FÍSICA ESTATÍSTICA (É UMA FESTA!)

→ Abordagem da Física Estatística

Em tudo semelhante à abordagem dos jogos de azar (exemplo: dados)

i) especificar o estado do ~~sis~~ sistema;

ii) noção de conjunto estatístico (ensemble);

iii) postulado básico sobre probabilidades;

iv) calcular probabilidades.

Exemplo: dois dados

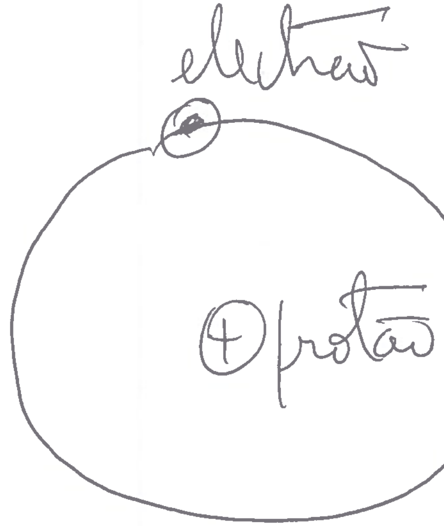
$$P(2) = \frac{\Omega_2}{\Omega_{total}} = \frac{1}{36}$$

$$P(7) = \frac{\Omega_7}{\Omega_{total}} = \frac{6}{36} = \frac{1}{6}$$

→ Especificar o estado do sistema

número de graus de liberdade f: número mínimo de coordenadas que descrevem a configuração do sistema no espaço (descrição clássica); ou número mínimo de números que descrevem o estado do sistema (descrição quântica).

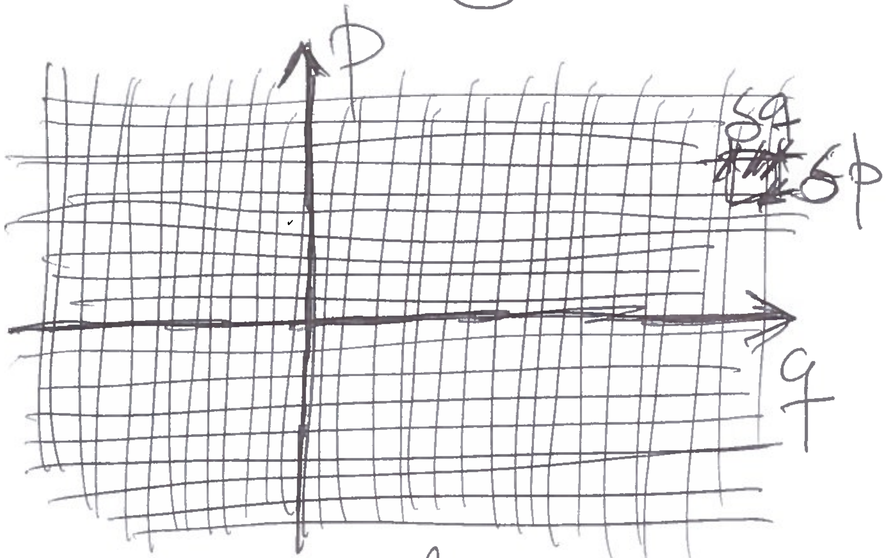
3 coordenadas



3 n.^{os} quânticos (n, l, m)
mais spin

A natureza quântica da matéria implica um conjunto discreto (i.e. contável) de estados. Como fazê-lo no caso clássico?

Para um grau de liberdade



espaço de fases

$\delta q \, \delta p = h_0$ $\left(\approx \hbar \quad \frac{\text{de Planck}}{2\pi}\right)$

O estado fica especificado dizendo que a coordenada está entre q e $q+\delta q$ e o momento conjugado entre p e $p+\delta p$.

f graus de liberdade clássicos $\Longrightarrow$ espaço de fases a $2f$ dimensões, dividido em micro-células ("caixinhas") de "volume":

$$\delta q_1 \cdots \delta q_f \, \delta p_1 \cdots \delta p_f = h_0^f$$

→ Conjunto estatístico

Com $f \approx 10^{23}$, é impossível sequer imaginar resolver o respectivo sistema mecânico (e.g., trajectórias clássicas) com todo o rigor (quanto mais não seja, há incertezas na medição/prescrição das condições iniciais). Assim sendo, logo desde o início do problema há que adoptar uma abordagem estatística (probabilística): em vez de nos concentrarmos na descrição detalhada de um único sistema, procuraremos uma descrição estatística num conjunto de sistemas semelhantes (imaginando que são todos "preparados" da mesma maneira, mas que vão evoluir de forma independente uns dos outros). Como quando se joga aos dados, ou se atira uma moeda ao ar.

→ Hipótese sobre probabilidades

A probabilidade de encontrar um sistema isolado e em equilíbrio em qualquer um dos seus estados acessíveis é igual para todos eles, ou seja, é uniforme. Acessíveis refere-se àqueles estados que são consistentes com a informação que temos sobre o sistema (e.g., energia, volume ...).

Esta hipótese, denominada de hipótese de equiprobabilidade a priori, é altamente plausível e "democrática", em tudo semelhante à hipótese que fazemos quando jogamos aos dados ou atiramos moedas ao ar (não viciados(as)).
Como qualquer postulado, este não é demonstrável, mas pode ser verificado a posteriori, comparando as previsões teóricas nele baseadas com os resultados / leis experimentais.

Contudo, há alguns teoremas que apontam no sentido deste postulado de equiprobabilidade.

Teorema de Liouville

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)$$

com $\rho(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f, t)\, dq_1 \dots dq_f\, dp_1 \dots dp_f$ o número de sistemas no conjunto estatístico que, no instante t, têm coordenadas e momentos generalizados (σ) no elemento de volume $dq_1 \dots dq_f\, dp_1 \dots dp_f$ do espaço de fases compreendido entre q_1 e $q_1 + dq_1, \dots, q_f$ e $q_f + dq_f$, p_1 e $p_1 + dp_1, \dots, p_f$ e $p_f + dp_f$, ou seja, $\rho(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f, t)$ é a densidade de estados.

Um sistema isolado corresponde a especificar a energia do sistema E, obviamente uma constante do movimento:

$$\rho(q_1,\ldots,q_f,p_1,\ldots p_f,t) \equiv \rho(E)$$

Então,

$$\frac{\partial \rho}{\partial q_i} = \frac{\partial \rho}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial q_i} = 0 \quad e \quad \frac{\partial \rho}{\partial p_i} = \frac{\partial \rho}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial p_i} = 0$$

pois $E(q_1,\ldots,q_f,p_1,\ldots,p_f) \equiv E = cte.$

e o teorema de Liouville implica

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Em particular, o resultado anterior mostra que uma distribuição uniforme (i.e., ρ = cte.) para um sistema isolado (i.e., E = cte.) é consistente com uma situação de equilíbrio (i.e., $\partial\rho/\partial t = 0$). Mostra que é uma distribuição de equilíbrio, mas não que é a distribuição de equilíbrio.

O facto de, em equilíbrio, um sistema se distribuir uniformemente pelos seus estados acessíveis é também uma consequência do chamado teorema H (do âmbito da teoria cinética), que demonstraremos no final deste curso. Uma discussão semelhante pode ser feita no âmbito da Mecânica Quântica usando a matriz de densidade em vez da densidade de sistemas no espaço de fases.

→ Cálculo de probabilidades

$\Omega(E)$: nº de estados com energia E (do sistema isolado)

$\Omega(E; Y_k)$: nº de estados com energia E para os quais

$$Y = Y_k$$

$$P(Y_k) = \frac{\Omega(E; Y_k)}{\Omega(E)}$$

probabilidades

$$\overline{Y} = \frac{\sum_k Y_k \Omega(E; Y_k)}{\Omega(E)}$$

valores médios

Exemplo: 3 spins (momentos magnéticos) num campo $\vec{H}$

$$\mathcal{E} = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} \uparrow \vec{H} \quad \uparrow \vec{\mu} \ ; & \varepsilon_+ = -\mu H \\ \uparrow \vec{H} \quad \downarrow \vec{\mu} \ ; & \varepsilon_- = +\mu H \end{cases}$$

Estados possíveis:

1	+ + +	$E = -3\mu H$
2	+ + −	$E = -\mu H$
3	+ − +	
4	− + +	
5	+ − −	$E = +\mu H$
6	− + −	
7	− − +	
8	− − −	$E = +3\mu H$

Sistema isolado com $E = -\mu H$

$$\Omega(E) = 3$$

$$P_+ = \frac{2}{3}$$

↳ probabilidade de um spin estar paralelo a $\vec{H}$