

Termodinámica y Mecánica Estadística II

<http://quechua.fis.uncor.edu/termo2>

→ *aula virtual (moodle)*

(<https://www.famaf.unc.edu.ar/~gcas/termo2>)

- L. **Reichl**: “A Modern Course in Statistical Physics” (2^a o 4^a ed.)
- K. **Huang**: “Statistical Mechanics” (2^a ed.)

→ variables macroscópicas : valores medios (energía, magnetización, n° de partículas, etc.)

termodinámica ↔ relaciones entre esas magnitudes (nada microscópico)

mecánica estadística : propiedades macroscópicas a partir de física microscópica

↪ manipular grandes números de partículas → promedios eficientemente

contando configuraciones (por ejemplo para una dada energía)

Probabilidad (Reichl)

Permutación : arreglo de N objetos diferentes en un orden definido

$\hookrightarrow N!$: N posibilidades para 1^a alternativa, $(N - 1)$ para 2^a opción ...

$$N \cdot (N - 1) \cdot \dots \cdot 1 = N!$$

permutaciones tomando R objetos del conjunto de N elementos :

$$N \cdot (N - 1) \cdot \dots \cdot (N - R + 1) = \frac{N!}{(N - R)!} \quad (\text{distinguimos según el orden})$$

Combinación C_R^N : selección de R objetos sin importar el orden

$$\hookrightarrow C_R^N = \frac{N!}{(N - R)! R!} \equiv \binom{N}{R}$$

($R!$ descuenta configuraciones con iguales elementos y diferente ordenamiento)

n_1 elementos de tipo 1 , n_2 de tipo 2 , ... , n_k de tipo k

$$\rightarrow \# \text{ permutaciones posibles: } \frac{N!}{n_1! n_2! \cdots n_k!} \quad \left(\sum_i^k n_i = N \right)$$

Probabilidad

Probabilidad : expectativa sobre el resultado de un experimento o “evento”

$\hookrightarrow$ resultado A con $P(A) : N$ experimentos idénticos $\rightarrow N P(A)$ con resultado A

$N \rightarrow \infty$: fracción de eventos con resultado $A \rightarrow P(A)$

n resultados igualmente probables , m corresponden al caso $A : P(A) = m/n$

espacio muestral : conjunto S con todos los resultados posibles de ese experimento

$\rightarrow$ evento plausible : subconjunto de S

unión de A y B ($A \cup B$) : todos los puntos de A o B (o a ambos)

intersección $A \cap B$: conjunto de todos los puntos de A y B simultáneamente

$A \cap B = \emptyset$ (ningún evento) $\Rightarrow A$ y B mutuamente excluyentes

Probabilidad

... con esta notación

$$P(\emptyset) = 0, \quad P(S) = 1$$

$P(A \cap B)$: ambos resultados $P(A \cup B)$: evento A o B (o ambos)

$$\hookrightarrow P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$$

$$A \text{ y } B \text{ mutuamente excluyentes} \rightarrow P(A \cup B) = P(A) + P(B)$$

si $A_1, A_2, \dots, A_m$ mutuamente excluyentes y *exhaustivos* ($A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_m = S$)

$\hookrightarrow \{A_j\}$ es una *partición* de S en m subconjuntos

$$\{A_j\} \text{ partición} \Rightarrow P(A_1) + P(A_2) + \dots + P(A_m) = 1$$

A y B eventos independientes si y sólo si $P(A \cap B) = P(A) P(B)$

OJO : $P(A)$ involucra $[A + \text{cualquier evento } B]$... lo mismo para B

Probabilidad

probabilidad condicional $P(B|A)$: resultado A dado que también **resultó** B

$$P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{\underbrace{P(B)}}_{\text{renormalización}}$$

$\leftrightarrow$ B espacio muestral

$$P(A \cap B) = P(B \cap A) \quad \Rightarrow \quad P(A) P(A|B) = P(B) P(B|A)$$

$$A \text{ y } B \text{ independientes} \quad \rightarrow \quad P(B|A) = P(A)$$

Variables aleatorias o estocásticas :

su valor se determina como resultado de un experimento

variable estocástica X puede tomar diferentes valores x_i (resultados posibles $\{x_i\}$)

Variables aleatorias o estocásticas

ejemplo : sortear 3 monedas $\rightarrow$ número de caras obtenidas es una variable estocástica X

resultados posibles : $x_i = 0, 1, 2, 3$ c/u con diferente probabilidad

X **no** tiene un valor prefijado $\rightarrow$ para determinarlo es necesario el “experimento”

$\hookrightarrow$ a lo sumo predecimos el resultado menos probable , o # caras en promedio
(características globales)

Variables estocásticas discretas

X puede tomar un conjunto numerable de valores $\{x_1, x_2, \dots\}$

$\rightarrow$ probabilidad $f(x_i)$ para cada x_i

distribución de probabilidades ≥ 0 y cumple condición de normalización $\sum_{x_i} f(x_i) = 1$

$f(x_i)$: toda la información posible sobre X

Variables estocásticas discretas

a menudo no puede determinarse $f(x_i)$ sino sus **momentos n -ésimos**

$$\langle X^n \rangle = \sum_i x_i^n f(x_i)$$

info. sobre la “forma” de $f(x_i)$ $\longleftrightarrow$

primer momento $\langle X \rangle \rightarrow$ *valor esperado* (valor medio)

segundo momento $\rightarrow$ **varianza de X** :

$$\text{var}(X) = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad \left(= \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle \right) \quad \text{(ejercicio)}$$

$\hookrightarrow$ **desviación estándar**

$$\sigma_X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2} \quad \left(= \sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle} \right)$$

(“ancho” de la distribución)

Variables estocásticas continuas

X toma valores continuos $\rightarrow$ distribución $f_X(x)$ debe ser continua a trozos

$$P(a \leq X \leq b) = \int_a^b dx f_X(x) \quad (\text{área bajo la curva } f_X(x))$$

$f_X(x)$: *densidad de probabilidad* de X , debe cumplir

$$f_X(x) \geq 0 \quad \text{y} \quad \int dx f_X(x) = 1 \quad (\text{normalización})$$

$$\rightarrow n\text{-ésimo momento :} \quad \langle X^n \rangle = \int dx x^n f_X(x)$$

$\hookrightarrow$ primer momento $\langle X \rangle \quad \Leftrightarrow$ valor medio (o valor esperado)

$\hookrightarrow$ desviación estándar σ_X a partir de primer y segundo momentos...

todos los momentos $\langle X^n \rangle \quad \Leftrightarrow$ conocimiento *completo* de $f_X(x)$

Variables estocásticas continuas

función característica

$$\phi_X(k) \equiv \langle e^{ikX} \rangle = \int dx e^{ikx} f_X(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n \langle X^n \rangle}{n!}$$

$f_X(x)$ transformada de Fourier de $\phi_X(k)$ ($\langle X^n \rangle$ pequeño para n grande)

$$\hookrightarrow f_X(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikx} \phi_X(k)$$

$\rightarrow$ **todos** los momentos $\langle X^n \rangle \Rightarrow$ conocimiento *completo* de $f_X(x)$ ✓

si conocemos $\phi_X(k)$,

$$\langle X^n \rangle = \frac{1}{i^n} \left. \frac{d^n \phi_X(k)}{dk^n} \right|_{k=0}$$

(puede resultar más fácil encontrar los momentos transformando $f_X(x)$ y derivando)

Variables estocásticas continuas

expansión de la función característica $\phi_X(k)$ en *cumulantes de orden n* $C_n(X)$

$$\phi_X(k) = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} C_n(X) \right]$$

necesitamos $f_Y(y)$ en términos de $Y = g(X)$ (otra variable estocástica) :

→ para cualquier función h debe coincidir $\langle h \rangle$ en términos de X o de Y ⇒

$$f_Y(y) = \int dx \, \delta(y - g(x)) f_X(x) \quad \text{(ejercicio)}$$

Probabilidades conjuntas

X e Y variables estocásticas sobre un espacio muestral S ,

$$X(S) = \{x_1, x_2, \dots\}, \quad Y(S) = \{y_1, y_2, \dots\} \quad \rightarrow \text{“espacio de probabilidades”}$$

$$X(S) \times Y(S) = \{(x_1, y_1), (x_1, y_2), \dots, (x_2, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_i, y_j), \dots\} :$$

$$\text{c/par ordenado } (x_i, y_j) \quad \leftrightarrow \quad \text{probabilidad conjunta } f(x_i, y_j) = P(X = x_i, Y = y_j)$$