

## **PROJETO DE PESQUISA**

Programa de Iniciação Científica e Tecnológica – CBPF

Nome do Orientador e Coordenação (Pesquisador/Tecnologista/Pós-doc):  
Henrique Santos Lima: Pós-doc, COTEQ

Nome do pesquisador ou tecnologista e Instituição de Pesquisa Externa: (Coorientador ou Colaborador externo, se houver):

Nome do Supervisor e Coordenação: (Pesquisador/Tecnologista):  
Constantino Tsallis: Pesquisador, COTEO

Título do Projeto: Aplicações da mecânica estatística a fenômenos de transporte

Palavra-chave: Termodinâmica; mecânica estatística; dinâmica molecular; fenômenos de transporte

Área de conhecimento: Termodinâmica e física estatística

Pré-requisitos desejáveis (se houver):  
É desejável que o aluno tenha cursado as disciplinas Termodinâmica e mecânica clássica.

Pré-requisitos obrigatórios (se houver):

## Possibilidade de orientação remota:

( X ) Sim ( ) Não

## Aplicações da mecânica estatística a fenômenos de transporte

A termodinâmica de equilíbrio é uma das teorias macroscópicas mais bem estabelecidas na física. Com o advento da mecânica estatística de equilíbrio, tornou-se possível estabelecer conexões entre interações microscópicas e propriedades macroscópicas da matéria. No entanto, quando se trata de termodinâmica de não equilíbrio, essas conexões se tornam consideravelmente mais complexas de compreender e formular.

Grande parte dos processos físicos ocorrem fora do estado de equilíbrio termodinâmico, ou seja, não atingem o equilíbrio conjunto (mecânico, térmico, químico, entre outros). Muitos processos, inclusive, nunca alcançam este estado, como a difusão de partículas e a transferência de energia térmica.

Uma abordagem eficiente para entender sistemas em não equilíbrio é a dinâmica molecular, que conecta a segunda lei de Newton aos fenômenos macroscópicos da matéria. Essa teoria permite determinar propriedades de transporte, como condutividade térmica, viscosidade e coeficiente de difusão, a partir do conhecimento das interações no sistema. Tais grandezas macroscópicas seriam impossíveis de obter por meio de uma teoria de equilíbrio. Além disso, a dinâmica molecular também possibilita a obtenção de propriedades de equilíbrio, como calor específico, suscetibilidade e coeficiente de expansão térmica.

Na termodinâmica de não equilíbrio, é possível, por exemplo, determinar a temperatura, pressão e velocidade de um fluido, assumindo que propriedades como condutividade térmica e viscosidade estejam previamente definidas. Já a dinâmica molecular é uma ferramenta poderosa para calcular essas propriedades e compreender seu comportamento.

Neste projeto, pretende-se investigar sistemas clássicos, utilizando a dinâmica molecular para determinar propriedades de transporte desses sistemas. Com isso, busca-se enfatizar a conexão fundamental entre a mecânica clássica e a termodinâmica de não equilíbrio.

## Objetivos do Projeto

1. Investigar sistemas clássicos fora do estado de equilíbrio termodinâmico, identificando suas características principais.
2. Calcular propriedades macroscópicas de equilíbrio, como calor específico, coeficiente de expansão térmica, temperatura e pressão.
3. Utilizar a dinâmica molecular para determinar propriedades de transporte, como condutividade térmica, viscosidade e coeficiente de difusão.
4. Ampliar o entendimento dos processos microscópicos e seus efeitos em fenômenos macroscópicos fora de equilíbrio.

## Metodologia

1. Inicialmente, os princípios da termodinâmica de equilíbrio e de não-equilíbrio serão ensinados ao aluno, proporcionando uma base teórica sólida. Após essa etapa, conceitos fundamentais da mecânica estatística de equilíbrio serão explorados, preparando o aluno para avançar no estudo dos fenômenos fora de equilíbrio. Caso o aluno já tenha cursado Termodinâmica e Mecânica Estatística, esta etapa será simplificada, considerando apenas o estudo de termodinâmica de não-equilíbrio.
2. Em seguida, serão introduzidos os principais conceitos fora de equilíbrio, como as equações de Langevin, Fokker-Planck e Klein-Kramers, destacando suas aplicações e relevância para sistemas dinâmicos.
3. Após a conclusão dos estudos teóricos, as equações de Langevin serão aplicadas a modelos ferromagnéticos iniciais clássicos com interações de curto ou longo alcance. Esses modelos serão analisados com base na transferência de energia térmica, utilizando a lei de Fourier como ferramenta principal.
4. Com o término do estudo do fluxo de calor, modelos iniciais clássicos serão avaliados para calcular o coeficiente de difusão, promovendo uma compreensão aprofundada dos processos de transporte de partículas em sistemas fora de equilíbrio.
5. Finalmente, serão empregados modelos clássicos de fluidos relativamente simples para determinar sua viscosidade, destacando aplicações práticas da teoria.

## Resultados esperados

Espera-se que o aluno adquira conhecimento básico de fenômenos de transporte clássicos, assim como um bom conhecimento de mecânica do contínuo e sua conexão com a termodinâmica.

## Referências

Callen, Herbert B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. 2nd ed., Wiley, 1985.

SEARS, F. W. *An Introduction to Thermodynamics, The Kinetic Theory of Gases, and Statistical Mechanics*. Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1959.

HUANG, Kerson. *Statistical Mechanics*. 2<sup>a</sup> ed. New York: Wiley, 1987.

OLIVEIRA, M. J.; TOMÉ, T. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. São Paulo: EDUSP, 2014.

GROOT, S. R. de; MAZUR, P. *Non-equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, Inc, New York, 1984.

YOURGRAU, W.; VAN DER MERWE, A.; RAW, G. *Treatise on Irreversible and Statistical Thermophysics: An Introduction to Nonclassical Thermodynamics*. Dover Publications, Inc, New York, 1982.