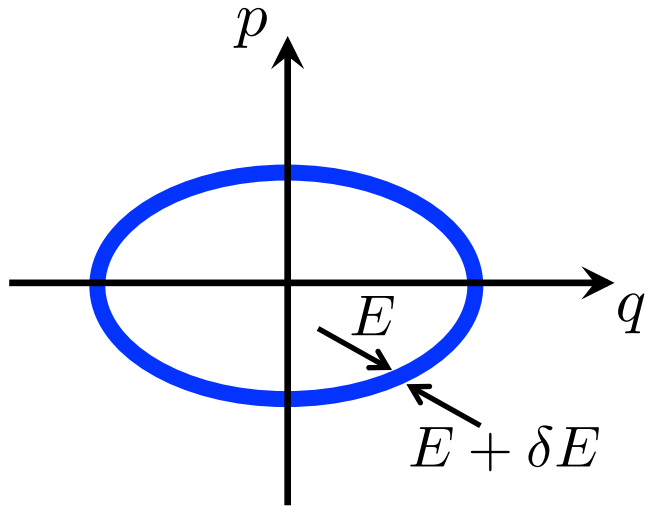
Caso o macroestado do sistema defina uma região com volume Mh_0 no espaço de fases:

$$\Omega = \frac{Mh_0}{h_0} = M$$

– É usual definir a densidade de estados $\rho(E)$, considerando distribuições contínuas. Para energia entre E e $E + \delta E$:

$$\Omega(E) = \rho(E) \delta E$$

– **Oscilador Harmônico.** Sistema formado por um oscilador harmônico clássico:



$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

$$1 = \frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

– Volume no espaço de fases correspondente a energias entre E e $E + \delta E$ (hachurado em azul):

$$\Omega(E, \delta E) = \frac{2\pi}{\omega h_0} \delta E$$

$$\rho(E) = \frac{2\pi}{\omega h_0}$$

(A rigor Ω é proporcional ao volume no espaço de fases, $\mathcal{V}=(2\pi/\omega)\delta E$, justificando a constante arbitrária h_0 . Como toda a física está em \mathcal{V} , não é incomum deixar de lado a constante arbitrária. Voltaremos ao tema na discussão sobre a entropia de sistemas clássicos.)