

Modelos em Física

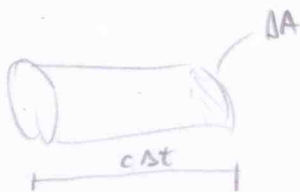
→ Texto de Borges:
 dizendo que um mapa de cidade foi feito com tanta complexidade que ele acabou sendo inútil não

→ Modelo de Krönig - Clausius
 suposição: moléculas de um gás não oscilam. Elas se movem em linha reta, com velocidade constante

→ Cubo de lado L e $V = L^3$

• N partículas de massa m e velocidade $c = cte$, distribuídas em 6 feixes de partículas

• # partículas que atingem a superfície de área ΔA durante o intervalo de tempo Δt :



$\frac{1}{6} \frac{N}{V} c \cdot \Delta t \Delta A = \#$ Moléculas que colidem em ΔA

• Choque elástico com a superfície

• Transferência de momento: $2mc$

• [Força total] = $\left[\frac{1}{6} \frac{N}{V} (c\Delta t) \Delta A \right] 2mc \frac{1}{\Delta t}$

$F = \frac{\Delta p}{\Delta t}$

• Pressão: Força / Área

$P = \frac{1}{6} \frac{N}{V} 2mc^2$

∴ Este modelo me permite determinar a pressão de um gás de partículas

• Comparar com a lei de Boyle dos gases ideais $PV = nRT = Nk_B T$

⇒ $k_B T = \frac{1}{3} mc^2$ ⇒ $\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T$

∴ Relação direta entre Energia Cinética e Temperatura

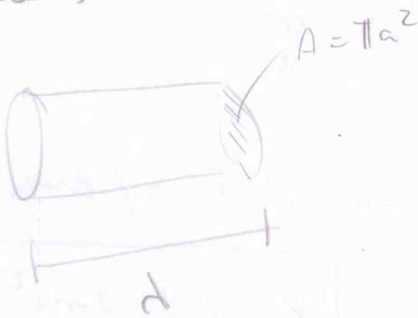
Este é o movimento que chamamos de "Calor"

Objecções desse Modelo: esse modelo prevê velocidades da ordem de 500 m/s o que é menor que a velocidade do som. Isso implicaria difusão muito rápida, em discordância com as evidências experimentais

→ Hoise-x etc introduz
mais detalhes ao modelo

→ Proposta de Clausius:

"Deve haver um lance
contínuo médio entre
colisões"



$$d \cdot (\pi a^2) \frac{N}{V} = 1$$

pois nesse
cilindro
deve haver
apenas 1
molécula

d: lance contínuo médio entre
de uma colisão

$$d = \frac{1}{\pi a^2 \frac{N}{V}} = \frac{1}{\pi a^2 \rho}$$

→ Distribuição de Maxwell

Consideração: c^2 deve
ser interpretada como
uma velocidade média

Mes, deve haver uma distribuição
de velocidades

Não é possível que todas as
moléculas tenham a
mesma velocidade.

Considerações:

- Colisões elásticas entre
partículas esféricas
- Conservação de momento e
da Energia cinética
- histograma da distribuição
das velocidades de N partículas

$$N \cdot f(v_x) dv_x = \# \text{ partículas com } v_x \text{ entre } v_x \text{ e } v_x + dv_x$$

$\{f(v_x); v_x\}$: distribuição de
velocidades
(Grande ideia de
Maxwell)

o O valor de v_x não
depende dos valores
de v_y e v_z (tres componentes
independentes)

$$\therefore N f(v_x) f(v_y) f(v_z) dv_x dv_y dv_z =$$

= # de partículas com uma
velocidade entre
 \vec{v} e $\vec{v} + d\vec{v}$

onde $\vec{v} = v_x \hat{i} + v_y \hat{j} + v_z \hat{k}$

• Mas as direções são arbitrárias
Então:

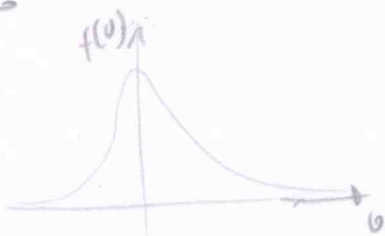
$$f(v_x) f(v_y) f(v_z) = \Phi(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

A solução dessa equação é
de forma exponencial:

$$f(v_i) = C e^{-A v_i^2}$$

$$\Rightarrow \Phi = C e^{-A \vec{v}^2}$$

∴ Para velocidades grandes,
o termo $f(v_i)$ vai a
zero



→ Constantes são obtidas pela
normalização

→ base e^{-ax^2} isso precisa saber

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Jouilli usava essa integral
para como teste. Se o cara
sabia essa integral o estudante
poderia (ou não) trabalhar com ele.

Integral mais famosa em
Física Estatística e
Teoria de Campos

→ Sobre Distribuição Maxwell

→ Quando fizemos a revisão de termodinâmica vimos o modelo de König-Dassius para análise microscópica de um gás.

→ Neste modelo supõe-se que

- Partículas do gás não oscilam
- Todas elas se movem em linha retilínea, com velocidade constante v

→ Na ocasião consideramos que

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

∴ Relacionamos energia cinética com a temperatura

→ No entanto este modelo encontrou algumas dificuldades para explicar alguns experimentos

Um exemplo, este modelo prevê que as moléculas de um gás devem ter velocidades da ordem de:

$$500 \text{ m/s}$$

o que é muito próximo a própria velocidade do som em um meio fluido !!!

Esta velocidade "absurda" implicaria numa ~~alta~~ difusão muito rápida em discordância com as evidências experimentais

→ Se este modelo estivesse correto perceberíamos o cheiro de um perfume imediatamente após a abertura de um frasco a quilômetros de distância

→ Maxwell estas pensou
que esta velocidade nel
deve ter a mesma para
todos os atores, mas
si — o valor medio
E portanto, a ~~velocidade~~
que a presente me
distribuição de velocidades.

→ Distribuição de Maxwell

Vamos partir este estudo, da mesma forma que partimos os outros estudos deste curso; A partir de um Fato experimental:

A pressão decai exponencialmente com a altura

Lei de Helmholtz

$$P(z) = P_0 e^{-\lambda z}$$

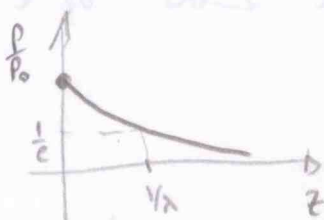
com $\lambda = \frac{P_0 \cdot g}{P_0}$

z : altura

P_0 : pressão em $z=0$

P_0 : densidade do ar

g : gravidade



→ Moléculas:

Vamos considerar um gás ideal (arrecia de Colson)

$$PV = Nk_B T$$

M : massa de gás num volume V

ρ : densidade do gás

m : massa de uma única partícula (molécula) que constitui o gás

$$M = N \cdot m$$

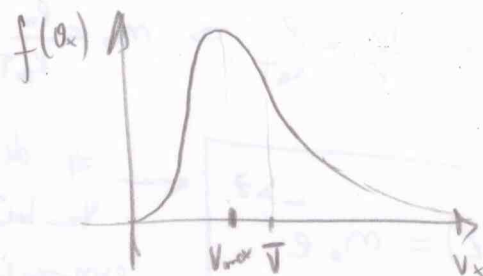
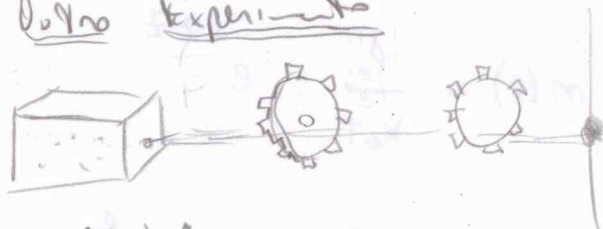
$$\rho = \frac{M}{V} \Rightarrow \rho = \frac{N \cdot m}{V}$$

$$\frac{\rho}{m} = \frac{N}{V}$$

Da lei dos gases ideais:

$$\frac{\rho}{k_B T} = \frac{N}{V} = \frac{P}{m} \Rightarrow \frac{\rho}{P} = \frac{m}{k_B T}$$

→ Outro Experimento



Considera

$m(z)$: # de moléculas por unidade de volume à altura "z"

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{N}{V} \cdot m$$

$$\Rightarrow \rho(z) = m(z) \cdot m$$

- Comparando com a lei experimental

$$P(z) = P_0 e^{-\lambda z}$$

- e com $\frac{P}{\rho} = \frac{m}{k_B T}$

→ Chegamos a

$$\frac{\rho(z)}{P(z)} = \frac{m(z) \cdot m}{P_0 e^{-\lambda z}} = \frac{m}{k_B T}$$

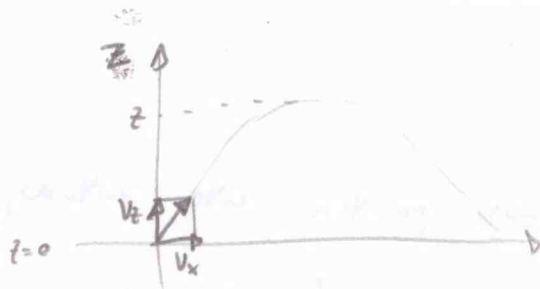
$$m(z) = \frac{P_0}{k_B T} e^{-\lambda z}$$

Como $\frac{N}{V} = \frac{P}{k_B T} \Rightarrow m_0 = \frac{P_0}{k_B T}$

$$m(z) = m_0 e^{-\lambda z}$$

de partículas. Também cai exponencialmente a altitude

→ Considerações na direção \hat{z}



Note-se que apenas as partículas que possuem uma componente \hat{z} da velocidade maior que " v_z " atingem a altitude "z"

• A redução do número de moléculas com a altitude (pela fórmula experimental $m(z) = m_0 e^{-\lambda z}$) é uma consequência do fato de somente moléculas suficientemente rápidas atingem a altitude considerada.

→ Considera:

$$f(v_z) dv_z$$

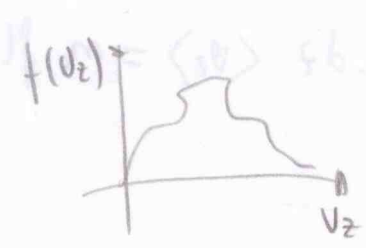
a freq. de moléculas com velocidade entre v_z e $v_z + dv_z$

Se sabemos apenas de
determinamos \Rightarrow para

$$\{f(v_z), v_z\}$$

temos uma "distribuição
de velocidades", análogo
à "Distribuição de Probabilidades"

Assim podemos construir
o gráfico de distribuição



é de esta forma = $f(v_z)$
nos dá a "probabilidade"
de encontrarmos uma
partícula com velocidade v_z

\rightarrow Vamos até tentar
determinar $f(v_z)$
com a condição de
normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(v_z) dv_z = 1$$

\rightarrow Vamos considerar que
moléculas se movem
para cima

$$\therefore v_z \in [0, \infty[$$

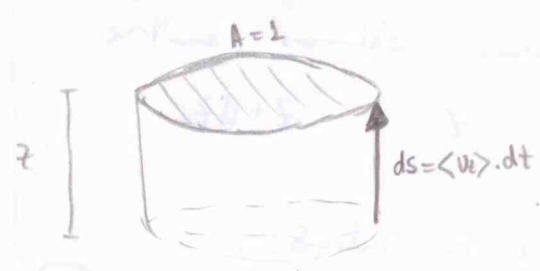
o que nos permite

$$\int_0^{\infty} f(v_z) dv_z = 1$$

$$\langle v_z \rangle = \int_0^{\infty} f(v_z) \cdot v_z dv_z$$

Valor esperado da
velocidade das partículas
na direção " \hat{z} "

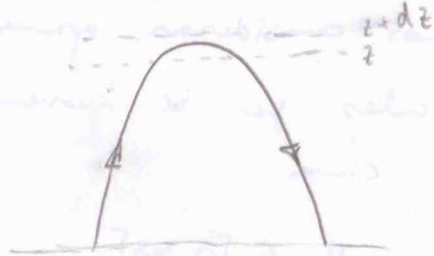
\rightarrow Considere a figura



$m(z) \cdot \langle v_z \rangle$: # médio de moléculas
por tempo, se atravessa
a área, à altura z

$$\text{pois: } N = \frac{N}{V} \cdot V = \left(\frac{N}{V}\right) \cdot \langle v_z \rangle \cdot dt = m \cdot \langle v_z \rangle dt$$

\therefore # med. por tempo fixo: $m \langle v_z \rangle$
partículas



→ Por Yonicki: $0^2 = v_z^2 - 2gz$

→ Multiplicando os dois lados por "m" (Energia): $\frac{1}{2} m v_z^2 = mgz$

→ Diferenciando:

$$\frac{1}{2} m \cdot 2 v_z dv_z = mg dz$$

$$\therefore mg dz = m v_z dv_z \quad \text{eq. 1}$$

Esta relação vale para as moléculas que atingem alturas máximas entre z e $z+dz$

→ Considere a relação:

$$[m(z) - m(z+dz)] \langle v_z \rangle = m(0) f(v_z) v_z dv_z \quad \text{eq. 2}$$

Média de Moléculas contido no cilindro de altura $|z - (z+dz)|$

de partículas que saem de $z=0$ com velocidade entre v_z e v_z+dv_z

(*)

→ No limite $dz \rightarrow 0$:

$$\frac{dm(z)}{dz} = \lim_{dz \rightarrow 0} \frac{m(z+dz) - m(z)}{dz}$$

ou também

$$m(z+dz) - m(z) = \frac{dm}{dz} \cdot dz$$

→ se eq. 1 for:

$$-\frac{dm}{dz} \cdot dz \cdot \langle v_z \rangle = m_0 \int (v_z) v_z dv_z$$

Mas:

$$dz = \frac{v_z dv_z}{g} \Rightarrow \frac{dv_z}{dz} = \frac{g}{v_z}$$

$$-\frac{dm}{dz} \langle v_z \rangle = m_0 g f(v_z) \quad \text{eq. 3}$$

então se

$$m(z) = m_0 e^{-\frac{mgz}{k_B T}}$$

diferenciando

$$\frac{dm(z)}{dz} = -\frac{mg}{k_B T} m(0) e^{-\frac{mgz}{k_B T}} \quad \text{eq. 4}$$

je-terdo o resultado ☺ com Δ

$$\frac{mg}{k_B T} m_0 e^{-\frac{mgz}{k_B T}} \cdot \langle v_z \rangle = m_0 \int_0^\infty f(v_z) dz$$

∞∞ $mgz = \frac{1}{2} m v_z^2$

$$f(v_z) = \frac{m \langle v_z \rangle}{k_B T} e^{-\frac{1}{2} \frac{m v_z^2}{k_B T}}$$

→ Agora da Normalização

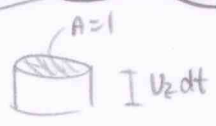
$$\int_0^\infty f(v_z) dv_z = 1 \text{ pedras}$$

obtem $\langle v_z \rangle = \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi}}$

e portanto chegamos à distribuição

$$f(v_z) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m v_z^2}{k_B T}}$$

(*) obs.:



$$N = n \cdot \frac{V}{V} = (n_0 \cdot f(v_z) dv_z) \frac{(1 \cdot v_z \cdot dt)}{V}$$

$$= \frac{n_0}{V} f(v_z) v_z dv_z dt$$

$$= n_0 f(v_z) v_z dv_z dt$$

→ Generalizar para as demais componentes de \vec{v}

Em 3 dimensões obtemos

$$f(\vec{v}) = \left[\frac{m}{2\pi k_B T} \right]^{3/2} e^{-\frac{m \vec{v}^2}{2k_B T}}$$

$$\vec{v}^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

$$\vec{v} = v_x \hat{i} + v_y \hat{j} + v_z \hat{k}$$

Cas de Boltzmann

Distribuição de Maxwell

Vários autores usam ideias da Mec. Estatística e tentam recuperar os resultados da distribuição de Maxwell.

Boltzmann propôs o seguinte modelo para a descrição de um gás

→ Considere N_j partículas com energia E_j

$$N = \sum_j N_j \quad E = \sum_j E_j N_j$$

→ O # de microestados desse sistema será:

$$\Omega(N_j | E, N) = \frac{N!}{N_1! N_2! N_3! \dots}$$

→ Todos verificam que o valor de Ω varia mediante as diferentes configurações de $\{N_j\}$

Por exemplo, p/ E_1 assumindo apenas dois valores (E_1 e E_2)

teremos $N = N_1 + N_2$. Suponha $N = 5$

$$\left. \begin{array}{l} N_1 = 3 \\ N_2 = 2 \end{array} \right\} \Rightarrow \Omega = \frac{5!}{3! 2!} = 10$$

$$\left. \begin{array}{l} N_1 = 4 \\ N_2 = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \Omega = \frac{5!}{4! 1!} = 5$$

∴ Ω fica diferente frente a diferentes valores de $\{N_j\}$

Como assumimos que todos os estados são equiprováveis, esperamos que no equilíbrio, o estado microscópico do gás seja uma correspondente àquelas estados microscópicos com maior número de Ω .

Por esta forma é bastante conveniente encontrarmos o valor máximo de Ω em relação ao conjunto $\{N_i\}$ respeitantes os vínculos

$$\begin{cases} N = \sum_i N_i = \text{cte} \\ E = \sum_i N_i \epsilon_i = \text{cte} \end{cases}$$

→ Além disso, note que o máximo de Ω também será o máximo da função $\log \Omega$. ($\max[\Omega] = \max[\log \Omega]$)
 isto leva à maior facilidade algébrica, vamos maximizar $\log \Omega$. (com \log podemos utilizar Stirling e assim - eliminar os fatoriais!)

→ Maximizar uma função sujeita a vínculos é possível utilizando os multiplicadores de Lagrange.

$$f(\{N_i\}, d_1, d_2) = \log \Omega(\{N_i\} | E, N) + d_1 [N - \sum_i N_i] + d_2 [E - \sum_i \epsilon_i N_i]$$

preciso encontrar $\vec{\nabla} f = 0$ (pto de Máximo)

$$\Omega = \frac{N!}{\prod_i (N_i!)} \Rightarrow \log \Omega = \log N! - \sum_i \log(N_i!)$$

usando Stirling ($N \gg 1$):
 $(\log N! \approx N \log N - N)$

$$\log \Omega = N \log N - N - \sum_i [N_i \log N_i - N_i]$$

$$\therefore f = N \log N - N - \sum_i [N_i \log N_i - N_i] + \lambda_1 [N - \sum_i N_i] + \lambda_2 [E - \sum_i E_i N_i]$$

$$\frac{\partial f}{\partial N_k} = - \frac{\partial}{\partial N_k} [N_k \log N_k - N_k] - \lambda_1 - \lambda_2 E_k = 0$$

$$- \log N_k - \frac{N_k}{N_k} + 1 - \lambda_1 - \lambda_2 E_k = 0$$

$$\log N_k = -\lambda_1 - \lambda_2 E_k \Rightarrow$$

$$N_k = e^{-\lambda_1} \cdot e^{-\lambda_2 E_k}$$

Note-se que posso eliminar λ_1 usando a seguinte ideia:

$$\sum_k N_k = N \Rightarrow N = e^{-\lambda_1} \cdot \sum_k e^{-\lambda_2 E_k}$$

$$\therefore e^{-\lambda_1} = \frac{N}{\sum_k e^{\lambda_2 E_k}}$$

$$\therefore N_k = N \frac{e^{-\lambda_2 E_k}}{\sum_i e^{\lambda_2 E_i}}$$

$$\frac{N_k}{N} = \frac{e^{-\lambda_2 E_k}}{Z_1}$$

definindo a Normalização:

$$Z_1 \equiv \sum_i e^{\lambda_2 E_i}$$

$\frac{N_k}{N}$: pode ser interpretado como a probabilidade de ocupação do nível de energia " E_k "

→ Determinando λ_z

Podemos determinar λ_z no caso particular de um gás ideal.

Nesse caso, sabemos que a energia interna desse gás será:

$$E = \frac{3}{2} N K_B T$$

$$\Leftrightarrow E = \sum_{k=1}^N E_k N_k = \frac{3}{2} N K_B T$$

$$\sum_{k=1}^N E_k N \frac{e^{-\lambda_z E_k}}{Z_1} = \frac{3}{2} N K_B T$$

Derivando:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_z} \sum e^{-\lambda_z E_k} = - \sum E_k e^{-\lambda_z E_k}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=1}^N \frac{(-1)}{Z_1} \frac{\partial}{\partial \lambda_z} e^{-\lambda_z E_k} = \frac{3}{2} K_B T$$

$$-\frac{1}{Z_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \lambda_z} \left(\sum_k e^{-\lambda_z E_k} \right) = \frac{3}{2} K_B T$$

$\underbrace{\sum_k e^{-\lambda_z E_k}}_{= Z_1}$

$$\Leftrightarrow - \frac{\partial}{\partial \lambda_z} \log Z_1 = \frac{3}{2} K_B T \quad (\text{eq. M})$$

No limite contínuo, a energia do gás ideal será

$$E_k \rightarrow \frac{1}{2} m \vec{v}^2$$

(Obs.: em um gás ideal, como não há colisões, a energia é distribuída cinética)

$$\text{Logo } Z_1 = \sum_{\vec{v}} e^{-\lambda_z E_k}$$

Neste limite, a soma torna-se uma integral:

$$Z_1 \rightarrow \int d^3 \vec{v} e^{-\lambda_z \frac{m \vec{v}^2}{2}}$$

$$\text{onde } d^3 \vec{v} = dv_x dv_y dv_z$$

Pelo princípio da independência do movimento de cada grau de liberdade (uma para cada direção)

$$Z_1 = \left[\int dv_x e^{-\lambda_z \frac{m v_x^2}{2}} \right] \left[\int dv_y e^{-\lambda_z \frac{m v_y^2}{2}} \right] \left[\int dv_z e^{-\lambda_z \frac{m v_z^2}{2}} \right]$$

Logo

$$\int e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

temos que

$$\int dv_x e^{-\lambda_z \frac{m}{2} v_x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_z m}}$$

\therefore No limite contínuo
fazemos $g \rightarrow$:

$$Z_1 \rightarrow \left(\frac{2\pi}{d_2 m} \right)^{\frac{3}{2}}$$

\rightarrow Vamos então voltar à
eq. M para determinar
o parâmetro λ_2

$$\frac{\partial}{\partial d_2} \log \left[\left(\frac{2\pi}{d_2 m} \right)^{\frac{3}{2}} \right] = \frac{3}{d_2} k_B T$$

$$\frac{\partial}{\partial d_2} \left[\log(2\pi) - \log(d_2 m) \right] = \frac{3}{d_2} k_B T$$

$$\frac{1}{d_2 m} \cdot m = k_B T$$

$$\therefore d_2 = \frac{1}{k_B T}$$

\rightarrow Fazemos então $g \rightarrow$

$$\frac{N_k}{N} = \frac{e^{-\frac{\epsilon_k}{k_B T}}}{Z_1}$$

$$Z_1 = \sum_k e^{-\frac{\epsilon_k}{k_B T}} \Rightarrow Z_1 = \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{\frac{3}{2}}$$

\rightarrow Note ainda que neste limite
recuperamos a distribuição de
Maxwell:

$$\frac{N_k}{N} \rightarrow P(\vec{v}) d\vec{v}$$

$$E_k = \frac{m\vec{v}^2}{2}$$

$$\therefore P(\vec{v}) = \frac{e^{-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T}}}{\left(\frac{2\pi}{m} k_B T \right)^{\frac{3}{2}}}$$

$$P(\vec{v}) = \left(\frac{2\pi k_B T}{m} \right)^{-\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T}}$$

\rightarrow obs.: O gás de Boltzmann
representa uma tentativa
pioneira, anterior ao trabalho
de Planck, de introduzir um
modelo com níveis discretos
de Energia

\rightarrow No entanto, a discretização da
energia de um gás de partículas
somente pode ser feita de
maneira correta no contexto
da Mec. Quântica.

→ Caso particular do Gás de Boltzmann:

Sistema de 2 Níveis de Energia

→ Considere um sistema de " N " partículas com apenas dois estados possíveis de Energia

$$E_i = 0$$

$$E_i = \varepsilon$$

Vamos então:

$$\left\{ \begin{array}{l} N_1: \# \text{ partículas com } E_i = 0 \\ N_2: \# \text{ " " " } E_i = \varepsilon \\ N = N_1 + N_2 \end{array} \right.$$

→ Número de estados Microscópicos acessíveis: $\Omega = \frac{N!}{N_1! N_2!}$

→ Energia total: $E = N_1 \cdot 0 + N_2 \cdot \varepsilon$

$$\boxed{E = N_2 \cdot \varepsilon}$$

→ N_1 e N_2 podem ser escritos em termos de Energia:

$$\boxed{N_2 = \frac{E}{\varepsilon}}$$

$$N = N_1 + \frac{E}{\varepsilon}$$

$$\boxed{N_1 = N - \frac{E}{\varepsilon}}$$

$$\rightarrow \therefore \boxed{\Omega(E, N) = \frac{N!}{\left(N - \frac{E}{\varepsilon}\right)! \left(\frac{E}{\varepsilon}\right)!}}$$

→ Calculo de entropia por particula

$$S = k_B \log \Omega$$

$$D(u) = \lim_{\substack{N, E \rightarrow \infty \\ u = \frac{E}{N} \text{ fixo}}} \frac{S}{N}$$

$$\Omega(E, N) = \frac{N!}{(N - \frac{E}{\epsilon})! (\frac{E}{\epsilon})!}$$

$$\log \Omega = \log N! - \log \left[(N - \frac{E}{\epsilon})! \right] - \log \left(\frac{E}{\epsilon} \right)!$$

Usando Stirling
 $\log N! \approx N \log N - N$
 p/ $N \rightarrow \infty$

$$\log \Omega \approx N \log N - N - \left[(N - \frac{E}{\epsilon}) \log (N - \frac{E}{\epsilon}) - (N - \frac{E}{\epsilon}) \right] - \left[\frac{E}{\epsilon} \log \frac{E}{\epsilon} - \frac{E}{\epsilon} \right]$$

$$\log \Omega = N \log N - N - N \log (N - \frac{E}{\epsilon}) + \frac{E}{\epsilon} \log (N - \frac{E}{\epsilon}) + N - \frac{E}{\epsilon} - \frac{E}{\epsilon} \log \frac{E}{\epsilon} + \frac{E}{\epsilon}$$

$$\log \Omega = N \log N - N \log \left[N \left(1 - \frac{E}{N \epsilon} \right) \right] + \frac{E}{\epsilon} \log \left[N \left(1 - \frac{E}{N \epsilon} \right) \right] - \frac{E}{\epsilon} \log \left(\frac{E}{\epsilon} \frac{N}{N} \right)$$

Introduzindo $u = \frac{E}{N}$

$$\frac{\log \Omega}{N} = \log N - \log N - \log \left(1 - \frac{u}{\epsilon} \right) + \frac{u}{\epsilon} \log N + \frac{u}{\epsilon} \log \left(1 - \frac{u}{\epsilon} \right) - \frac{u}{\epsilon} \log \left(\frac{u}{\epsilon} \right) + \frac{u}{\epsilon} \log \left(\frac{u}{\epsilon} \right)$$

$$D(u) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ E \rightarrow \infty \\ u \text{ fixo}}} k_B \cdot \frac{1}{N} \log \Omega$$

$$D(u) = k_B \left[\log \left(1 - \frac{u}{\epsilon} \right) + \frac{u}{\epsilon} \log \left(1 - \frac{u}{\epsilon} \right) - \frac{u}{\epsilon} \log \left(\frac{u}{\epsilon} \right) + \mathcal{O}(\log N, \log E) \right]$$

$$\therefore D(u) = -k_B \left(1 - \frac{u}{\epsilon} \right) \log \left(1 - \frac{u}{\epsilon} \right) - k_B \frac{u}{\epsilon} \log \left(\frac{u}{\epsilon} \right)$$

→ Vamos então determinar a energia por partícula

Eq. Estado : $\left(\frac{\partial D}{\partial M} \right)_T = \frac{1}{T}$

$$D(M) = \frac{K_B}{\epsilon} \left[-\epsilon \log_2 \left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right) + M \log_2 \left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right) - M \log_2 \left(\frac{M}{\epsilon} \right) \right]$$

$$\frac{\partial D}{\partial M} = \frac{K_B}{\epsilon} \cdot \left[-\frac{\epsilon}{\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} \left(-\frac{1}{\epsilon} \right) + \log_2 \left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right) + M \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} \left(-\frac{1}{\epsilon} \right) - \log_2 \left(\frac{M}{\epsilon} \right) - M \cdot \frac{1}{\left(\frac{M}{\epsilon} \right)} \left(\frac{1}{\epsilon} \right) \right]$$

$$= \frac{K_B}{\epsilon} \left[\frac{1}{\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} + \log_2 \left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right) - \frac{M}{\epsilon} \frac{1}{\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} - \log_2 \left(\frac{M}{\epsilon} \right) - 1 \right]$$

obs: $\frac{1}{\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} - \frac{M}{\epsilon} \frac{1}{\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} = \frac{\epsilon - M}{\epsilon \left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right)} = \frac{\epsilon - M}{\epsilon - M} = 1$

$$\therefore \frac{\partial D}{\partial M} = \frac{K_B}{\epsilon} \left[\log_2 \left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right) - \log_2 \left(\frac{M}{\epsilon} \right) \right] = \frac{1}{T}$$

$$\log_2 \left[\frac{1 - \frac{M}{\epsilon}}{M/\epsilon} \right] = \frac{\epsilon}{K_B T} \quad \beta = \frac{1}{K_B T}$$

$$\left(1 - \frac{M}{\epsilon} \right) \frac{\epsilon}{M} = e^{\beta \epsilon}$$

$$\frac{\epsilon}{M} - 1 = e^{\beta \epsilon}$$

$$\frac{\epsilon}{M} = e^{\beta \epsilon} + 1$$

$$M = \frac{\epsilon}{e^{\beta \epsilon} + 1} = \frac{\epsilon}{e^{\beta \epsilon} (1 + e^{-\beta \epsilon})}$$

$$\therefore M = \frac{\epsilon e^{-\beta \epsilon}}{1 + e^{-\beta \epsilon}}$$

4

$$\mu = \frac{\epsilon e^{-\beta \epsilon}}{1 + e^{-\beta \epsilon}}$$

→ Para altas temperaturas ($T \rightarrow \infty$)

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \rightarrow 0$$

$$\therefore e^{-\beta \epsilon} \rightarrow 1$$

$$\mu(T \rightarrow \infty) \approx \frac{\epsilon \cdot 1}{1 + 1}$$

$$\boxed{\mu(T \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\epsilon}{2}}$$

→ Para bajas temperaturas ($T \rightarrow 0$)

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \rightarrow \infty$$

$$e^{-\beta \epsilon} = \frac{1}{e^{\beta \epsilon}} \rightarrow 0$$

$$\therefore \mu(T \rightarrow 0) \approx \frac{\epsilon \cdot 0}{1 + 0} = \frac{0}{1} = 0$$

$$\boxed{\mu(T \rightarrow 0) \rightarrow 0}$$

→ A Função Gamma

A função Gamma é definida por

$$\Gamma(m+1) = \int_0^{\infty} x^m e^{-x} dx$$

Propriedade 1:

$$\Gamma(1) = 1$$

Prova:

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} x^0 e^{-x} dx$$

$$\begin{aligned} u &= -x \\ du &= -dx \end{aligned}$$

$$= - \int_0^{-\infty} e^u du$$

$$= - \left. e^u \right|_0^{-\infty}$$

$$= - \left(\frac{1}{e^{\infty}} - e^0 \right)$$

$$= 1$$

Propriedade 2:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

Prova:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}-1} e^{-x} dx$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} x^{-\frac{1}{2}} e^{-x} dx$$

??

Propriedade 3

$$\Gamma(m) = (m-1) \Gamma(m-1)$$

Prova:

$$\Gamma(m) = \int_0^{\infty} x^{m-1} e^{-x} dx$$

por partes:

$$\int_0^{\infty} u dv = u \cdot v - \int_0^{\infty} v du$$

$$u = x^{m-1}$$

$$du = (m-1) \cdot x^{m-2} \cdot dx$$

$$dv = e^{-x} dx$$

$$z = -x \\ dz = -dx$$

$$v = \int e^{-x} dx = \int e^z (-dz) = -e^z$$

$$v = -e^{-x}$$

$$\therefore \Gamma(m) = -x^{m-1} \cdot e^{-x} \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} (-1) e^{-x} (m-1) x^{m-2} dx$$

$$\Gamma(m) = -x^{m-1} \Big|_0^{\infty} - 0 \Big|_0^{\infty} + (m-1) \cdot \int_0^{\infty} x^{m-2} e^{-x} dx$$

$\Gamma(m-1)$

$$\therefore \Gamma(m) = (m-1) \cdot \Gamma(m-1)$$

Propriedade 4:

Se m é um número positivo inteiro, então

$$\Gamma(m+1) = m!$$

Prova

$$\Gamma(m+1) = (m \cdot \Gamma(m))$$

$$= (m \cdot (m-1) \cdot \Gamma(m-1))$$

$$= m \cdot (m-1) \cdot (m-2) \cdot \Gamma(m-2)$$

...

m inteiros positivos

$$\Gamma(m+1) = m(m-1)(m-2)(m-3) \dots \Gamma(1) = 1$$

$$\therefore \Gamma(m+1) = m!$$

Exemplo: $m=5$

$$\Gamma(5) = 4 \cdot \Gamma(4)$$

$$= 4 \cdot 3 \cdot \Gamma(3)$$

$$= 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot \Gamma(2)$$

$$= 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 \cdot \Gamma(1) = 1$$

$$\therefore \Gamma(5) = 4!$$

→ Volume de uma
Hipersfera

Considere " $V_d(R)$ " o

Volume de uma hipersfera
de raio " R " e com
dimensão " d "

→ No caso $d=1$, este
"volume" nada mais é
do que o comprimento
(no caso de uma barra)

→ No caso $d=2$, este
"volume" nada mais é
do que a área
(no caso, é um disco)

→ No caso $d=3$, $V_d(R)$
é o volume usual, do
qual estamos acostumados

→ Nesse sentido podemos entender
por "volume" como o produto
dos valores de suas
"dimensões"

$A = x_1 \quad V = x_1 x_2 x_3$
 $A = x_1 x_2 \quad V_d = x_1 x_2 x_3 \dots x_d$

$d=1$

$$V_1(R) = \int_{-R}^R dx$$

← soma de
todos os
elementos " dx "

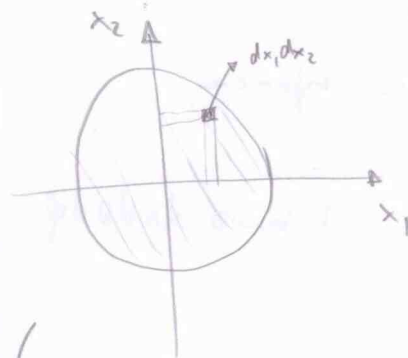


$$V_1(R) = 2R$$

← é no caso
é o comprimento
da "barra"

$d=2$

$$V_2(R) = \iint_{0 \leq x_1^2 + x_2^2 \leq R^2} dx_1 dx_2$$



→ Noq. ge:
 $x_1^2 + x_2^2 \leq R^2$

Deu isso: $dx_1 dx_2 = R d\theta dr$

coord.
cartesianas

coord.
polares

$$\therefore V_2(R) = \int_0^R \int_0^{2\pi} r dr d\theta$$

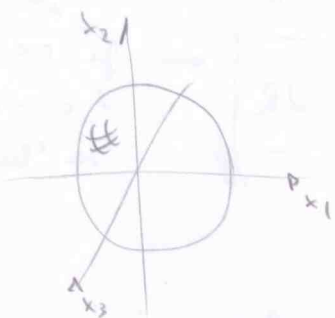
$$= \frac{\pi^2}{2} \Big|_0^R \cdot \theta \Big|_0^{2\pi} = \frac{R^2}{2} \cdot 2\pi$$

$$V_2(R) = \pi R^2$$

↑ que é a área
do círculo

$d=3$

$$V_3(R) = \iiint_{0 \leq x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 dx_3$$



Note-se: $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R^2$

Em coordenadas esféricas

$$dx_1 dx_2 dx_3 = R \sin \theta dr d\theta d\phi$$

$$V_3(R) = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_0^R R^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

$$V_3(R) = \frac{\pi R^3}{3} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$= \frac{R^3}{3} (-\cos \theta) \Big|_0^{\pi} \cdot 2\pi$$

$$= \frac{2}{3} \pi R^3 (-1 - 1)$$

$$V_3(R) = \frac{4}{3} \pi R^3$$

que é o volume da esfera \mathbb{R}^3

Resumindo estes três resultados

d	$V_d(R)$
1	$2R$
2	πR^2
3	$\frac{4}{3} \pi R^3$

Podemos concluir que

$$V_d(R) \propto R^d$$

ou melhor

$$V_d(R) = A_d R^d$$

onde A_d é uma constante

que depende somente da dimensão "d"

→ Precisamos determinar A_d ,

o que será feito logo a

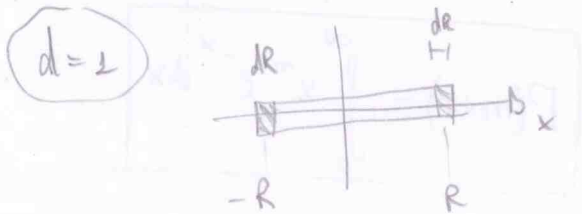
diante, mas valendo de

feito genérico que:

$$V_d(R) = \int \dots \int_{0 \leq \sum_{i=1}^d x_i^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 \dots dx_d$$

→ Volume de uma hipercone

Vamos definir por hipercone as extremidades de uma hipersfera e se esta tem dimensão imediatamente inferior. Por exemplo:



diferenciando

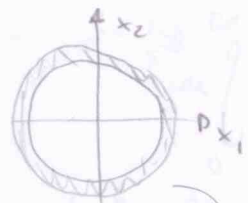
$V_1(R) = 2R$

$SV_1(R) = 2SR$

Área de parte hachurada

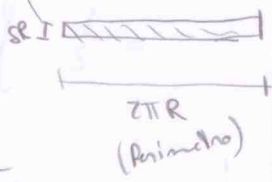
$SV_1(R)$: é a área da hipercone no espaço $d=1$

$d=2$



$V_2(R) = \pi R^2$

$SV_2(R) = 2\pi R SR$

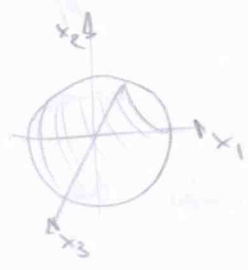


$SV_2(R)$: é o perímetro do círculo multiplicado pelo espessura SR (ou seja, a área de cone)

$d=3$ $V_3(R) = \frac{4}{3}\pi R^3$

$SV_3(R) = \frac{4}{3}\pi 3R^2 SR$

$SV_3(R) = 4\pi R^2 SR$



$SV_3(R)$: é a área da superfície esférica multiplicada pela espessura SR

ou seja $SV_3(R)$ é o volume ($d=3$) da hipercone.

→ No caso geral temos:

$V_d(R) = A_d R^d$

$SV_d(R) = d \cdot A_d \cdot R^{d-1} \cdot SR$

definindo $S_d \equiv d \cdot A_d \cdot R^{d-1}$

$SV_d(R) = S_d \cdot SR$

Valor da hipercone "Área" da "superfície" de uma hipersfera de d dimensões (Área de círculo com o círculo externo) "Espessura" da hipersfera

9

Possamos também escrever $SV_d(R)$

na forma

$$SV_d(R) = C_d \cdot R^{d-1} \cdot SR$$

onde $C_d \equiv d \cdot A_d$ é uma

constante que só depende da dimensão "d"

→ Precisamos agora, determinar C_d

Note que

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \right]^d = \left[\sqrt{\frac{\pi}{a}} \right]^d$$

mesmo para $a=1$

$$\therefore \int \dots \int e^{-ax_1^2 - ax_2^2 - ax_3^2 \dots - ax_d^2} dx_1 dx_2 \dots dx_d = \left(\frac{\pi}{a} \right)^{\frac{d}{2}}$$

Logo:

- $R^2 = \sum_{i=1}^d x_i^2$
- $SV_d(R) = dx_1 dx_2 \dots dx_d$

temos:

$$\int_0^{\infty} e^{-aR^2} \cdot C_d R^{d-1} \cdot SR = \left(\frac{\pi}{a} \right)^{\frac{d}{2}}$$

Como $a=1$

$$C_d \int_0^{\infty} R^{d-1} e^{-R^2} SR = \pi^{\frac{d}{2}}$$

Lembrando de função gama

$$\Gamma(m+1) = \int_0^{\infty} x^m e^{-x} dx$$

$$\therefore \int_0^{\infty} R^{d-1} e^{-R^2} SR \equiv I$$

$$u = +R^2 \Rightarrow R = \sqrt{u}$$

$$du = +2R dR$$

$$I = \int_0^{\infty} u^{\frac{d-1}{2}} e^{-u} \frac{du}{2\sqrt{u}}$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} u^{\frac{d-1}{2} - \frac{1}{2}} e^{-u} du$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} u^{\frac{d-1}{2}} e^{-u} du$$

$$I = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)$$

∴

$$C_d \cdot \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) = \pi^{\frac{d}{2}}$$

$$C_d = \frac{2 \pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}$$

Assim podemos calcular

$$A_d = \frac{C_d}{d}$$

$$A_d = \frac{2 \cdot \pi^{\frac{d}{2}}}{d \cdot \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}$$

de modo que o volume da hipersfera seja

$$V_d(R) = A_d \cdot R^d$$

e o volume da hipercorona seja

$$SV_d(R) = C_d \cdot R^{d-1} \cdot SR$$

→ Vamos analisar os casos particulares

$d=2$

$$A_2 = \frac{2 \pi^{\frac{2}{2}}}{2 \cdot \Gamma\left(\frac{2}{2}\right)}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\therefore A_2 = 2 \quad \text{OK} \quad \checkmark \checkmark$$

$$\hookrightarrow V_2(R) = 2R$$

$$C_2 = d \cdot A_2$$

$$C_2 = 2 \cdot 2 = 4$$

$$\hookrightarrow SV_2(R) = 2 \cdot SR \quad \text{OK}$$

$d=3$

$$A_3 = \frac{2 \cdot \pi^{\frac{3}{2}}}{3 \cdot \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} = 2\pi$$

$$\therefore V_3(R) = 2\pi R^3$$

$$C_3 = 3 \cdot A_3 = 6\pi$$

$$SV_3(R) = 6\pi R^2 \cdot R$$

$d=3$

$$A_3 = \frac{2 \pi^{\frac{3}{2}}}{3 \cdot \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}$$

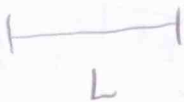
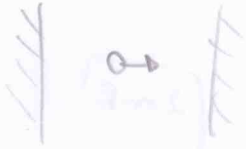
$$\dots \Gamma(n+1) = n \cdot \Gamma(n)$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{2}{2}\right) = \frac{1}{2} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$$

$$\therefore A_3 = \frac{2\pi^{\frac{3}{2}}}{3 \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi}} = \frac{4}{3} \pi$$

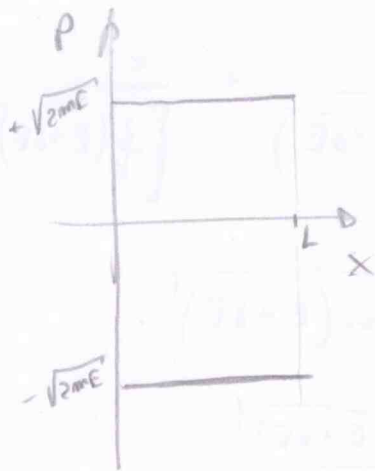
$$\therefore V_3 = \frac{4}{3} \pi R^3$$

→ Partícula livre de massa "m" em uma dimensão, com energia E



$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \pm \sqrt{2mE}$$

Espazo de fase:



→ Suponha por conveniência que a energia flutue entre E e E + δE

onde $\delta E \ll E$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

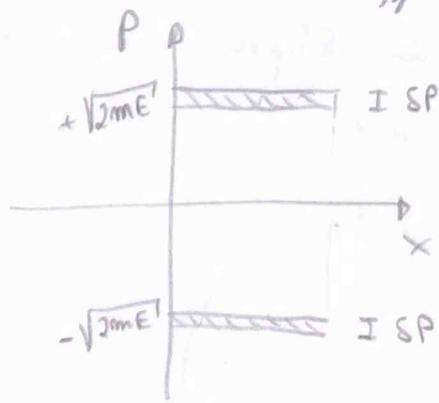
$$\delta E = \frac{2p \delta p}{2m}$$

$$\delta E = \frac{1}{m} \sqrt{2mE} \delta p$$

$$\delta p = \frac{m \delta E}{\sqrt{2mE}}$$

$$\delta p = \sqrt{\frac{m^2}{2mE}} \delta E$$

$$\delta p = \sqrt{\frac{m}{2E}} \delta E$$



→ O número de estados acessíveis será numericamente idêntico a uma hochurada

$$\Omega(E, L, \delta E) = 2 \cdot L \delta p$$

$$\Omega(E, L, \delta E) = 2L \sqrt{\frac{m}{2E}} \delta E$$

2

→ Considere agora um oscilador clássico com energia entre E e $E + \delta E$

$$Z_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

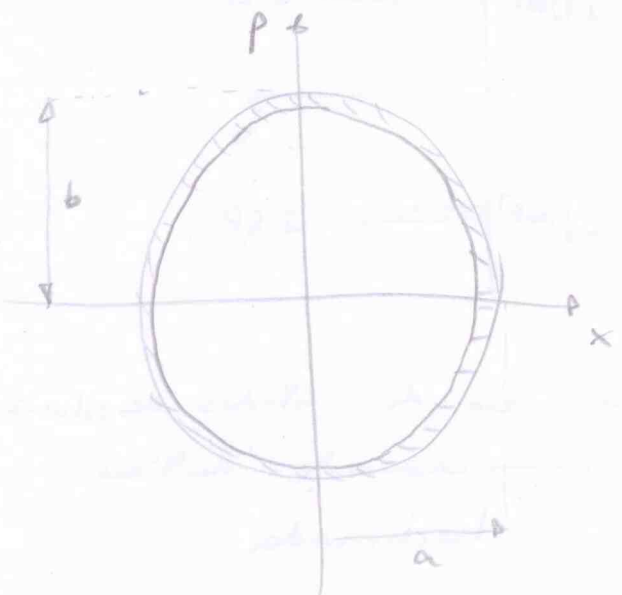
(Hamiltoniano do Oscilador Harmônico)

k = cte de mola

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\left(\frac{2E}{k}\right)} = 1$$

Eq. da Elipse



Área de uma elipse:

$$A = \pi a b$$

P/E

Note-se

$$b = \sqrt{2mE}$$

$$a = \sqrt{\frac{2E}{k}}$$

$$A_1 = \pi \sqrt{\frac{2E}{k}} \cdot \sqrt{2mE}$$

$$A_2 = \pi \sqrt{\frac{4mE^2}{k}} = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}}$$

$P/E + \delta E$

$$\frac{p^2}{2m(E + \delta E)} + \frac{x^2}{\left[\frac{2}{k}(E + \delta E)\right]} = 1$$

$$b = \sqrt{2m(E + \delta E)}$$

$$a = \sqrt{\frac{2(E + \delta E)}{k}}$$

$$A_2 = 2\pi (E + \delta E) \sqrt{\frac{m}{k}}$$

$$\therefore \Omega = A_2 - A_1$$

$$\Omega(E + \delta E) = 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}} + 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}} \delta E - 2\pi E \sqrt{\frac{m}{k}}$$

$$\Omega(E \pm \delta E) = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}} \cdot \delta E$$

↳ Neste caso simples, o volume do espaço de fase acessível ao sistema (i.e. a área Ω) é uma função independente de E

→ Eu poderia ter calculado Ω pela forma das curvas (hiperelipse $d=2$) (caso de 2D)

$$\Omega = \iint dp dx$$

Vinculo de energia

$$E \leq \frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\left(\frac{2E}{k}\right)} \leq E + \delta E$$

$$\frac{d\Omega}{dE} = \dots$$

$$\Omega(E) = \dots$$

9

→ Gas Ideal Clássico de N partículas não interagentes de massa " m " dentro de um volume V , com energia entre E e $E + \delta E$

→ Hamiltoniano:
$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \quad \rightarrow \quad 2mE = \sum_{i=1}^N p_i^2$$

Coordenadas de posição: \vec{r}_i : varia dentro do volume V

Coordenadas de Momento: \vec{p}_i : pode assumir qualquer valor desde que a energia total esteja entre E e $E + \delta E$

→ Volume do espaço de fase:

$$\Omega(E, V, N | \delta E) = \int_V \dots \int_V d^3r_1 \dots d^3r_N \cdot \int \dots \int_{2mE \leq \sum_{i=1}^N p_i^2 \leq 2m(E + \delta E)} d^3p_1 \dots d^3p_N$$

$$\therefore \Omega(E, V, N | \delta E) = V^N \int \dots \int_{2mE \leq \sum_{i=1}^N p_i^2 \leq 2m(E + \delta E)} d^3p_1 \dots d^3p_N = V^N \int \dots \int_{2mE \leq \sum_{i=1}^N p_i^2 \leq 2m(E + \delta E)} dp_{1x} dp_{1y} dp_{1z} \dots dp_{Nx} dp_{Ny} dp_{Nz}$$

→ Note que resolver este problema é o mesmo problema matemático de calcular a hipersfera esférica de raio " R " e espessura δR .

No espaço de " d " dimensões, mostramos que

$$\Omega_d(R | \delta R) = C_d R^{d-1} \cdot \delta R$$

onde

$$C_d = \frac{2 \pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})}$$

→ No mesmo caso temos:

$$\left\{ \begin{aligned} d &= 3N \\ R &= \sqrt{2mE} \\ \Rightarrow SR &= \frac{1}{2} (2mE)^{\frac{1}{2}} \cdot 2m \delta E \\ SR &= \frac{m}{\sqrt{2mE}} \delta E \end{aligned} \right.$$

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma(\frac{3N}{2})} \cdot (2mE)^{\frac{3N-1}{2}} \cdot \frac{m}{\sqrt{2mE}} \delta E$$

$$\Omega(E, V, N | \delta E) = V^N \cdot \Omega_d$$

$$\Omega(E, V, N | \delta E) = \sqrt{\frac{m}{2}} \cdot C_{3N} \cdot (2m)^{\frac{3N-1}{2}} \cdot V^N E^{\frac{3N}{2}-1} \cdot \delta E$$

com

$$C_{3N} = \frac{2\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma(\frac{3N}{2})}$$

→ Vamos agora preparar para

para o limite termodinâmico $\left\{ \begin{aligned} N \rightarrow \infty \\ E \rightarrow \infty \end{aligned} \right.$ mantendo $\left\{ \begin{aligned} \mu = \frac{E}{N} \text{ fixo!} \\ \theta = \frac{V}{N} \end{aligned} \right.$

$$\log \Omega = \frac{1}{2} \log\left(\frac{m}{2}\right) + \log C_{3N} + \left(\frac{3N-1}{2}\right) \log(2m) +$$

$$+ N \cdot \log\left(\frac{V^N}{N}\right) + \left(\frac{3N}{2}-1\right) \cdot \log\left(\frac{E}{N}\right) + \log \delta E$$

$$\frac{1}{N} \log \Omega = \frac{1}{2N} \log\left(\frac{m}{2}\right) + \frac{1}{N} \log C_{3N} + \frac{3}{2} \log(2m) - \frac{1}{2N} \log(2m) +$$

$$+ \log N + \log(\theta) + \frac{3}{2} \log \mu + \frac{3}{2} \log N - \frac{1}{N} \log \mu - \frac{1}{N} \log N + \frac{\log \delta E}{N}$$

No limite termodinamico

• $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log SE}{N} = 0$

pois SE é uma grandeza pequena mas fixa

• $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log N}{N} = 0$

• $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log M = 0$

• $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log m = 0$

→ Logo estas $D(M, \nu) = \lim_{\substack{N, V, E \rightarrow \infty \\ M, \nu \text{ fixos}}} \frac{k_B \log \Omega(E, V, N / SE)}{N}$

$$D(M, \nu) = \frac{3}{2} k_B \log m + k_B \log \nu + \left[\frac{1}{N} \log \Omega_{3N} + \frac{5}{2} \log N + \text{cte} \right]$$

Este termo só depende de N

Esta é a entropia do gás ideal, a menos do termo que depende de "N"

Caso esta subtraída não seja obtida, a entropia deixa de ser aditiva

→ Ou seja, para ser a entropia do gás ideal em si mesmo o termo dependente de "N" se anula

$\frac{1}{N} \log \Omega_{3N} \sim -\frac{5}{2} \log N + \log a - \log a \equiv \text{cte}$

$\log(\Omega_{3N}) \sim \log \left[N^{\frac{5}{2}} \cdot a \right]$

$\Omega_{3N} \sim a \cdot N^{\frac{5N}{2}}$

∴ $\Omega_{3N} \sim a \cdot N^{\frac{5N}{2}}$

∴ a única maneira de ser entropia do gás ideal

→ Equações de Estado

① $\frac{\partial D}{\partial m} = \frac{1}{T}$

→

$$\frac{3}{2} k_B \frac{1}{m} = \frac{1}{T}$$

$$\therefore m = \frac{3}{2} k_B T$$

② $\frac{\partial D}{\partial v} = \frac{p}{T}$

$$k_B \frac{1}{v} = \frac{p}{T}$$

$$p/v = \frac{p}{V} = \frac{p}{N}$$

$$\therefore pV = Nk_B T$$

$$pV = k_B T$$

→ Vamos agora analisar com mais cuidado

o termo

Ω_{3N}

via

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})}$$

$$\Gamma(d+1) = \int_0^{\infty} x^d \cdot e^{-x} dx$$

$$\Gamma(d+1) = d!$$

$$\Omega_{3N} = \frac{2\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma(\frac{3N}{2})}$$

Mas $\Gamma(\frac{3N}{2}) = (\frac{3N}{2} - 1)!$

$$\therefore \log \Omega_{3N} = \log 2 + \frac{3}{2} N \log \pi - \log(\frac{3N}{2} - 1)!$$

$$= \log 2 + \frac{3}{2} N \log \pi - (\frac{3N}{2} - 1) \cdot \log(\frac{3N}{2} - 1) + \frac{3N}{2} - 1$$

8

$$\log C_{3N} = \log 2 + \frac{3}{2} N \log \pi - \left(\frac{3}{2} N - 1\right) \log\left(\frac{3}{2} N - 1\right) + \frac{3}{2} N - 1$$

$$\log C_{3N} = (\log 2 - 1) + \left(\frac{3}{2} \log \pi + \frac{3}{2}\right) N - \left(\frac{3}{2} N - 1\right) \log\left(\frac{3}{2} N - 1\right)$$

log b

b = cte

log c^N

c = cte

$$\log C_{3N} \sim \log \left[\frac{b \cdot c^N}{\left(\frac{3}{2} N\right)^{\frac{3}{2} N}} \right] \quad N \rightarrow \infty$$

$$C_{3N} \sim c \cdot N^{-\frac{3}{2} N}$$

Mas note que $C_{3N} \neq C_{3N}^{\text{desejado}}$



tenemos discrepancia con el exponente de "N"

C_{3N} tiene exponente $-\frac{3}{2}$

C_{3N}^{desejado} tiene " " $-\frac{5}{2}$

e agone ???

→ Note lo siguiente

$$C_{3N}^{\text{desejado}} \equiv \frac{C_{3N}}{N!} \sim \frac{1}{N!} c^N \cdot N^{-\frac{3}{2} N}$$

$$\log \Omega_{3N}^{\text{tot}} = \log \Omega_{3N} - \log N!$$

$$\approx \log \Omega_{3N} - N \log N + N$$

$\log e^N$

$$\log \Omega_{3N}^{\text{tot}} \approx \log \left[\frac{\Omega_{3N} \cdot e^N}{N^N} \right]$$

$$\Omega_{3N}^{\text{tot}} = e^N \cdot \Omega_{3N} \cdot N^{-\frac{3N}{2}} \cdot N^{-N}$$

$-\frac{3}{2} + \frac{2}{2} = -\frac{5}{2}$

$$\Omega_{3N}^{\text{tot}} = d^N \cdot N^{-\frac{5}{2}}$$

Note que agora $\Omega_{3N}^{\text{tot}} \sim \Omega_{3N}^{\text{desejado}}$

→ o que há de errado entre ??

→ Vamos analisar em termos do espaço de fase:

$$\Omega = \sqrt{\frac{m}{2}} \Omega_{3N} (2m)^{\frac{3N-1}{2}} V^N E^{\frac{3N-1}{2}} \delta E$$

$\Omega_{3N} \sim N^{-\frac{3N}{2}}$

$$\Omega^{\text{desejado}} \approx \Omega_{3N} \sim \frac{\Omega_{3N}}{N!}$$

$$\Omega^{\text{desejado}} = \frac{\Omega}{N!}$$

← Lei de Boltzmann de Gibbs

$$\Omega^{\text{desejado}} = \frac{\Omega}{N!}$$

$$S = k_B \log \Omega^{\text{desejado}} \Rightarrow$$

$$D(M) = \frac{3}{2} k_B \log u + k_B \log v + C/e$$

↑ μ é exatamente a entropia do gás ideal

→ Então, por que o nosso cálculo está errado por este fator $N!$??

→ Lembra-se do problema das bolinhas nas caixas

1º caso

- V caixas
- N bolinhas

Cada caixa cabe apenas 2 bolinhas

bolinhas "Distinguíveis" \Rightarrow # de configurações possíveis

$$A = \frac{V!}{(V-N)!}$$

2º caso

- idêntica ao anterior

bolinhas "Indistinguíveis" \Rightarrow # de configurações possíveis

$$C = \frac{A}{N!}$$

→ Então a divisão por $N!$ e $\frac{\Omega}{N!}$ parece estar refletindo o caráter distinguível das partículas clássicas e a introdução desse fator não passa de um mero artifício para assegurar que a definição estatística de entropia produz, de fato, uma função aditiva, com as propriedades de homogeneidade de entropia termodinâmica

→ Mais tarde isso vem
se este artifício acaba
sendo justificado por meio
do estabelecimento do limite
clássico da entropia de um
gás ideal quântico.