Interação Térmica Simples do Sólido de Einstein

Para realizar esse roteiro abra applet java: Einstein solid: Temperature

Introdução:

Considere um sistema simples comumente conhecido como um sólido de Einstein ou sólido harmônico. A energia de cada partícula neste sólido é restrita a números inteiros positivos. Isto é, cada partícula pode ter energias 0, 1, 2, … e as partículas não interagem.

Uma vantagem do sólido de Einstein é que é fácil calcular o número de microestados $\Omega(E, N)$ para uma dada energia E e um dado número de partículas N:

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

Agora, considere dois sólidos de Einstein A e B que podem trocar energia entre si, mas estão isolados do meio externo. Isto é, os 2 sistemas são cercados por um isolante, rígido e impermeável e são separados entre sí por uma parede condutora de energia, rígida e impermeável. O programa conta o número de formas que a energya pode ser distribuída entre os 2 sistemas para os valores de N_A e N_B fornecidos.

O número total de microestados $\Omega(E_A, E_B)$ acessível para o sistema composto pelos subsistemas A e B com energias E_A e E_B (e número de partículas fixos N_A e N_B) é:

$$\Omega(E_A, E_B) = \Omega(E_A)\Omega(E_B)$$

A energia total $E = E_A + E_B$ é fixa. Porque o sistema composto está isolado, seus microestados acessíveis são igualmente prováveis. Assim, a probabilidade $P_A(E_A)$ que o subsistema A tenha energia E_A é:

$$P_A(E_A) = \frac{\Omega_A(E_A)\Omega_B(E - E_A)}{\Omega}$$

A saída do programa é a energia média do subsistema A e a probabilidade $P(E_A)$ que o sistema A tenha energia E_A.

Problemas:

1. Suponha que $N_A = N_B = 2$ e inicialmente $E_A = 5$ e $E_B = 1$. Qual é o número inicial de microestados para o sistema composto? A barreira interna é removida para que os dois subsistemas possam trocar energia. Determine a probabilidade $P(E_A)$ que o

sistema A tenha a energia E_A, e a energia mais provável do sistema A. Qual é o número total de microestados após a barreira interna ser removida? Discuta qualitativamente a dependência de $P(E_A)$ com a energia E_A. Os valores números correspondentes podem ser obtidos clicando em *DataTable* no menu *Views*. Use esses dados para calcular a média e a variância da energia de cada subsistema.

2. Responda as mesmas questões do problema 1 com $N_A = 20$, $N_B = 20$, $E_A = 100$ e $E_B = 20$.
3. Responda as mesmas questões do problema 1 com $N_A = 20$, $N_B = 40$, $E_A = 100$ e $E_B = 20$.
4. Descreva como você pode calcular a probabilidadede que um sistema com mais energia (e faz todo sentido intuir "mais quente") tem de ceder energia para o de menor energia. Para o sistema $N_A = 10$, $N_B = 15$, $E_A = 20$ e $E_B = 5$, calcule a probabilidade do sistema A dar energia para o sistema B e calcule o processo inverso, qual a probabilidade de que a partir da condição inicial, o sistema B dê energia para o sistema A.
5. Defina uma energia total inicial grande (tão grande quanto o maior sistema que você for calcular) e mantenha-a fixa. Agora vá sucessivamente aumentando o tamanho dos sistemas seguindo a regra $N_A = N_B = N$. Descreva qualitativamente o que está acontecendo com o sistema. Se quiser, pode calcular e fazer o gráfico da variância em função de N ($\sigma(N)$) .
6. Faça uma investigação de como a razão entre os tamanhos dos subsistemas A e B influenciam na termodinâmica do problema.
7. Considere um subsistema especial com apenas uma partícula, $N_A = 1$. Suponha que $N_B = 5$, $E_A = 0$ e $E_B = 12$. Se nós supormos que o subsistema A possa trocar com o sistema muito maior B, qual é a probabilidade que o sistema A tenha energia E_A? Qual é a probabilidade de que o sistema A esteja em um determinado microestado com energia n onde n é um inteiro? A probabilidade neste caso é chamada de *probabilidade de Boltzmann*. Por que a forma desta probabilidade é diferente das probabilidades que encontrou nos outros problemas?