

Mecánica Estadística - Introducción

Prof. Juan Mauricio Matera

06/03/2025

Introducción al curso

En su libro “States of Matter” [1], David Goodstein comienza su presentación con la siguiente frase:

Ludwing Boltzmann, quien dedicó gran parte de su vida estudiando mecánica estadística, murió en 1906 por su propia mano. Paul Ehrenfest, quien continuó con su trabajo, murió de manera semejante en 1933. Ahora es nuestro turno de estudiar mecánica estadística.

El curso de mecánica estadística es uno de los dos últimos cursos obligatorios del bloque de físicas teóricas de la Licenciatura en física. El objetivo central del curso es introducir los conceptos básicos que permiten conectar en forma rigurosa los modelos microscópicos de la estructura de la materia, presentados en los cursos de mecánica analítica, electromagnetismo y mecánica cuántica, con los fenómenos y propiedades “macroscópicas” de la materia, analizados en las físicas generales, el curso de física macroscópica, y las materias experimentales, por medio de conceptos de la teoría de probabilidades, presentados en el curso de matemáticas especiales II. Esto lleva implícito entonces un segundo objetivo del curso, que es el de lograr la integración de todos esos conceptos, como base para el estudio de problemas actuales, específicos de diferentes áreas de la física, que explorarán en los cursos optativos y en el desarrollo de sus trabajos de diploma. Intentaré además contextualizar el curso en la segunda década del sXXI, lo que implica conectar los contenidos del curso con problemas *actuales* de la física, sino también incorporar las técnicas de resolución elementales que hoy tenemos disponibles, que incluyen no sólo métodos analíticos de cálculo (lápiz y papel, tablas de integrales) sino también el uso de herramientas informáticas para tareas como hacer gráficos, buscar referencias, o realizar simulaciones computacionales.

El material del curso estará disponible en el aula virtual, que también será la vía para comunicarnos fuera del horario de clase. Como es la primera vez que dicto este curso, las notas de clase vendrán siempre después del dictado de la teoría, y estarán inevitablemente en estado de *borrador* por el momento. Estos *borradores* los estaré subiendo a la plataforma junto con el resto del material (prácticas, capítulos de libros, papers y códigos de ejemplo). Si bien la asistencia a las teorías no es obligatoria, a esta altura de la carrera los estudiantes comprendan el rol irremplazable del aula como espacio de discusión, pregunta, intercambio y aprendizaje.

Las clases teóricas consistirán de una presentación de un tema, combinando explicaciones en el pizarrón con alguna presentación “online” (beamer). La proporción de una y otra herramienta la iremos definiendo en función de lo que encontremos más productivo. Es importante remarcar, aunque también es algo que a esta altura seguro tengan presente, que la contemplación de un desarrollo matemático en el pizarrón no es en general suficiente para su aprendizaje: se espera que los estudiantes reproduzcan los resultados presentados por sus propios medios, y exploren ideas alternativas a las presentadas para alcanzar los resultados.

Respecto a las condiciones de aprobación, el curso tiene la modalidad de promoción por examen final, al que se accede una vez aprobados los trabajos prácticos. Para esto, deberán completar las guías de trabajos prácticos, y aprobar una evaluación parcial individual, en alguna de las tres instancias previstas en el cronograma. Los detalles sobre las características de ese examen y los criterios de evaluación serán explicadas por el JTP en el horario de los trabajos prácticos. En todo caso, les recomiendo que lean la Guía para resolver problemas en física que se encuentra disponible en el aula virtual.

Una vez aprobados los trabajos prácticos, podrán acceder a la instancia de evaluación final. Esta consiste en un examen oral, en el que expondrán sobre algún tema que los profesores que conformamos la mesa propongamos. Se espera que sean capaces de contextualizar el tema -en el programa de la materia, o en un problema concreto- y demostrar capacidad en el manejo de los conceptos básicos del curso, lo que involucra 1) plantear las cantidades involucradas con sus correspondientes unidades 2) identificar las escalas esperables para esas cantidades 3) expresar en lenguaje matemático las relaciones relevantes entre esas cantidades (ecuaciones, formas funcionales) y su relación con la situación a describir.

Temas del curso

El uso de modelos estadísticos para deducir propiedades macroscópicas a partir de modelos microscópicos comenzó a tomar su forma actual a partir de los trabajos de Boltzmann en los primeros años del siglo XX, previos a la formulación de la mecánica cuántica. En tiempos de Boltzmann, se contaba con un sólido formalismo para la termodinámica, pero no así con un modelo microscópico para la estructura de la materia bien establecido. Esto hizo que sus ideas fuesen difíciles de

aceptar por la comunidad científica de la época. La idea de que la enorme complejidad del mundo natural puede explicarse en términos de estructuras elementales, “simples” es muy antigua.

Sin embargo, recién para la segunda década del siglo XX se contó con evidencia experimental suficiente para establecer la hipótesis atómica como un “hecho científico”. En el proceso, el paradigma Newtoniano de un universo que funciona como un mecanismo de relojería, en un espacio fijo, evolucionando en forma determinista conforme avanza un tiempo absoluto, debió ser remplazado por unas recién nacidas teorías de la relatividad, y de la mecánica cuántica, para dar cuenta de esa evidencia experimental.

Si renunciar a la existencia de un espacio y tiempo absolutos representó ya algo difícil de asimilar, formular que a nivel fundamental no existía el determinismo era simplemente inaceptable. Sin embargo, para 1950 la teoría cuántica disponía ya de un sustento tanto formal como experimental, que la teoría de Boltzmann comenzaba a resultar no sólo natural, sino además demasiado conservadora.

Otra consecuencia de la teoría cuántica fue el desarrollo de la microelectrónica, y con ello de computadoras cada vez más poderosas. Esto significó no sólo la posibilidad de procesar grandes cantidades de datos, sino también de realizar simulaciones numéricas cada vez más complejas. Estas simulaciones llevaron a la observación práctica y al desarrollo de lo que hoy conocemos como “teoría del caos”, pero que ya había comenzado a intuirse también a principios de siglo: en sistemas no-lineales, una evolución “determinista” puede “amplificar” las incertezas en las condiciones iniciales, dando resultados prácticamente indistinguibles a los de una evolución no-determinista.

Comenzaremos entonces el curso con un repaso de las herramientas básicas de la teoría de probabilidades, e introduciremos algunos conceptos básicos sobre cómo modelar sistemas que evolucionan de forma no determinista. En el proceso, nos encontraremos con nociones que aprendimos desde el principio de la carrera, como el concepto de valor medio y sus propiedades, y otros más avanzados como el de entropía estadística o el de secuencias típicas. Veremos que en la aproximación del conteo de configuraciones posibles, surge naturalmente el concepto de entropía estadística. Aprovecharemos también para aprender algunas herramientas básicas para empezar a escribir pequeñas simulaciones en la computadora, a partir de ejemplos.

La siguiente estación en nuestro recorrido será un repaso sobre los conceptos básicos del formalismo de la termodinámica. Un aspecto fascinante de este formalismo es que prácticamente sobrevivió sin cambios al advenimiento de la relatividad y de la mecánica cuántica, ya que permite establecer relaciones entre propiedades de la materia sin hacer referencia a un modelo microscópico particular. A diferencia de la mecánica estadística, que intenta *deducir* modelos macroscópicos a partir de leyes fundamentales microscópicas, la termodinámica contruye modelos a partir de la observación de las propiedades macroscópicas, y condiciones de consistencia con el comportamiento típico de los sistemas -los sistemas tienden a estados de equilibrio, el calor fluye espontáneamente de los cuerpos más calientes a los más fríos- que se expresan en las “Leyes de la Termodinámica”. A partir de estas leyes, veremos cómo surgen naturalmente un conjunto de cantidades (variables de estado intensivas y extensivas, potenciales termodinámicos) cuyas expresiones explícitas pueden recuperarse del comportamiento macroscópico de los sistemas. Uno de los primeros éxitos de la mecánica estadística es el de poder *deducir* estas expresiones a partir de leyes microscópicas *deterministas*, sobre sistemas tratados de manera *estadística*.

Una particularidad de la termodinámica, -y es algo que la mecánica estadística intenta explicar- es la asimetría que existe entre el pasado y el futuro, de la que la mecánica Hamiltoniana no da cuenta:

The moving Finger writes; and having writ,
Moves on: nor all thy Piety nor Wit,
Shall lure it back to cancel half a line
Nor all thy Tears Wash out a word of it.

El dedo en movimiento escribe y, habiendo escrito,
sigue adelante: ni toda tu piedad ni tu ingenio,
lo inducirán a volver a borrar media línea,
ni todas tus lágrimas borrarán ni una palabra.

Omar Khayyám (by Edward Fitzgerald)

Humpty Dumpty sat on a wall.
Humpty Dumpty had a great fall.
All the king's horses and all the king's men
Couldn't put Humpty together again.

Humpty Dumpty se sentó en la pared.
Se resbaló y al suelo cayó!
Ni todos los caballos y hombres del rey
pudieron a Humpty recomponer.

Discutiremos también sobre este tópico, y sobre cómo está relacionado con el flujo de información entre las variables *locales* y sus *correlaciones*.

En este punto, comenzaremos a tratar los temas del curso propiamente dicho, con la presentación de la mecánica estadística formulada en el espacio de fases. Con esto, podremos recuperar la forma de los potenciales termodinámicos de sistemas simples, en el régimen clásico, no interactuante, a partir de argumentos puramente mecánico-estadísticos. Veremos casi inmediatamente que el tratamiento clásico lleva tanto a inconsistencias matemáticas como con los fenómenos observados, por lo que que la necesidad de una formulación en el marco de la mecánica cuántica se vuelve indispensable.

Sin embargo, la formulación de la mecánica cuántica en términos de estados puros resulta insuficiente. Por esto, le dedicaremos algún tiempo a revisar la extensión de von Neumann para la mecánica cuántica de sistemas abiertos. En este formalismo, veremos cómo recuperar potenciales termodinámicos que reproduzcan el comportamiento de gases diluïdos mono y poli-atómicos y de sistemas en estado sólido, haciendo énfasis en la importancia elegir los grados de libertad correctos para describir las propiedades estadísticas de los sistemas con interacciones. Finalmente, analizaremos las consecuencias de la indistinguibilidad cuántica en el comportamiento de gases a muy bajas temperaturas y densidades altas, y su relación con los fenómenos de condensación de Bose-Einstein, superconductividad y superfluidez, o la formación de las llamadas estrellas de neutrones, así como de las propiedades termodinámicas de los electrones en materiales conductores.

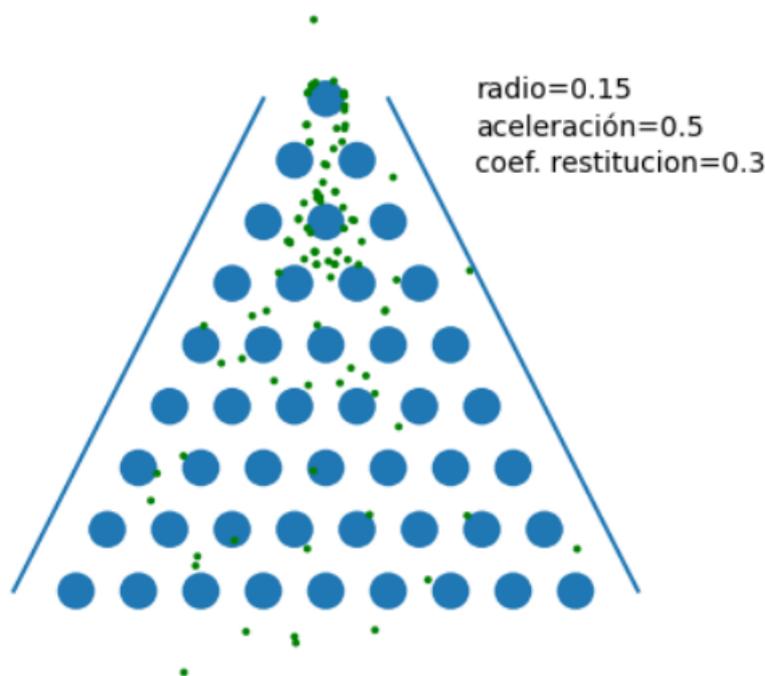
Finalmente, exploraremos algunos modelos de sistemas interactuantes y su relación con el fenómeno de las transiciones de fase. En particular, nos detendremos en el modelo de Ising como ejemplo paradigmático. El modelo de Ising es un modelo discreto, clásico, que a pesar de la gran simpleza en su formulación, presenta un diagrama de fases no trivial, con muchos de las características que se observan en sistemas reales, como efectos de ruptura de simetría, nucleación, etc. Analizaremos diferentes técnicas para su tratamiento tanto analíticas como numéricas.

Motivación: por qué un tratamiento estadístico de los sistemas mecánicos

Para motivar la discusión, comencemos por observar que ya en física I, en el momento en que se quiso aplicar las leyes de la mecánica del punto a sistemas reales, finitos, debimos introducir la noción de “centro de masa”. El centro de masa de un sistema de partículas, que se construye como un *promedio pesado* de la posición de las *partículas* que componen un sistema. Este *promedio* -independientemente de si modelamos al sistema como un continuo o un conjunto de partículas puntuales- debido a las leyes de la mecánica, se comporta según lo esperado para una única partícula puntual.

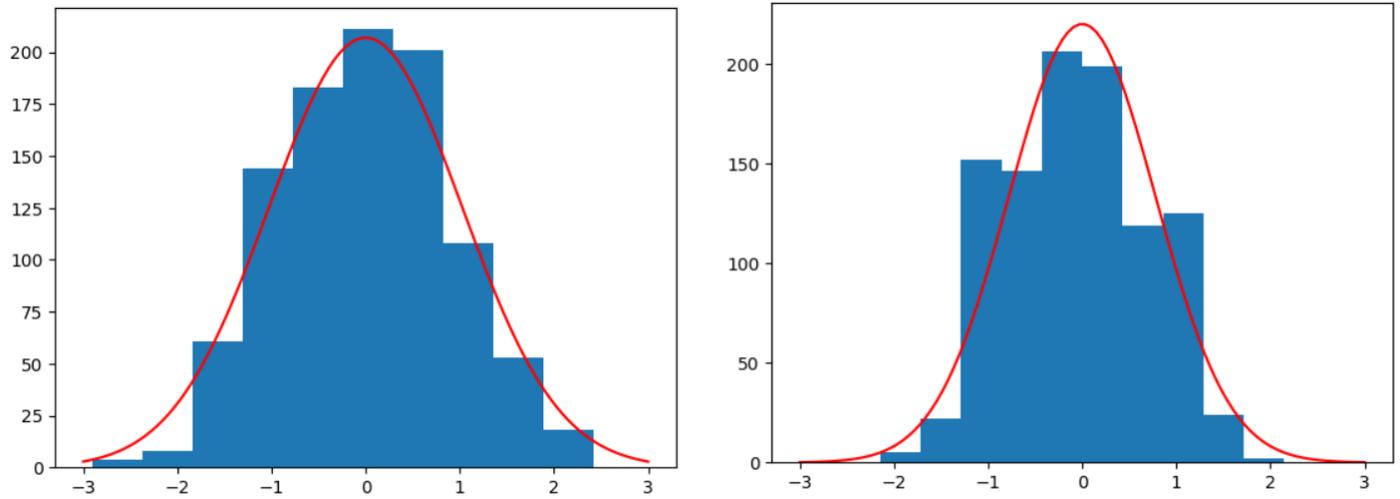
Esto es el resultado del principio de acción y reacción, y de la aditividad de la masa. De manera análoga, si el sistema de partículas es un *cuerpo rígido*, es posible determinar el movimiento de cada una de sus partes analizando sólo el movimiento del centro de masa y su *velocidad angular*, que se relaciona con el *momento angular* del sistema viá otra cantidad aditiva: su momento de inercia.

La descripción completa del movimiento en términos de estos pocos *grados de libertad* es posible gracias a la enorme cantidad de vínculos entre las partes del sistema. Consideremos ahora un sistema más complejo:



El sistema representa un *juguete* compuesto por pelotitas que caen en una región en la que pueden impactar con una serie de obstáculos distribuidos regularmente. Si conocemos perfectamente la posición inicial de cada pelotita, y la interacción con los obstáculos en forma detallada, podemos calcular su trayectoria y saber a dónde va a caer. Sin embargo, cuando

mayor sea el número de niveles de obstáculos, cualquier pequeña variación en las condiciones iniciales resultará amplificada en el camino, de manera que la trayectoria final se verá severamente modificada. En todo caso, importa menos dónde cae una pelotita en particular, sino cómo se distribuyen en la base: esto dependerá de varios parámetros del sistema, como la aceleración de la gravedad, la distribución de obstáculos o el coeficiente de restitución en los choques, pero en todo caso no será una distribución *determinista*: muy ligeras variaciones en las condiciones iniciales darán como resultado posiciones finales diferentes. Sin embargo, a medida que aumentamos el número de partículas, el aspecto general de la distribución (cuántas partículas caen *cerca* de cada punto en la base) comienza a converger.



Además, al forma particular de esta distribución no depende demasiado de los detalles de los choques particulares, sino de la *probabilidad* de que luego de un choque, la pelotita se desvíe en uno u otro sentido.

En las siguientes clases, presentaremos los elementos básicos necesarios para llegar a esta descripción.

[1] D. H. Goodstein, States of Matter, Dover, NewYork, 19