Clase 2 - Mecánica Estadística

Duración: 1:10 hrs.
Publicada el 6 de septiembre de 2016

Prof. Álvaro Núñez

1. Conceptos Básicos

- Ley de difusión: lenta e irreversible.
- Ejemplos de difusión: difusión sólida y difusión de electrones.
- Estimación del coeficiente de difusión.

2. Ecuación de difusión y la flecha del tiempo

$$\boxed{\partial_t P = \frac{\ell^2}{2\tau}\partial_{xx} P \equiv \mathcal{D}\,\partial_{xx} P}$$

- La ecuación de difusión rompe la simetría de reversión espacial $t \longrightarrow -t$.
- Si grabamos un proceso difusivo y lo observamos en reversa, ¡el proceso resultante NO es un proceso difusivo!
- Notemos que lo anterior esta en evidente conflicto con las posibles leyes microscópicas de la materia (ya sean clásicas o cuánticas).
- Podríamos concluir que los procesos difusivos no son relevantes en la naturaleza. Falso.
- El origen de esta dirección privilegiada del tiempo será un tema recurrente.

3. Características básicas de los procesos difusivos

Aunque la ecuación que desarrollamos es para la densidad de probabilidad de un caminante aleatorio, el fenómeno descrito por dicha ecuación es universal. Sin importar la naturaleza microscópica de los constituyentes (fotones, átomos de impurezas en un metal, electrones en un semiconductor, iones en una membrana celular, y un gran etc.) diversos sistemas admiten una descripción en términos de procesos difusivos.

Revisemos los aspectos más esenciales de un fenómeno difusivo:

- Es un proceso lento, una señal difusiva se propaga una magnitud $\sqrt{\mathcal{D}t}$.

Podemos dar un argumento elemental (sacado de Feynman lectures in physics) que demuestra este resultado. La posición final después de N pasos de un caminante aleatorio es:

$$x_N = \underbrace{\sigma_1 + \sigma_2 + \cdots + \sigma_N}_{\approx 0} \tag{1}$$

donde σ_i es ± 1 dependiendo de una moneda. Ahora, para un valor de N grande esperamos que x_N se aproxime a cero. El cuadrado de la posición, sin embargo:

$$x_N^2 = \underbrace{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_N^2}_{=N} + 2\underbrace{(x_1 x_2 + x_1 x_3 + \cdots x_{N-1} x_N)}_{\approx 0} \tag{2}$$

Notemos que la suma de N números aleatorios (± 1) no es necesariamente igual a cero. En las figuras (1) y (2) ilustramos los caminos de caminantes aleatorios. Vemos que no es posible decir que $x_N = 0$ para N grande. El promedio del que hablamos es básicamente un promedio de ensemble. Es decir, consideramos un número grande de caminantes aleatorios independientes y tomamos los promedios sobre dicha diversidad. ¿Es dicha información será relevante para saber sobre un caminante?

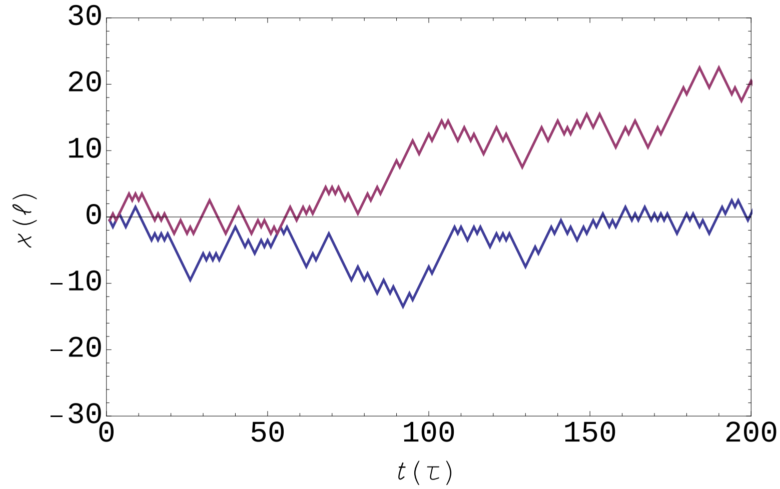

Figura 1: Dos realizaciones del camino aleatorio. No hay regularidad aparente.

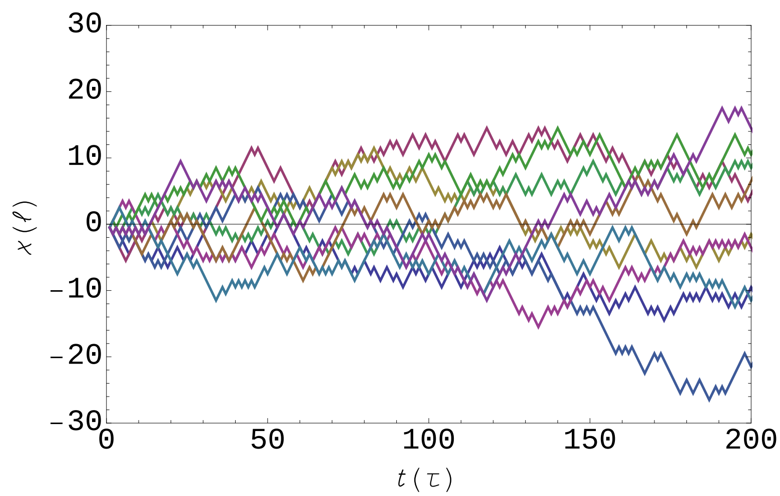

Figura 2: Diez realizaciones del camino aleatorio. No hay regularidad aparente.

- Corresponde a un decaimiento diferenciado por longitud de onda.

En representación de Fourier:

$$\frac{\mathrm{d}P_k}{\mathrm{d}t} = -\mathcal{D}k^2 P_k = -\frac{P_k}{\tau_k} \tag{3}$$

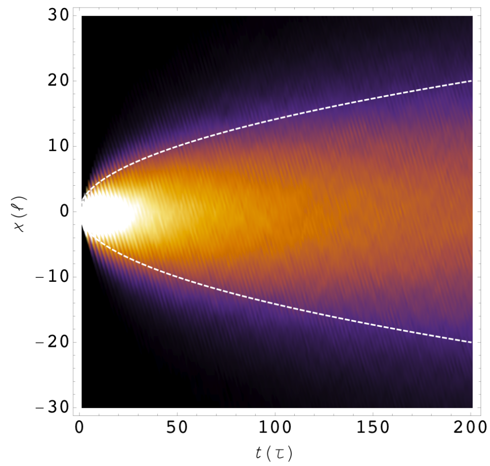

Figura 3: Diez mil realizaciones del camino aleatorio. Histograma en función del tiempo. Lineas segmentadas $\pm\sqrt{2t}$.

donde $\tau_k = 1/(\mathcal{D}k^2)$, corresponde a un tiempo de decaimiento que depende de k. Para longitudes de onda corta dicho tiempo es muy corto. Si comenzamos con un $P(x, t = 0)$ localizado sus componentes de Fourier se extienden a todo el espacio recíproco. Tras un tiempo t todas las componentes con $k > 1/\sqrt{\mathcal{D}t}$ se disiparan, dando origen a un paquete de ancho $\sqrt{\mathcal{D}t}$.

4. Difusión de materia

- **Ley de Fick**: ley fenomenológica que relaciona la corriente de masa con el gradiente de densidad. En equilibrio, cuando el sistema es homogéneo en equilibrio no hay corrientes. Si tenemos gradientes de densidad aparecerán corrientes para tratar de restablecer el equilibrio.

$$\vec{j} = -\mathcal{D}\vec{\nabla}\rho \tag{4}$$

- Notemos que la corriente es impar bajo inversiones temporales (si revertimos el sentido del tiempo las corrientes cambian de dirección). La densidad es par (si revertimos el sentido del tiempo la densidad se mantiene igual). La ley de Fick iguala a un lado algo par con algo impar al otro lado. Esto constituye una violación de la simetría de reversión temporal.

- La conservación de masa se impone a través de una ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathrm{t}} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \tag{5}$$

- Esto último nos permite llegar fácilmente a la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathrm{t}} = \vec{\nabla} \cdot \left(\mathcal{D}\vec{\nabla}\rho\right) \tag{6}$$

A. Problemas

A.1. Ecuación del calor

- Considere una placa circular de radio R en cuyo perimetro se fija a temperatura T_2. Una vez que la temperatura de la placa es homogénea su centro se pone en contacto con un termostato

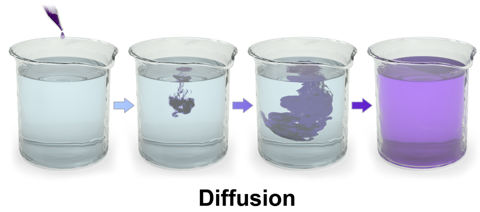

Figura 4: Proceso difusivo de tinta en agua. Notemos como las flechas indican el paso del tiempo de forma unívoca.

a una temperatura T_1 en $t = 0$. Usando (sin probar) que la temperatura se distribuye sobre la placa de acuerdo a un proceso difusivo con ecuación:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \tag{7}$$

determine el perfil de temperatura sobre la placa en función del tiempo.

- Mismo problema anterior pero considerando que el contacto se hace a una distancia ℓ del centro.

A.2. Difusión asimétrica

En cristales la ecuación de difusión debe ser modificada para incluir el efecto de la anisotropía cristalina. Considere un caminante aleatorio que se mueve en una red rectangular saltando directamente hacia los vecinos más cercanos con probabilidad p, y a los vecinos siguientes (ver figura) con probabilidad q. ¿Cuál es la forma de la ecuación de difusión?

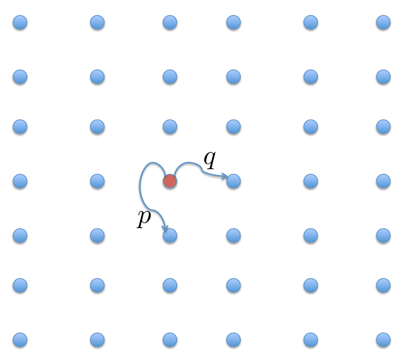

Figura 5: example caption