Tomas Ricardo Basile Álvarez
316617194

Examen 1 Física Estadística

1) En la red cristalina un átomo puede saltar de un sitio a uno vecino cada τ segundos. Las probabilidades de transición son p a la derecha y $q = 1-p$ a la izquierda.

a) Calcule la posición promedio $\bar{x}$ al tiempo $t = N\tau$ cuando $N >> 1$

Este es básicamente un problema de caminante aleatorio en el que el átomo es nuestro caminante y tiene proba p de caminar a la derecha y proba $q = 1-p$ de hacerlo a la izquierda.

Despues de $t = N\tau$ segundos, el átomo ha dado un total de N pasos con $n_1 + n_2 = N$

Ahora bien, veamos cuál es la probabilidad de dar n_1 pasos a la derecha y n_2 a la izq.

Cada paso a la derecha tiene una proba. p de suceder y cada paso a la izquierda una proba q. Como la dirección de cada paso es independiente de las anteriores, estas probabilidades se multiplican. Por lo que la probabilidad de dar n_1 pasos a la derecha y n_2 a la izquierda es

$$\underbrace{p \cdot p \cdot p \cdots p}_{n_1 \text{ veces}} \cdot \underbrace{q \cdot q \cdots q}_{n_2 \text{ veces}} = p^{n_1} q^{n_2} = \underline{p^{n_1} (1-p)^{N-n_1}} \quad \text{pues } n_1 + n_2 = N$$

Pero esto contempla sólo una de muchas formas en las que se pueden dar n_1 pasos a la derecha y $N - n_1$ a la izquierda. Para calcular el número de formas de realizar estos pasos, notamos que de los N que se harán, podemos escoger cuáles n_1 de ellos serán a la derecha. Escoger n_1 elementos de un grupo de N se puede hacer de $C^N_{n_1}$ formas distintas. Por lo que para la proba. total, hay que multiplicar la proba $p^{n_1} (1-p)^{N-n_1}$ de hacer un recorrido particular por el número de formas de escoger los n_1 pasos a la derecha

$$\rightarrow P(n_1) = C^N_{n_1} p^{n_1} q^{N-n_1} = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} (q)^{N-n_1}$$

Proba de dar n_1 pasos a la derecha

Para calcular la cantidad promedio de pasos a la derecha $\langle n_1 \rangle$ debemos de obtener el valor medio de esta variable aleatoria, que se define como

$$\langle n_1 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} n_1 P(n_1) \quad \leftarrow \text{Def. de promedio}$$

$$= \sum_{n_1=0}^{N} n_1 \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

Esta suma se puede resolver con ciertos pasos y trucos. Sin embargo, como nos dicen que $N \gg 1$, podemos cambiar la distribución de probabilidad binomial que obtuvimos por una Gaussiana

En clase vimos que si tenemos una distribución binomial como

$$P(n_1) = \frac{N!}{n_1!\,(N-n_1)!}\, p^{n_1} q^{N-n_1}$$

y tenemos $\underline{N \gg 1}$ entonces dicha distribución se puede cambiar por una Gaussiana:

$$P(n_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, e^{-\frac{(n_1-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

En la que como vimos en clase, $\underline{\mu = \langle n_1 \rangle = Np}$ es el promedio de n_1 y varianza $\sigma^2 = Npq$

Ahora calculamos el promedio de pasos a la izquierda:

$$\langle n_2 \rangle \underset{\text{pues } n_2 = N - n_1}{=} \langle N - n_1 \rangle \underset{\text{la esperanza es lineal}}{=} \langle N \rangle - \langle n_1 \rangle \underset{N \text{ es cte}}{=} N - Np = \underline{N(1-p)}$$

Pero no hemos acabado, lo que se nos pide es la posición promedio no el número de pasos a la derecha promedio. La posición final es $X = (n_1 - n_2)a$ (pasos a la derecha menos pasos a la izquierda, multiplicado por la cantidad de pasos.

Entonces, su promedio es $\langle x \rangle = \langle (n_1 - n_2) a \rangle \overset{\text{la esperanza es lineal}}{=} a\langle n_1 - n_2 \rangle = a\langle n_1 \rangle - a\langle n_2 \rangle$

$$
\begin{aligned}
&= a(Np) - a(N(1-p)) \\
&= aNp - aN + aNp \\
&= 2aNp - aN \\
&= aN(2p-1) \\
&= \underline{aN(p-q)} \quad \leftarrow \text{pues } p - q = p - (1-p) = 2p - 1
\end{aligned}
$$

b) Calcule $\langle (x-\bar{x})^2 \rangle$ al tiempo t.

En tiempo t al igual que antes, hemos dado N pasos totales.
Desarrollamos la expresión $\langle (x-\bar{x})^2 \rangle$:

$$\langle (x-\bar{x})^2 \rangle = \langle (a(n_1-n_2) - \overline{a(n_1-n_2)})^2 \rangle$$ ← usamos que $x = a(n_1-n_2)$ como habíamos visto antes.

$$= \langle (a(2n_1-N) - \overline{a(n_1-n_2)})^2 \rangle$$ ← ya que $n_2 = N - n_1$
$\Rightarrow n_1 - n_2 = n_1 - (N - n_1) = 2n_1 - N$

$$= \langle (a(2n_1-N) - aN(2p-1))^2 \rangle$$ ← $\overline{a(n_1-n_2)}$ es el promedio que calculamos el inciso pasado y llegamos a $aN(p-q) = aN(2p-1)$

$$= \langle (2n_1a - \cancel{Na} - 2Npa + \cancel{aN})^2 \rangle$$

$$= \langle (2n_1a - 2Npa)^2 \rangle$$

$$= \langle a^2(2n_1 - 2Np)^2 \rangle$$ factorizamos

$$= \langle 4a^2(n_1-Np)^2 \rangle$$

$$= 4a^2 \langle (n_1-Np)^2 \rangle$$ ← porque $\langle \cdot \rangle$ es lineal

$$= 4a^2 \underbrace{\langle (n_1-\bar{n}_1)^2 \rangle}$$ ← pues $\bar{n}_1 = Np$ como vimos antes

Esto es la varianza de n_1 por definición. Pero vimos que n_1 se comportaba como una Gaussiana de ~~...~~ varianza Npq usando la aproximación que vimos en clase.

$$\therefore \langle (x-\bar{x})^2 \rangle = 4a^2(Npq)$$

$$= \underline{4a^2Np(1-p)}$$

2. Gas ideal monoatómico aislado a temp. T. $U = \frac{3}{2} NKT$

a) Calcule su entropía $S(U, N)$

Sabemos que $\underbrace{\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,N}}$ (1) en la representación de la entropía de un sistema aislado.

Despejamos $\frac{1}{T}$ de la ecuación calórica $\rightarrow \frac{1}{T} = \frac{\frac{3}{2} NK}{U}$

Entonces, sustituyendo en (1) tenemos:

$$\frac{3}{2} \frac{NK}{U} = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,N}$$

$$\rightarrow \frac{3}{2} \frac{NK}{U} dU = \frac{\partial S}{\partial U} dU \quad \leftarrow \text{multiplicamos por } dU$$

Ahora integramos desde un estado con energía U_1 arbitrario a uno de energía U

$$\rightarrow \int_{U_1}^{U} \frac{3}{2} \frac{NK}{U} dU = \int^{U_1} \frac{\partial S}{\partial U} dU$$

$$\Rightarrow S(U) = \int \frac{\partial S}{\partial U} dU$$

$$= \int \frac{3}{2} \frac{NK}{U} dU = \frac{3}{2} NK \ln(U) + C \quad \leftarrow \text{con } C \text{ una cte de integración}$$

$$= \frac{3}{2} NK \ln(U) + NK\ln(D) \quad \leftarrow \text{con } D \text{ otra cte definida por } C \equiv NK\ln(D)$$

$$= NK \ln(U^{3/2}) + NK \ln(D) = NK \ln(D U^{3/2})$$

$$= \underline{K \ln(A U^{3N/2})} \quad \leftarrow \text{con } A \text{ una cte } A \equiv D^N$$

Es decir, S va del orden de $\ln(U^{3N/2})$

2. Para U fija, determine Ω.

Como U es fija usamos el microcanónico que nos dice que (por el principio de Boltzmann) $S(U,N) = k_B \ln(\Omega(U,N))$

$$\Rightarrow \Omega = e^{S/k_B}$$

$$\Rightarrow \Omega = e^{\frac{\cancel{K}\ln(AU^{3N/2})}{\cancel{K}}} \quad \leftarrow \text{por el resultado a)}$$

$$= e^{\ln(AU^{3N/2})}$$

$$= \underline{AU^{3N/2}} \qquad \therefore \Omega \text{ crece como } U^{3N/2}$$

i) Calcule $\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}$ y su signo:

llegamos a que $\underline{S = K \ln(AU^{3N/2})}$, en el inciso a)

$= K\ln(A) + \frac{3N}{2}\ln(U)$ ← Escribimos así para derivar más fácil.

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_N = \frac{\partial}{\partial U}\left(K\ln(A) + \frac{3NK}{2}\ln(U)\right)$$

$$= 0 + \frac{3N}{2}\frac{1}{U}$$

$$= \frac{3Nk}{2}\frac{1}{U}$$

usamos este resultado

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}\right)_N = \frac{\partial}{\partial U}\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right) = \frac{\partial}{\partial U}\left(\frac{3Nk}{2}\frac{1}{U}\right)$$

$$= \frac{3Nk}{2}\frac{\partial}{\partial U}\left(\frac{1}{U}\right)$$

$$= -\frac{3Nk}{2}\frac{1}{U^2}$$

$$= -\frac{3Nk}{2U^2}$$

Que podemos reescribir como (usando $U = \frac{3}{2}NKT$)

$$\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} = -\frac{3Nk}{2U^2} = \frac{-3Nk}{2\left(\frac{3}{2}NKT\right)^2} = -\frac{3Nk}{2\left(\frac{3}{2}\right)^2 N^2K^2T^2}$$

$$= -\frac{2}{3NKT}$$

Como $T > 0$ para un gas ideal, vemos que $\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}$ es negativa siempre.

∴ $S(U)$ es cóncava hacia abajo 

3. N partículas distinguibles. Cada partícula tiene dos estados $\varepsilon = 0$, $\varepsilon = 2\mu H$ (H es el campo mag)

a) Si n es el número de partículas en el estado excitado, escriba $S(n)$ y bosqueje su gráfica.

El macroestado del sistema tiene una energía total E que está fija

Sea n el número de partículas en el estado $\varepsilon = 2\mu H$ y n_2 las que están en el estado $\varepsilon = 0$

Donde $n_1 + n_2 = N \rightarrow n_2 = N - n_1$

Entonces, la energía total del sistema es $n(2\mu H) + n_2(0)$

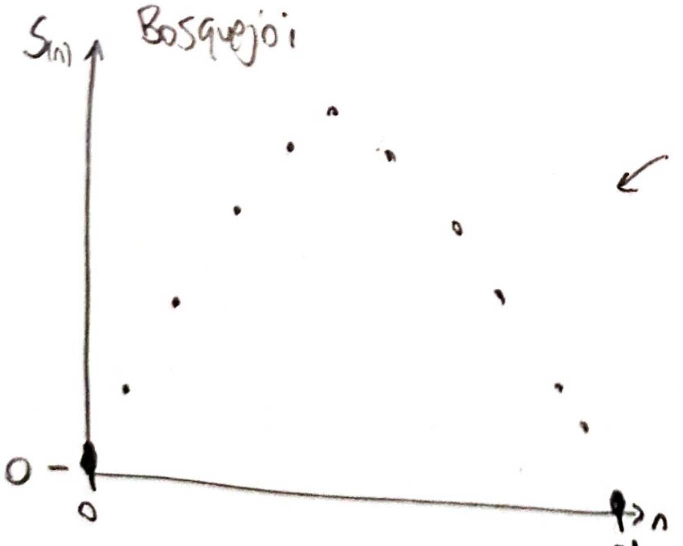
$= 2n\mu H$ ← Para cierta n fija, E es cte.

Para calcular la entropía, usaremos el conjunto microcanónico (← porque E es fija) y en particular el postulado de Boltzmann $S = k_B \ln \Omega$

Ω es el número de microestados compatibles. Contabilizarlos es fácil pues cada microestado corresponde a una elección de cuáles serán las n partículas excitadas. Y escoger éstas n partículas de entre N se puede hacer de C_n^N formas. $\therefore$ $\Omega(n) = C_n^N = \dfrac{N!}{n!(N-n)!}$

Entonces, por postulado de Boltzmann: $S(n) = k_B \ln\left(\dfrac{N!}{n!(N-n)!}\right)$

Bosquejo:



Si $n=0$, hay una sola forma de escoger n partículas y lo mismo para $n=N$ ← $\therefore$ $S(N) = S(0) = k_B \ln(1) = 0$

Para $0 \leq n \leq N$, $S(n)$ tiene que ir creciendo y luego bajar para que $S(N)$ sea 0 (Tomando en cuenta que $S(n) \geq 0$) por eso se ve así. Luego ubicaremos el máximo.

b) Utiliza la primera aprox. de Stirling y encuentra el máximo de $S(n)$

$$S(n) = k_B \ln\left(\frac{N!}{n!\,(N-n)!}\right)$$ ← inciso a)

$$= k_B\left[\ln N! - \ln(n!) - \ln(N-n)!\right]$$ ← propiedades del logaritmo

$$= k_B\left\{N\ln N - \cancel{N} - n\ln(n) + \cancel{n} - (N-n)\ln(N-n) + \cancel{N} - \cancel{n}\right]$$ ← usamos que $\ln(n!) \approx n\ln(n) - n$ ← Stirling para cada logaritmo

$$= k_B\left[N\ln N - n\ln(n) - (N-n)\ln(N-n)\right]$$

Para encontrar el máximo de $S(n)$, derivamos e igualamos a 0:

$$\frac{dS}{dn} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dn}\left(k_B\left[N\ln N - n\ln(n) - (N-n)\ln(N-n)\right]\right) = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{d}{dn}\left(n\ln(n)\right) - \frac{d}{dn}\left((N-n)\ln(N-n)\right) = 0$$ ← omití los términos que no dependen de n y pasé la k del otro lado

$$\Rightarrow -\left[n\left(\frac{1}{n}\right) + (1)\ln(n)\right] - \left[(N-n)\left(\frac{-1}{N-n}\right) + (-1)\ln(N-n)\right] = 0$$

$$\Rightarrow \cancel{-}\left[\cancel{1} + \ln(n)\right] - \left[\cancel{-1} - \ln(N-n)\right] = 0$$

$$\Rightarrow -\ln(n) + \ln(N-n) = 0$$

$$\Rightarrow \ln(n) = \ln(N-n) \Rightarrow n = N-n \Rightarrow 2n = N \Rightarrow \underline{n = N/2}$$

Es decir, S es máxima cuando $n = N/2$

c) considera ε una variable continua muestre que el sistema puede tener temp negativas.

la Energía total es $E = n\varepsilon$ con $\varepsilon = 2\mu H$.

En el inciso anterior vimos que S es máxima cuando $n = N/2$, es decir, cuando $E = \frac{N}{2}\varepsilon$.

Que S sea máxima significa que si aumentamos un poco la energía E (lo cual podíamos hacer aumentando el valor de n), la entropía tiene que bajar (para que S sea verdaderamente máxima en $n = N/2$)

Esto quiere decir que la derivada de S con respecto a E es negativa si $n > N/2$ (pues en este caso, si E aumenta S disminuye como dijimos)

$\therefore \frac{\partial S}{\partial E} < 0$

Pero sabemos que $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ $\therefore \frac{1}{T} < 0 \Rightarrow \underline{T < 0}$

El sistema puede tener ~~negt~~ Temperatura negativa.

d) ¿Por qué es posible tener temperaturas negativas para este sistema y no para un gas?

Para este sistema la energía de una partícula tiene un límite superior $\varepsilon = 2\mu H$ y el sistema completo tiene una energía límite superior $E = N\varepsilon$ cuando todos están excitados.

Pero en este límite superior, la cantidad de microestados es 1 (el microestado con todos excitados) y entonces aquí $S = 0$.

Por lo tanto S en función de E tiene que valer cero cuando $E = N\varepsilon$ pero también cuando $E = 0$ (todas las partículas no excitadas) ~~y la única~~ y considerando que $S(E) > 0 \ \forall E$, estas condiciones implican que $S(E)$ debe de ser decreciente en algún momento, lo que implica que $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} < 0$ en ese momento.

Esto no pasa en un gas porque las energías no están limitadas y S en función de E es entonces siempre creciente.