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

Tarea 2

1. Problema 1

Para un volumen (V) dado y temperatura (T) constante, suponiendo las siguientes constantes: número de atomos $n = N_A N$ con N número de moles. Con esto, la idea es encontrar la función de partición

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

donde $E_i = E(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ es lo que queremos encontrar, donde dicha energía representa la energía cinética, entonces

$$E(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}.$$

Dado que estamos trabajando con variables continuas, la sumatoria pasa a ser una integral, entoncse se tiene

$$\mathfrak{z}(\beta) = \frac{1}{h^3} \iiint_V \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\, \mathrm{d}p_x\, \mathrm{d}p_y\, \mathrm{d}p_z\, e^{-\beta\left(\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}\right)},$$

las integrales respecto a la posición representan el volumen; además, para cada una de las componentes del momentum se tiene una integral igual (con diferentes variables mudas), entonces, la función de partición queda como

$$\mathfrak{z}(\beta) = \frac{V}{h^3} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_x\, e^{-\frac{\beta p_x^2}{2m}} \right)^3.$$

Para resolver la integral se utiliza una propiedad de la función gamma

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \tau^n e^{-a\tau^k} = \frac{\Gamma(\frac{n+1}{k})}{k a^{\frac{n+1}{k}}}.$$

Dada dicha propiedad y que la integral anterior es de una función par, se encuentra cada una de las constantes en la propiedad y se reduce en

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_x\, e^{-\frac{\beta p_x^2}{2m}} = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}}.$$

Entonces, la función de partición es

$$\boxed{\mathfrak{z}(\beta) = \frac{V}{h^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{3/2}}.$$

2. Problema 2

Desde la mecánica cuántica no podemos dar la posición y el momentum de una partícula. Las partículas obedecen la ecuación de schrodinger, dado que es un gas ideal $V(\vec{r})=0$, entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Los estados en el gas ideal los vamos a dar por su momentum.

$$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$$

es la solución de la ecuación de schrodinguer, sustituímos en la ecuación

$$E=\frac{p^2}{2m}.$$

Dada la solución es claro que se forman ondas estacionarias cuyos estados están discretizados

$$p_{n_x}=\frac{n_x\hbar\pi}{L},$$
$$p_{n_y}=\frac{n_y\hbar\pi}{L},$$
$$p_{n_z}=\frac{n_z\hbar\pi}{L}.$$

Entonces, calculando la función de partición $p^2=\frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}(n_x^2+_y^2+n_z^2)$

$$\mathfrak{z}(\beta)=\sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_z=0}^{\infty}e^{-\frac{\beta\hbar^2\pi^2}{2mL^3}(n_x^2+_y^2+n_z^2)}.$$

A pesar de estar discretizada, tomamos un espacio (n_x,n_y,n_z), entonces $\mathrm{d}n_x\,\mathrm{d}n_y\,\mathrm{d}n_z = n^2\sin\theta\,\mathrm{d}n\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$ con $n^2=n_x^2+_y^2+n_z^2$. Integrando en coordenadas esféricas

$$\mathfrak{z}(\beta)=\int_0^\infty \mathrm{d}n\,n^2e^{-\frac{\beta\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2}}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\mathrm{d}\phi\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,,$$

utilizando la fórmula del problema anterior

$$\mathfrak{z}(\beta)=\frac{\pi^{3/2}}{8\left(\frac{\beta\hbar^2\pi^2}{2mV}\right)^{3/2}},$$

$$\boxed{\mathfrak{z}(\beta)=\frac{V}{\hbar^3}\left(\frac{m}{2\pi\beta}\right)^{3/2}.}$$

3. Problema 3

Para el valor esperado de la energía derivamos respecto a β el $\ln\mathfrak{z}$

$$\frac{\mathrm{d}\ln\mathfrak{z}}{\mathrm{d}\beta}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left(\ln V-3\ln\hbar+\frac{3}{2}\ln 2m\pi-\frac{3}{2}\ln\beta\right)=-\frac{3}{2\beta},$$

entonces

$$\boxed{\varepsilon=\frac{3}{2}k_BT.}$$

4. Problema 4

En otras tareas se demostró que

$$S = k_B\beta\left(\varepsilon + \frac{\ln \mathfrak{z}}{\beta}\right).$$

Sustituyendo la función de partición

$$\boxed{S = \frac{3}{2}k_B + k_B \ln\left(\frac{V}{h^3}\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2}\right)}$$

5. Problema 5

Partimos de la probabilidad definida por la función de partición

$$p_i = \frac{e^{-\frac{\beta}{E_i}}}{\mathfrak{z}} = f(p)$$

donde ahora es una función de probabilidad. Integrando respecto a las tres componentes del momento se tiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_x\,\mathrm{d}p_y\,\mathrm{d}p_z\, f(p) = \frac{h^3}{V},$$

a esto se llega utilizando las relaciones de los incisos anteriores. Pasando a coordenadas esféricas se tiene

$$\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}p \sin\theta p^2 f(p) = \frac{h^3}{V},$$

realizando la integral se tiene

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}p\, 4\pi p^2 \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} = 1,$$

entonces la función de probabilidad es

$$\boxed{g(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\beta}{m}\right)^{3/2} p^2 e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}}$$

6. Problema 6

La moda es el punto máximo de la función de probabilidad

$$\frac{\mathrm{d}g(p)}{\mathrm{d}p} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\beta}{m}\right)^{3/2}\left(2p - \frac{p^3\beta}{m}\right)e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} = 0,$$

de modo que la moda es

$$\boxed{p = \sqrt{\frac{2m}{\beta}}.}$$

El valor esperado del momentum es

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}p\, p g(p) = \frac{2m^2}{\beta^2}$$

utilizando la fórmula dada de la función gamma.

$$\boxed{\langle p\rangle = 2k_B^2 m^2 T^2}$$

7. Problema 7

Para la velocidad se toma la distribución y un factor boltzmann, de modo que

$$f(v) \propto v^2 e^{-\frac{\beta m v^2}{2}},$$

entonces, encontrando la constante de "normalización" para que la integral de la función sea 1, por lo tanto, la densidad de probabilidad es

$$\boxed{f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\beta m)^{3/2} v^2 e^{-\frac{\beta m v^2}{2}}.}$$

8. Problema 8

Derivando para encontrar la moda

$$\frac{\mathrm{d}f(v)}{\mathrm{d}v} = 0 \qquad \boxed{v = \sqrt{\frac{2}{\beta m}}.}$$

Ahora encontramos el valor esperado de la velocidad

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}v\, v f(v) \qquad \boxed{\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8}{\pi \beta m}}}$$

9. Problema 9

Para la energía cinética tenemos

$$g(p)\,\mathrm{d}p = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\beta}{m}\right)^{3/2} p^2 e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\beta}{m}\right)^{3/2} e^{-\beta K} \frac{m}{\sqrt{2mK}} 2mK\,\mathrm{d}K\,,$$

simplificando, tenemos la función densidad

$$\boxed{h(K) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\beta^{3/2}\sqrt{K}e^{-\beta K}.}$$

10. Problema 10

Encontramos la moda encontrando donde está el máximo de la función

$$\frac{\mathrm{d}h(K)}{\mathrm{d}K} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\beta^{3/2}\left(\frac{1}{2\sqrt{K}} - \beta\sqrt{K}\right)e^{-\beta K} = 0,$$

entonces

$$\boxed{K = \frac{\beta}{2}.}$$

Encontrando el valor esperado

$$\langle K \rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}K\, K h(K) = \frac{3}{2\beta}.$$

$$\boxed{\langle K \rangle = \frac{3}{2}k_B T}$$