



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:** 07/02/2023

**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 01** . . . . . **1**

**REFERÊNCIAS** . . . . . **3**

**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

$$N = \sum_j N_j P_j, \quad (1)$$

$$U = \sum_j E_j P_j \quad (2)$$

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

$$\Phi = \sum_j (E_j + k_B T \ln P_j - \mu N_j) P_j \quad (3)$$

É necessário encontrar qual a distribuição de probabilidades que minimiza o grande pontencial termodinâmico. Construindo uma função de lagrange para  $\Phi$  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

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

Resolvendo pra  $P_j$

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

Da condição de normalização imposta decorre diretamente que

$$\sum_j P_j = 1 \implies e^{-1-\lambda\beta} = \frac{1}{\sum_j \exp [-\beta (E_j - \mu N_j)]} \quad (6)$$

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

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

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

$$\Xi = \sum_j \exp [-\beta (E_j - \mu N_j)] \quad (8)$$

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

$$\Xi = \sum_N e^{\beta \mu N} \sum_{j_n} e^{-\beta E_{j_n}} \quad (9)$$

mas

$$\sum_{j_n} e^{-\beta E_{j_n}} = Z_j \quad (10)$$

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

$$\Xi = \sum_N e^{\beta \mu N} Z_N \quad (11)$$

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

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

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

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

isto é

$$\Xi \longrightarrow e^{-\beta \Phi} \quad (14)$$

e para um fluido puro

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

a conexão com a termodinâmica se da por

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

# 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.