UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – DFIS
MECÂNICA ESTATÍSTICA – OMEE001

Aluno(a): Rodrigo Nascimento

Professor(a): Dr. César Lattes **Capítulo(s) Ref.:** I/II/III

Lista de Exercícios: 001 **Data:** 08/02/2023 **Fase:** LEF102-09U

AVALIAÇÃO – III

Resumo: Lorem ipsum dolor sit amet, qui minim labore adipisicing minim sint cillum sint consectetur cupidatat[1]

Palavras chave: Ensemble Grande Canônico; Gás Ideal Quântico; Formulação do Problema Estatístico e Estatísticas de Bose-Einstein e Fermi-Dirac; Aplicações.

Sumário

Problema 1. Para o ensemble grande canônico

a) Derive a função de partição.

b) Obtenha a conexão com termodinâmica.

Solução 1. No ensemble grande canônico, o sistema S é posto em contato com um ambiente de temperatura e número de partículas fixos, de forma que S pode trocar energia e partículas com este ambiente, mantendo sempre o volume fixo. Os microestados acessíveis ao sistema com esta restrição, será denotado por j, de maneira que os valores médios de energia U e número de partículas N é simplesmente a probabilidade P_j de ocorrência destes estados

$$N = \sum_j N_j P_j, \tag{1}$$

$$U = \sum_j E_j P_j \tag{2}$$

Na representação do grande potencial termodinâmico $\Phi = U - TS - \mu N$, com a entropia na forma dada por Shannon $S = -k_B \sum_j P_j \ln P_j$, a interpretação microscópica do grande potencial termodinâmico, será a soma sobre todos os microestados do grande ensemble canônico

$$\Phi = \sum_j \left(E_j + k_B T \ln P_j - \mu N_j\right) P_j \tag{3}$$

É necessário encontrar qual a distribuição de probabilidades que minimiza o grande pontencial termodinâmico. Constuíndo uma função de lagrange para Φ e impondo a condição de que P_j seja normalizável

$$\mathcal{L} = \Phi + \lambda \left[\sum_j P_j - 1\right], \quad \text{desde que } \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = 0$$

e

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P_j} = E_j + k_B T \left(1 + \ln P_j\right) - \mu N_j + \lambda = 0 \tag{4}$$

Resolvendo pra P_j

$$\begin{aligned} \ln P_j &= -1 - \lambda\beta - \beta\left(E_j - \mu N_j\right) \\ P_j &= \mathrm{e}^{-1-\lambda\beta} \exp\left[-\beta\left(E_j - \mu N_j\right)\right] \end{aligned} \tag{5}$$

Da condição de normalização imposta decorre diretamente que

$$\sum_J P_j = 1 \Longrightarrow \mathrm{e}^{-1-\lambda\beta} = \frac{1}{\sum_j \exp\left[-\beta\left(E_j - \mu N_j\right)\right]} \tag{6}$$

escolhendo a constante de normalização convenientemente como sendo $1/\Xi$ obtemos

$$P_j = \frac{1}{\Xi} \exp\left[-\beta\left(E_j - \mu N_j\right)\right] \tag{7}$$

onde a função de partição do ensemble grande canônico é dada por

$$\boxed{\Xi = \sum_j \exp\left[-\beta\left(E_j - \mu N_j\right)\right]} \tag{8}$$

Para fazer a conexão com a termodinâmica, vamos reescrever a (8) fatorizando o termo relacionado ao número de partículas

$$\Xi = \sum_N \mathrm{e}^{\beta\mu N} \sum_{j_n} \mathrm{e}^{-\beta E_{j_n}} \tag{9}$$

mas

$$\sum_{j_n} \mathrm{e}^{-\beta E_{j_n}} = Z_j \tag{10}$$

em que Z_j é a função de partição canônica de maneira que

$$\Xi = \sum_N \mathrm{e}^{\beta\mu N} Z_N \tag{11}$$

Introduzindo o termo Z_N na exponêncial e substituindo o somatório pelo seu termo máximo, encontramos

$$\Xi = \sum_N \exp\left[\beta\mu N + \ln Z_N\right] \sim \exp\left[-\beta \min_N\left(-k_B T \ln Z - \mu N\right)\right] \tag{12}$$

identificamos a energia livre de Helmholtz $F = -k_B T \ln Z$ e notando que

$$\begin{aligned} F - \mu N &= U - TS - \mu N \\ F - \mu N &= \Phi \end{aligned} \tag{13}$$

isto é

$$\Xi \longrightarrow \mathrm{e}^{-\beta\Phi} \tag{14}$$

e para um fluído puro

$$\Phi = \Phi(T, V, \mu) \to -\frac{1}{\beta} \ln \Xi(T, V, \mu) \tag{15}$$

a conexão com a termodinâmica se da por

$$\boxed{\phi(T, \mu) = -\frac{1}{\beta} \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \ln \Xi(T, V, \mu)} \tag{16}$$

Referências

1 SALINAS, S. R. A. **Introdução à Física Estatística**. [S.l.]: EDUSP, 2005. (Grad. Texts Contemp. Phys.). ISSN 0938-037X. ISBN 9788531403866. Citado na página 1.