Clase 6 - Mecánica Estadística

Duración: 1:10 hrs. Prof. Álvaro Núñez
Publicada el 20 de septiembre de 2016

1. Conceptos Básicos

- Probabilidades como consecuencia de nuestras limitaciones.
- Cantidades conservadas y ciclos aislados.
- Teorema de Liouville: conservación del volumen.

2. Vuelta a los dados... el origen de la mecánica estadística

- Imaginemos el siguiente mecanismo para imaginar la emergencia de numeros aleatorios a partir de procesos deterministas.
- El modelo consiste en un dado con reglas completamente deterministas de evolución. En cada *paso temporal* el sistema evoluciona a un estado que depende solo del estado actual mediante una regla determinada, por ejemplo:

$$\begin{pmatrix} 1 & \to & 2 \\ 2 & \to & 3 \\ 3 & \to & 4 \\ 4 & \to & 5 \\ 5 & \to & 6 \\ 6 & \to & 1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

- Si este flujo $1 \to 2 \cdots \to 1$ ocurre mucho más rápido que los instrumentos de medición, nosotros mediremos los números que salen y creeremos que son aleatorios.
- La mejor descripción que podemos dar es precisamente que los resultados salen con probabilidad 1/6 (6 es el número total de estados en el sistema.)
- Esta interpretación es válida para muchos ciclos no necesariamente el indicado, por ejemplo:

$$\begin{pmatrix} 1 & \to & 6 \\ 2 & \to & 4 \\ 3 & \to & 5 \\ 4 & \to & 3 \\ 5 & \to & 1 \\ 6 & \to & 2 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

  también generaría la misma regla estadística.

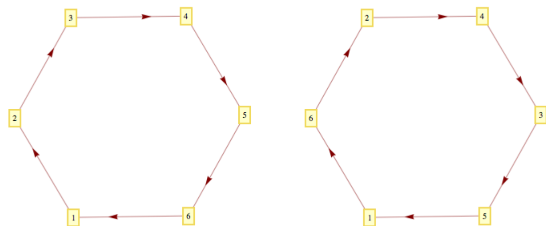

Figura 1: Estos ciclos generan probabilidades 1/6 para cada realización.

- Debido a las limitaciones de nuestras capacidades experimentales una teoría estadística es necesaria.
- A pesar de haber muchos ciclos que generan equiprobabilidad esto no siempre es correcto. Por ejemplo el par de ciclos que muestro a continuación no generan equiprobabilidad.

$$\begin{pmatrix} 1 & \to & 3 \\ 3 & \to & 5 \\ 5 & \to & 1 \\ 2 & \to & 4 \\ 4 & \to & 6 \\ 6 & \to & 2 \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} 1 & \to & 2 \\ 2 & \to & 1 \\ 3 & \to & 4 \\ 4 & \to & 3 \\ 5 & \to & 6 \\ 6 & \to & 5 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

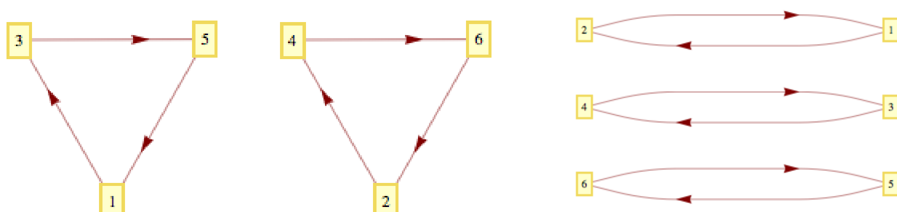

Figura 2: Estos ciclos no generan equiprobabilidad, pues tienen cantidades conservadas.

- Una diferencia importante es que estos ciclos son caracterizados por cantidades conservadas.
- El espacio de estados es dividido en zonas disconexas mediante cantidades conservadas. Para los aspectos prácticos esto constituye una definición de cantidades conservadas,
- **Principio de ergodicidad**: una órbita arbitraria cubre el espacio físico de parámetros. Este concepto será un tema a discutir en las próximas clases. Veremos como su aplicación es muy fructifera para establecer la teoría, pero que su importancia práctica es mucho menor.
- Conservación de volumen (asociado a la reversibilidad). Notemos que un flujo que no conserva el volumen es necesarimente irreversible.

3. Teorema de Liouville

En mecánica Hamiltoniana el flujo de los estados en el espacio de fases obedece precisamente esta propiedad de conservación de volumen. Este hecho es conocido como el teorema de Liouville. Consideremos un sistema arbitrario con coordenadas $q_1, q_2, \cdots q_{3N}$ y momenta $p_1, p_2, \cdots p_{3N}$. El espacio de fases es un espacio de dimensión $6N$. Los puntos en el espacio de fases evolucionan de acuerdo a las ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{p}_i = -\partial_{q_i}\mathcal{H} \ , \ \dot{q}_i = \partial_{p_i}\mathcal{H} \tag{4}$$

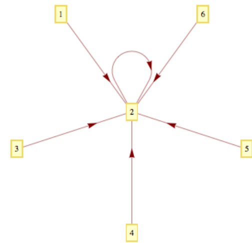

Figura 3: Esta órbita no cumple con el principio de conservación del número de estados

Cada punto del espacio de fases tiene asociada una velocidad:

$$\vec{v} = (\dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_{3N}, \dot{p}_1, \cdots, \dot{p}_{3N})$$

La divergencia de este campo puede ser evaludada directamente:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right)$$

que es cero en virtud de las ecuaciones de Hamilton. El flujo en el espacio de fases es incompresible.

Consideremos un cubo de volumen:

$$d\Gamma = dq_1 \cdots dq_{3N} \times dp_1 \cdots dp_{3N} \tag{5}$$

Tras un tiempo dt los puntos se mueven hacia

$$q_i' = q_i + \dot{q}_i dt, \quad p_i' = p_i + \dot{p}_i dt$$

con lo que el volumen cambia a

$$d\Gamma' = \left(dq_1 + \frac{\partial \dot{q}_1}{\partial q_1} dq_1 dt \right) \cdots \left(dq_{3N} + \frac{\partial \dot{q}_{3N}}{\partial q_{3N}} dq_{3N} dt \right) \left(dp_1 + \frac{\partial \dot{p}_1}{\partial p_1} dp_1 dt \right) \cdots \left(dp_{3N} + \frac{\partial \dot{p}_{3N}}{\partial p_{3N}} dp_{3N} dt \right).$$

A primer orden en dt el volumen es:

$$d\Gamma' = d\Gamma \left(1 + dt \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) \right)$$

Consideremos un ensemble, caracterizado por una densidad en el espacio de fases $\rho(q's, p's)$. La evolución temporal de dicha densidad debe obedecer la ecuación de continuidad:

$$\dot{\rho} = -\nabla \cdot \vec{J}$$

la corriente de probabilidad es:

$$\vec{J} = \rho(\dot{q}_1, \cdots, \dot{q}_{3N}, \dot{p}_1, \cdots, \dot{p}_{3N})$$

La ecuación de continuidad se expresa:

$$\dot{\rho} = -\frac{\partial}{\partial q} \rho \dot{q} - \frac{\partial}{\partial p} \rho \dot{p}$$

Lo que nos lleva a:

$$\dot{\rho} = -\frac{\partial \rho}{\partial q} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} = -\{\rho, \mathcal{H}\}$$

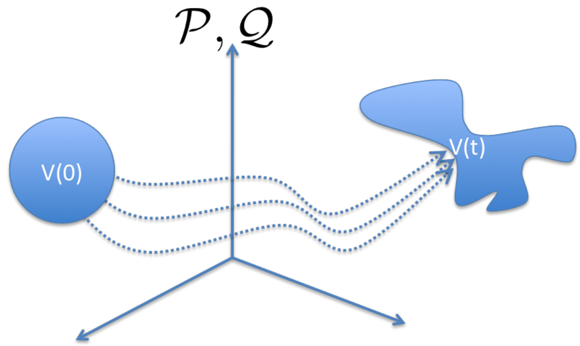

Figura 4: Teorema de Liouville

4. Problemas

- Considere un sistema descrito por el Hamiltoniano $\mathcal{H} = (1/4)(p^2 + q^2)^2$. Encuentre las ecuaciones de movimiento y resuélvalas analíticamente. Considere 1000 replicas del sistema distribuidas en el cuadrado $0{,}75 < q < 1{,}25$, $-0{,}25 < p < 0{,}25$. Haga evolucionar los estados y haga un gráfico de la nube de estados para distintos tiempos. Comente.