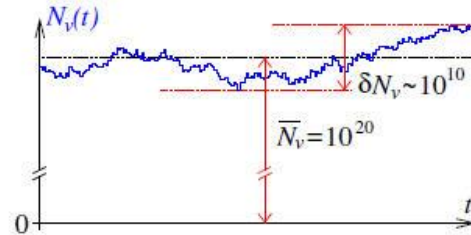
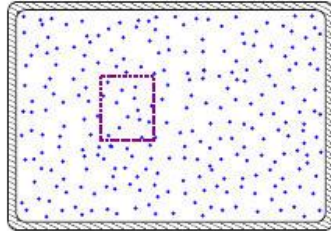


Sistema aislado en equilibrio macroscópico

En un sistema aislado con parámetros fijos ($E, N, V, \dots$), si analizamos el # de partículas en un volumen v ,



Descripción de un estado

1. Descripción clásica: por el conjunto de posiciones y momentos lineales de las partículas, i.e., es un punto en el espacio de fases:

$$(r_1, \dots, r_N; p_1, \dots, p_N) \equiv \Gamma \text{ espacio de fases}$$

La evolución del sistema consiste en determinar la trayectoria $\Gamma(t)$ resolviendo las ecuaciones de movimiento.

$\rho(\Gamma) d^{6N}\Gamma$ es la probabilidad de encontrar al sistema en el elemento de volumen $d^{6N}\Gamma$ alrededor de Γ .

Satisface la condición de normalización $\int \rho(\Gamma) d^{6N}\Gamma = 1$

2. Descripción cuántica: es un vector de estado, elemento del espacio de estados cuánticos (espacio de Hilbert $\mathcal{H}$)

$$|\psi_l\rangle \in \mathcal{H}$$

donde l denota al conjunto de números cuánticos

La noción de macroestados corresponde a doner el conjunto de probabilidades de ocupación de los microestados: $\{P_l\}$

con $\sum_l P_l = 1$

3. Contar microestados: densidad de estados

La probabilidad de ocupación de un microestado l es una función de su energía.

Densidad de estados: $\rho(E) dE = \#$ de microestados en $[E, E+dE]$

$$\rho(E) = \sum_l \delta(E - E_l)$$

1. Espacio de fases

- Un sistema de N partículas está caracterizado por $3N$ componentes de posiciones, $\{q_i\}_{i=1,\dots,3N}$ y por $3N$ componentes de momento lineal, $\{p_i\}_{i=1,\dots,3N}$.
- El *espacio de fases* es el espacio de dimensión $6N$ con coordenadas $\{q_i, p_i\}_{i=1,\dots,3N}$
- La evolución del sistema está dada por las ecuaciones de Hamilton;

$$\dot{q}_i(t) = \frac{\partial H}{\partial p_i}(\{q_i(t), p_i(t)\})$$

$$\dot{p}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(\{q_i(t), p_i(t)\})$$

Dos trayectorias están representadas por dos líneas que no se intersectan.

- Microestado = punto en el espacio de fases
- Macroestado = densidad de probabilidad $\rho(\{q_i, p_i\})$ en el espacio de fases.

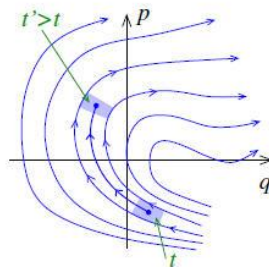


FIGURE 3.2 : Théorème de Liouville. On a représenté des trajectoires physiques dans l'espace des phases. L'évolution temporelle conserve le volume dans l'espace des phases, i.e. les deux volumes hachurés, représentant un ensemble de microétats à deux instants de leur évolution, sont égaux.

Ejemplo: estudiar la trayectoria en el espacio de fases de un oscilador armónico.

POSTULADOS DE LA FISICA ESTADISTICA

- I. Todos los micro-estados accesibles a un sistema aislado en equilibrio son equiprobables. Si $\Omega(E)$ es el número de microestados accesibles, la probabilidad de que esté en un microestado dado es $1/\Omega(E)$.

II. Hipótesis ergódica

El valor promedio en el tiempo de cualquier parámetro es igual al valor promedio de éste parámetro tomado sobre un conjunto de sistemas.

Ejemplo: lanzar un dado N veces o N dados una vez.

Ejemplo: en mecánica clásica, sistema de N partículas.

Consideremos un parámetro $y(q_i(t), p_i(t))$, el promedio en el tiempo es:

$$\langle y \rangle_t = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} y(t') dt'$$

Consideremos un conjunto $\{\varepsilon\}$ de N sistemas al tiempo t. La media de la variable y, tomada sobre el conjunto $\{\varepsilon\}$ es:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i(t)$$

donde $y_i(t)$ es el valor de $y(t)$ para el sistema i.

El segundo postulado dice $\langle y \rangle_t = \langle y \rangle$.

En general, tendremos

$$\overline{A}^{(T)} = \frac{1}{T} \int_0^T dt A(\{q_i(t), p_i(t)\})$$

$$\langle A \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int \prod_i dq_i dp_i \rho(\{q_i, p_i\}) A(\{q_i, p_i\})$$

$$\boxed{\lim_{T \rightarrow \infty} \overline{A}^{(T)} \stackrel{\text{hyp. ergod.}}{=} \langle A \rangle}$$

ENTROPIA

Tres interpretaciones:

1. Máquinas térmicas. Cuantifica la irreversibilidad de procesos de transformación (2da. Ley)
2. Termodinámica: la entropía es la variable conjugada de la temperatura y mide por tanto la agitación molecular.
3. Boltzmann tuvo la idea de definir la entropía a partir del número de configuraciones microscópicas que conducen al mismo estado macroscópico.

Existe un gran número de posibilidades de q , v , que dan los mismos valores de las cantidades observadas. Sea Ω éste número. Boltzmann (Planck) dedujo

$$S = k_B \ln \Omega$$

ENTROPIA ESTADÍSTICA

La distinción entre micro-estado y macro-estado hace referencia a la información de que se dispone sobre el sistema, ya sea toda la información necesaria que permita especificar el estado microscópico, ya sea la información parcial que especifique con que probabilidad son ocupados los micro-estados (conjunto de probabilidades $\{P\}$).

La llamada entropía estadística permite medir la falta de información ligada a la ocupación aleatoria de los microestados

$$S(\{P_m\}) = -k_B \sum_m P_m \ln P_m$$