



Clase 8 - Mecánica Estadística

Duración: 1:10 hrs.
 Publicada el 4 de Noviembre

Prof. Álvaro Núñez

1. Conceptos Básicos

- Gas ideal microcanónico.
- Paradoja de Gibbs
- Geometría n -dimensional.

2. El gas ideal clásico

- Consideremos un sistema gaseoso tan diluido que podemos despreciar (con un alto grado de precisión) las interacciones entre sus componentes microscópicos. El Hamiltoniano de dicho sistema esta dado por la suma de las energías cinéticas de sus componentes:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \quad (1)$$

- El problema de determinar el número de microestados con energía E , $\Omega(E)$ es esencialmente geométrico. Básicamente el número de microestados esta dado por el volumen de la sección geométrica del espacio de fases $6N$ -dimensional. Aquí aparece un problema: $\Omega(E)$ es adimensional, mientras que el volumen tiene dimensiones de $(pq)^{3N}$.
- Para hacer un conteo correcto debemos dividir el espacio de fases en celdas finitas. La división natural es en celdas de Δp y Δq con $\Delta q \Delta p \sim h$. Esto nos permite adimensionalizar el volumen de modo de obtener:

$$\Omega(E) = \frac{1}{h^{3N}} \frac{\text{v(microestados con energía entre } E \text{ y } E + \delta E)}{\delta E} \quad (2)$$

- Determinar el volumen puede ser muy complicado. Un caso especialmente fácil es un sistema con interacciones tan débiles que su efecto es despreciable (e.g. cambian la energía en una magnitud menor que δE). Para dicho sistema la energía es simplemente:

$$E \approx \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + \dots + \frac{\vec{p}_N^2}{2m}, \quad (3)$$

independiente de q 's. La zona geométrica se entiende directamente como una hipersfera de radio $R = \sqrt{2mE}$ por el volumen V^N .

- El cálculo de dicho volumen se hace en el apéndice, obtenemos:

$$\Omega(E) = \frac{V^N}{h^{3N}} \frac{d}{dE} \left(\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} (2mE)^{3N/2} \right) \quad (4)$$

$$= \frac{V^N}{h^{3N}} \frac{3N}{2E} \left(\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} (2mE)^{3N/2} \right) \quad (5)$$

- Si suponemos un sistema con energía E_0 tiene $\Omega(E_0)$ microestados. La probabilidad de cada microestado:

$$p(\{\text{microestado}\}) = \begin{cases} 0 & \text{si } E(\{\text{microestado}\}) \neq E_0 \\ \frac{1}{\Omega(E_0)} & \text{si } E(\{\text{microestado}\}) = E_0 \end{cases} \quad (6)$$

- Estimar el número de microestados asociados a una energía dada es fácil usando el siguiente argumento.
- Dividiendo el espacio de fases en pequeñas celdas de tamaño $\delta\Gamma$. La superficie del espacio de fases con energía igual a la E_0 esta dado por:

$$A(E_0) = \gamma_N V^N (2mE_0)^{3N/2} \quad (7)$$

- Obtenemos:

$$S(E_0) = \log \gamma_N + N \log V + \frac{3N}{2} \log E_0 \quad (8)$$

$$S = N \log \left(V \left(\frac{E}{N} \right)^{3/2} \right) + \frac{3}{2} \left(1 + \log \frac{4\pi m}{3h^2} \right)$$

- De donde, usando la relación:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E_0} \right)_{V,N} \quad (9)$$

obtenemos:

$$E = \frac{3N}{2} T \quad (10)$$

- La derivada con respecto al volumen se puede escribir:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{E,N} = - \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N} \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{S,N} \equiv \frac{P}{T}, \quad (11)$$

obteniendo:

$$\frac{P}{T} = \frac{N}{V} \quad (12)$$

conocida como la ley de los gases ideales.

3. Partículas indistinguibles

- Los átomos de un mismo material son idénticos. Esta identidad es una curiosidad en mecánica clásica, pero tiene consecuencias fundamentales en mecánica cuántica.
- Como las partículas no tienen trayectorias definidas, no podemos distinguir entre dos partículas arbitrarias.
- Etiquetar las partículas como lo hicimos con índices de 1 a N, tiene una gran ambigüedad, ya que cualquier otro orden de las etiquetas nos entrega un estado completamente equivalente.

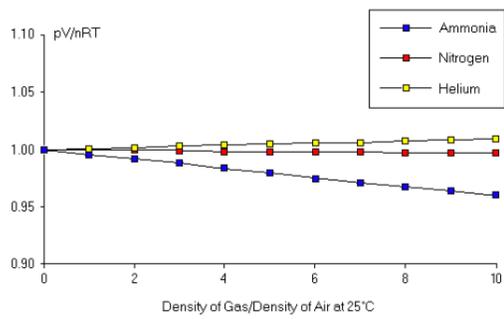


Figure 8: Deviations from ideal gas law at sensible densities

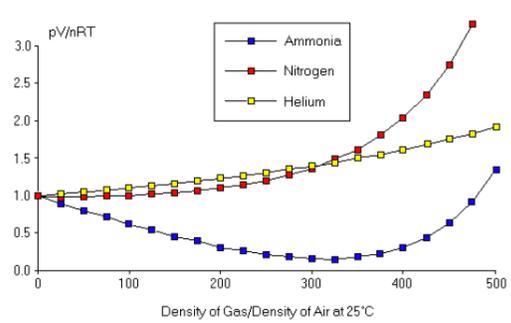


Figure 9: Deviations from ideal gas law at extreme densities

- Hemos sobreestimado el número de estados por un factor $N!$. Si corregimos este error llegamos a:

$$\mathcal{S}(E) = N \log \left[\frac{V}{h^3} (2mE)^{3/2} \right] - \log \left[N! \left(\frac{3N}{2} \right)! \right] \quad (13)$$

que podemos escribir como:

$$\mathcal{S} = N \left(\frac{5}{2} - \log(\rho \lambda^3) \right) \quad (14)$$

donde $\lambda = h/\sqrt{4\pi m E/3N}$ y $\rho = N/V$.

- Entropía de mezcla y paradoja de Gibbs.

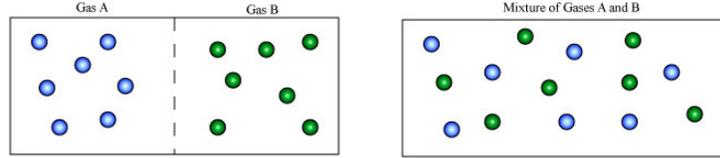


Figura 1: ¿Cuanto cambia la entropía del sistema al mezclar los gases?

- Entropía como ignorancia.

A. Área de una hiperesfera

- El área de S_1 es $2\pi R$. El área de S_2 es $4\pi R^2$, en general tenemos:

$$a(S_n) = n\gamma_n R^{n-1} \quad (15)$$

- Primero calcularemos el volumen de una hiperesfera: $v(S_n) = \gamma_n R^n$.
- La hiperesfera en n -dimensiones esta formada por pequeñas esferitas de $n-1$ -dimensiones. En la figura mostramos el caso de una esfera en 3D, que se forma de pequeñas esferas de 2D.
- El volumen de la esfera se puede evaluar sumando el volumen de todas esas esferas:

$$v(S_n) = \int_{-R}^R dh v(S_{n-1}, \sqrt{R^2 - h^2}) \quad (16)$$

$$= \int_{-R}^R dh \gamma_{n-1} \left(\sqrt{R^2 - h^2} \right)^{n-1} \quad (17)$$

$$= R^n \gamma_{n-1} \int_{-1}^1 du (1 - u^2)^{\frac{n-1}{2}} \quad (18)$$

$$= R^n \gamma_{n-1} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \quad (19)$$

de esta última expresión podemos establecer la relación de recurrencia:

$$\gamma_n = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \gamma_{n-1} \quad (20)$$

que se resuelve fácilmente:

$$\gamma_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \quad (21)$$

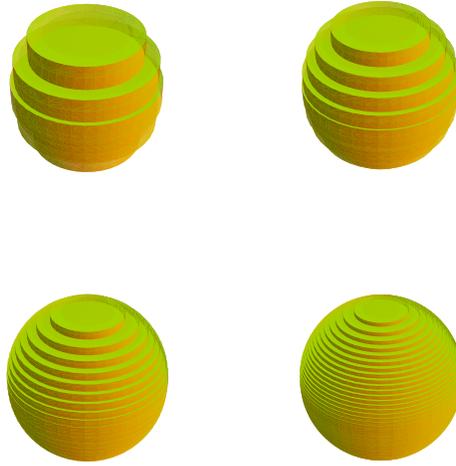


Figura 2: Partición de una hipersfera en N dimensiones en pequeñas hipersferas en $N - 1$ dimensiones.

B. Problemas

- Considere un gas ideal compuesto de N partículas indistinguibles sujeto al confinamiento producido por un potencial externo de tipo armónico. El Hamiltoniano de dicho gas es:

$$H(p, q) = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega_0^2 \vec{q}_i^2 \quad (22)$$

donde N es el número de partículas y ω_0 es la frecuencia asociada a la oscilación en el potencial de confinamiento. Determine la entropía de dicho gas en función de su energía y use dicha relación para encontrar la relación $E = E(T)$ y el calor específico.

- En diversas aplicaciones científicas y tecnológicas es necesario contar con condiciones de vacío extremas. Cuando la presión de una cámara de vacío alcanza valores tan pequeños como $\sim 10^{-7}$ Pa se dice que el sistema entro en un regimen de ultra alto vacío (UHV). Para una cámara de ultra alto vacío a temperatura ambiente estime:
 - el número de partículas contenidas en un litro, y
 - el camino libre medio de las partículas de gas.