Universidad de San Carlos de Guatemala
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Mecánica Estadística
Diego Sarceño 201900109
21 de marzo de 2022

Tarea 2

1. Problema 1

Teniendo

$$S = -k_B \sum_{k=1}^{k} p_i \ln p_i,$$

sujeto a

$$\sum_{k=1}^{k} p_i = 1, \qquad \sum_{k=1}^{k} p_i E_i = \varepsilon.$$

Para maximizarlo, utilizamos los multiplicadores de Lagrange, definimos la función $F(p_1, \ldots, \lambda_i, \ldots)$, como

$$F(p_1, \ldots, \lambda_i, \ldots) = S - \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^{k} p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{i=1}^{k} p_i E_i - \varepsilon \right),$$

de modo que

$$F = -k_B \sum_{k=1}^{k} p_i \ln p_i - \lambda_1 \left(\sum_{i=1}^{k} p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left(\sum_{i=1}^{k} p_i E_i - \varepsilon \right).$$

Tomando las derivadas parciales respecto a cada una de las probabilidades p_i, entonces

$$\frac{\partial F}{\partial p_k} = -k_B(\ln p_k - 1) - \lambda_1 - \lambda_2 E_k = 0$$
$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_1} = \sum_{i=1}^{k} p_i - 1 = 0$$
$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_2} = \sum_{i=1}^{k} p_i E_i - \varepsilon = 0.$$

Para poder factorizar el k_B, tomamos el siguiente cambio de parámetros $\lambda_1 = k_B\alpha$ y $\lambda_2 = k_B\beta$. En donde α es adimensional y $[\beta] = 1/J$. Con esto, llegamos a la relación

$$-k_B(\ln p_i + 1 + \alpha + \beta E_i) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \ln p_i = -(1 + \alpha) - \beta E_i,$$

dado esto introducimos la función de partición

$$\mathfrak{z} = e^{1+\alpha} \qquad \Rightarrow \qquad p_i = \frac{1}{\mathfrak{z}} e^{-\beta E_i},$$

pero sabemos que $\sum_{i=1}^{k} p_i = 1$, sustituyendo se obtiene la definición de función de partición, con el nuevo parámetro $T = 1/k_B\beta$ $([T] = K)$

$$\mathfrak{z}(\beta) = \sum_{i=1}^{k} e^{-\frac{-E_i}{k_B T}} \tag{1}$$

2. Problema 2

Sabiendo que el valor esperado de la energía es $\langle E_i \rangle = \varepsilon$, entonces tomando la función de partición y derivando la respecto a β

$$\frac{\mathrm{d}\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta} = \sum_{i=1}^{k} -E_i e^{-\beta E_i},$$

multiplicando y dividiendo entre la función de partición se tiene

$$\frac{1}{\mathfrak{z}}\frac{\mathrm{d}\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta} = -\sum_{i=1}^{k} p_i E_i = -\varepsilon.$$

Por regla de la cadena

$$\frac{\mathrm{d}\ln\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta} = \frac{\mathrm{d}\ln\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\mathfrak{z}}\frac{\mathrm{d}\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta} = \frac{1}{\mathfrak{z}}\frac{\mathrm{d}\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta}.$$

$$\boxed{\frac{1}{\mathfrak{z}}\frac{\mathrm{d}\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta} = -\varepsilon}$$

3. Problema 3

Tomando la entropía

$$S = -k_B \sum_{i=1}^{k} p_i \ln p_i,$$

sustituyendo la probabilidad definida como

$$\ln p_i = -\beta E_i - \ln\mathfrak{z}.$$

Sustituyendo en la ecuación de entropía se tiene

$$S = k_B\beta \underbrace{\sum_{i=1}^{k} p_i E_i}_{\varepsilon} + k_B \ln\mathfrak{z} \underbrace{\sum_{i=1}^{k} p_i}_{1},$$

entonces

$$S = k_B(\beta\varepsilon + \ln\mathfrak{z}) \tag{2}$$

4. Problema 4

a) Dado que tenemos 7 sabores y queremos un helado de 4 bolas en el que el orden importa es tenemos una disposición $n^k = 7^4 = 2401$.

b) Si el orden no importa, para el mismo conjunto de datos $P_7^4 = \frac{n!}{(n-k)!} = 840$.

5. Problema 5

Es el mismo problema que el anterior.

6. Problema 6

La cantidad de microestados esta dada por

$$\Omega = \frac{n!}{n_1! \cdots n_k!}. \tag{3}$$

a) Para los 7 en $B2$ $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6) = (0, 7, 0, 0, 0, 0)$. Entonces, utilizando (3) con $k = 6$ (número de bares), se tiene que la cantidad de microestados es $\Omega = 1$. El cual es un microestado admisible.

b) Para $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6) = (2, 2, 1, 1, 1, 0)$, calculando el número de microestados: $\Omega = 1260$ microestados, los cuales son admisibles.

c) Para $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6) = (2, 1, 3, 0, 0, 1)$. Calculando el número de microestados: $\Omega = 420$, los cuales son admisibles.

d) Para $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6) = (2, 1, 1, 1, 1, 1)$. Calculando el número de microestados $\Omega = 2520$, los cuales no son admisibles.

e) Dada la entropía $S = k_B \ln \Omega$, la distribución con microestados admisibles que generan la entropía máxima es la c).