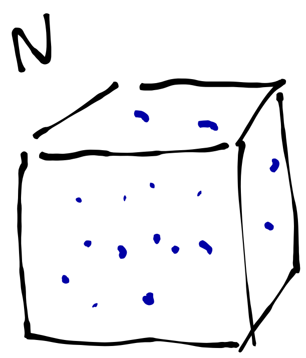
Mec. Estad. Clase 5 25. sep. 2020.

Mec. estadística clásica $\rightarrow$ $\boxed{\text{Ensemble microcanónico}}$

Conceptos básicos:

- Estados
  - $\rightarrow$ Termo: macroestados: variables de estados $E, V, T, p, \mu, S \ldots$
  - $\rightarrow$ ME: microestados: variables microscópicas



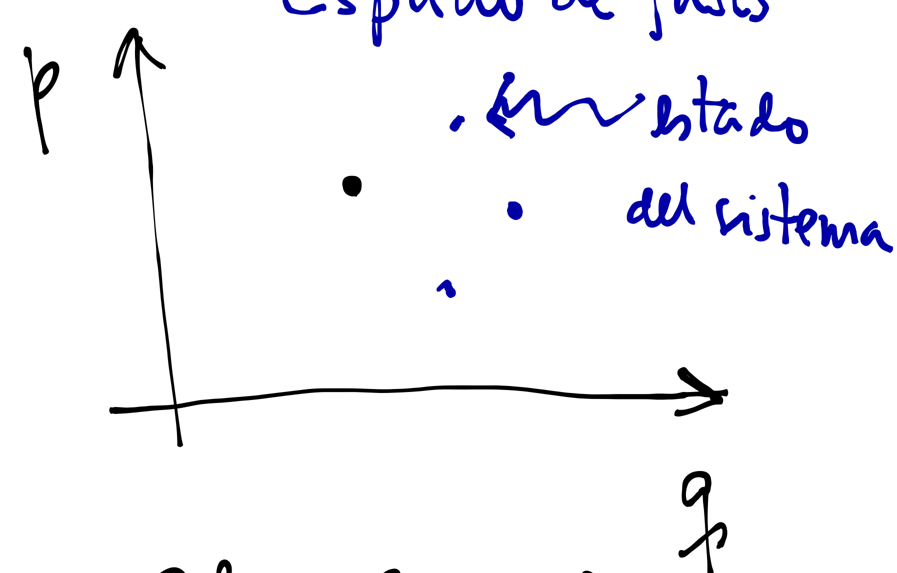
$$\vec{q} = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots \vec{r}_N)$$

$$\vec{p} = (\vec{p}_1, \vec{p}_2 \ldots \vec{p}_N)$$

$$q = (\underbrace{q_1, q_2, q_3}_{\underbrace{x_1, y_1, z_1}_{\vec{r}_1}}, \ldots q_{3N}) \quad 3\text{-D}$$

$$p = (p_1 \ldots p_{3N})$$

Espacio de fases



- Sistemas mecánicos

obedecen a las ec. de Hamilton $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q, p)$

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \; ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}} \qquad \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

- Nuestra tarea es buscar todos los estados posibles del sistema gobernado por $\mathcal{H}$, y sometidos a condiciones concretas:

<u>Ej: Oscilador armónico</u>, 2 partículas $N = 2$.

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left(p_{1x}^2 + p_{1y}^2 + p_{1z}^2\right) + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x_1^2 + y_1^2 + z_1^2\right)$$

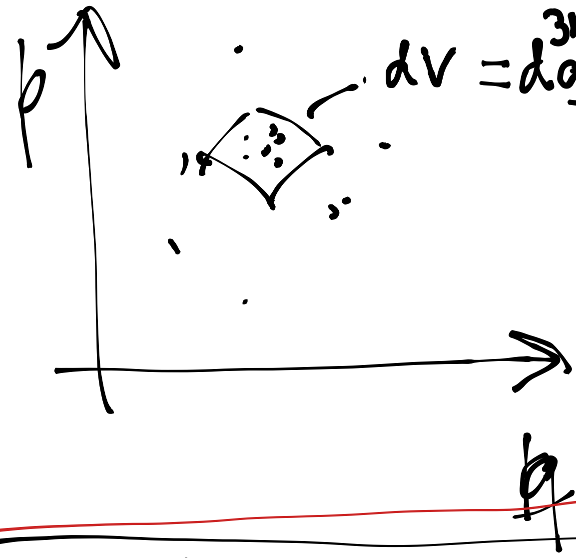
$$+ \frac{1}{2m}\left(p_{2x}^2 + p_{2y}^2 + p_{2z}^2\right) + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x_2^2 + y_2^2 + z_2^2\right) = E$$

y $\mathcal{H} = E$ ← la energía sistema está fija

- Sistema con T, V, N : ← energía libre de Helmholtz.

<u>Idea:</u> Buscar los estados microscópicos compatibles con las condiciones externas

→ descripción estadística.



$dV = d^{3N}q\, d^{3N}p$

$\mathcal{N}(q,p)\, \underbrace{d^{3N}q\, d^{3N}p}$

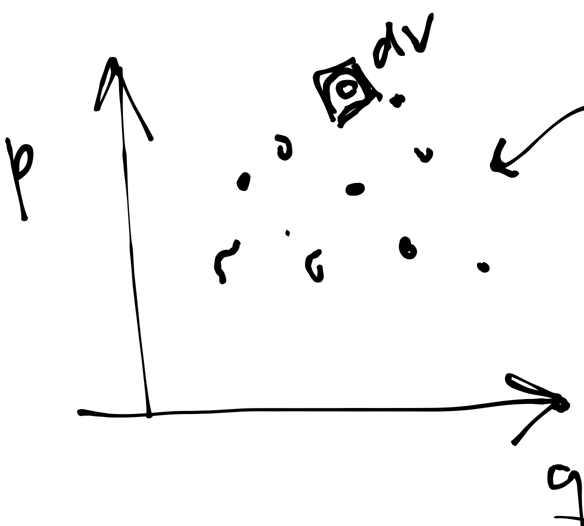
$\underbrace{\cancel{\rho(q,p)}}\ \underbrace{dV}$ } nro. de puntos representativos del sistema en vol. dV del espacio de fases Γ

$d\mathcal{N}$

$$\boxed{\cancel{\rho = \frac{N}{\text{"}V\text{"}}; \quad \frac{d\text{"}N\text{"}}{dV} = \rho \to d\text{"}N\text{"} = \rho\, d\text{"}V\text{"}}}$$

→ Ejemplo: información previa $(E, V, N, \dots)$

Dada condiciones externas I ←



estados compatibles con I.

$\cancel{\rho(q,p)}\, d^{3N}q\, d^{3N}p$

$\mathcal{N}\, d^{3N}q\, d^{3N}p$

Llamamos $\Omega(I)$ a los puntos del esp. de fases compatibles con I

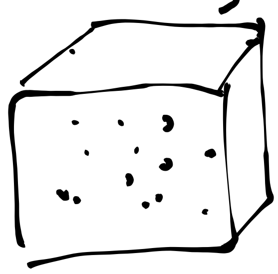
$$\Omega(I) = \int_{q,p} \mathcal{N}(q,p)\, d^{3N}q\, d^{3N}p = \int_\Gamma d\mathcal{N}$$

• Si $I = (E, V, N)$

$$\Omega(E,V,N) = \int_{q,p} \mathcal{N}(q,p)\, \cancel{\rho(q,p)}\, d^{3N}q\, d^{3N}p = \int_\Gamma d\mathcal{N}$$

El $\rho(q,p)$ depende de $\mathcal{H}$ y de las condiciones I

$\rho(q,p)$: distribución de probabilidad de los (micro) estados (q,p)



E, V, N ; $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m}$

$p(x)dx \equiv \rho(x)dx$

Encontrar $\rho = \rho(q,p)$ es nuestro objetivo.

A partir de allí podemos obtener todos los observables físicos: $O(q,p)$

$$\langle O \rangle = \int O(q,p)\, \rho(q,p)\, d^{3N}q\, d^{3}p$$

$\rho(q,p)$ ~~le~~ llamamos a la 'probabilidad' de que se verifique el estado (q,p).

- Si Ω es el # total de estados compatibles

$$\rho(q,p) = \frac{1}{\Omega(E,V,N)}$$: $\Big\{$ postulado fundamental de la M. Estad:

$\Leftrightarrow$ Dado un sistema gobernado por $\mathcal{H} = \mathcal{H}(q,p)$ y sometido a E, V, N, la probabilidad de que se verifique el estado (q,p) es

$$\rho(q,p) = \begin{cases} \dfrac{1}{\Omega(E,V,N)} & \text{para los estados } (q,p) \text{ tal que } \mathcal{H}(q,p) = E \\ 0 & \text{para otros estados.} \end{cases}$$

ó

$$\rho(q,p) = \frac{\delta(\mathcal{H}(q,p) - E)}{\Omega(E)}$$

• ~~Ade~~.

$$\int \rho(q,p)\, d^{3N}q\, d^{3N}p = 1$$

$$\|$$

$\mathcal{H}=\mathcal{H}(q,p)$

$$\int \left[\frac{\delta(\mathcal{H}-E)}{\Omega(E)}\right] d^{3N}q \, d^{3N}p = 1$$

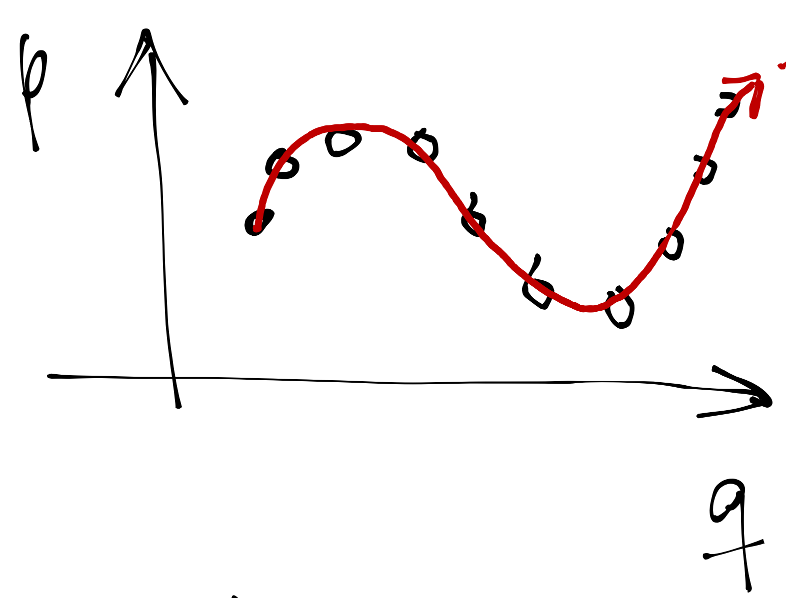
- $\rho(q,p) = \dfrac{dN}{\Omega}$

dN ← # de estados entre (q,p) y $(q,p)+dq\,dp$ compatibles con I

Ω ← # total de estados (q,p) compatibles con I

∘ A eso se le llama ensemble microcanónico

∘ Idea de ensemble (Gibbs)



$\dot{q} = \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$; $\dot{p} = -\dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$

$\theta = \theta(t)$

· en equilibrio $\theta \cancel{(t)}$

∘ ensemble: es el conjunto de configuraciones compatibles con $\mathcal{H}$ e I

∘ o sea, es una réplica del sistema compatible con $\mathcal{H}$ e I //.

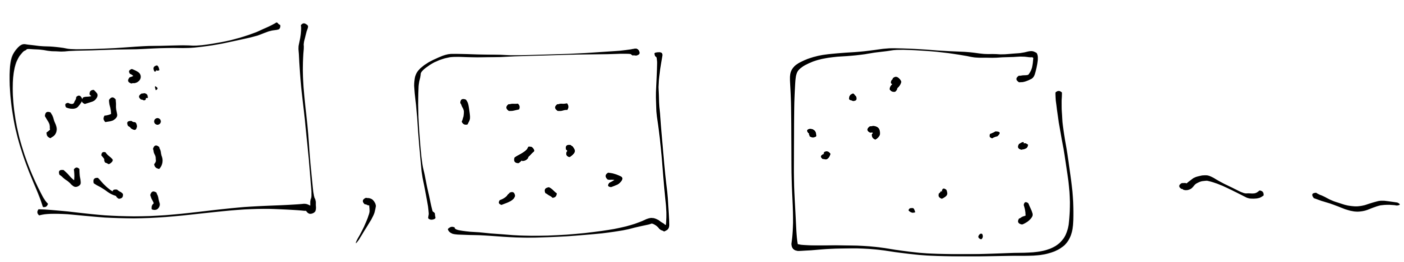
todo es es valido en tanto se verifique la

Hipotesis ergódica:

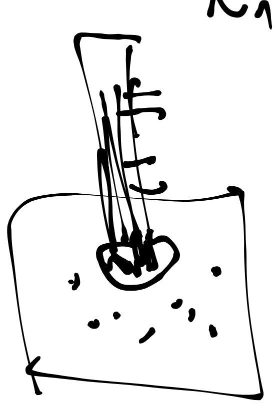
$$\langle A \rangle_t = \langle A \rangle_{\text{ensemble}}$$

$$\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(t)\, dt = \int A(q,p)\, \rho(q,p)\, d^{3N}q\, d^{3N}p$$

hipotesis ergódica



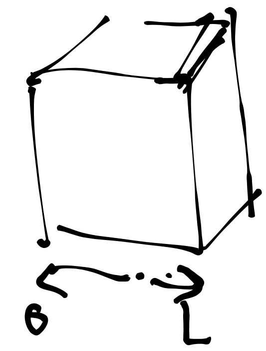
t_1 t_2 t_3



Gas ideal en ensemble microcanónico

$$(E, V, N)$$

(I) $$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \cancel{\phi}$$



bordes de la caja : V : (I)

$$\mathcal{H} = E \leftarrow \text{(I)}$$

- Necesitamos ρ; pero $\rho = \dfrac{1}{\Omega}$

luego necesitamos Ω:

$$\frac{1}{2m}\left(p_{1x}^2 + p_{1y}^2 + \dots \quad p_{Nz}^2\right) = E$$

$$\Omega(E,V,N) = \int_{\substack{(\forall q,p) \\ \text{que satisfacen I}}} d^{3N}q \, d^{3N}p = \int_{q,p} d^{3N}q \, d^{3N}p \, \delta(\mathcal{H}(q,p) - E)$$

o sea $\mathcal{H}(q,p) = E$

$$\Omega = \int d^{3N}q \, d^{3N}p \, \delta(\mathcal{H}(p) - E) = V^N \left(\int d^{3N}p \, \delta(\mathcal{H}(p) - E)\right)$$

$$\int d^{3N}p \quad : \quad$$ integral de esfera de radio $\sqrt{2mE} = p$ en N dim.

$\forall p$ tal que $\frac{p^2}{2m} = E$

$$p^2 = \sum_{i=1}^{N} p_i^2$$

Geo.