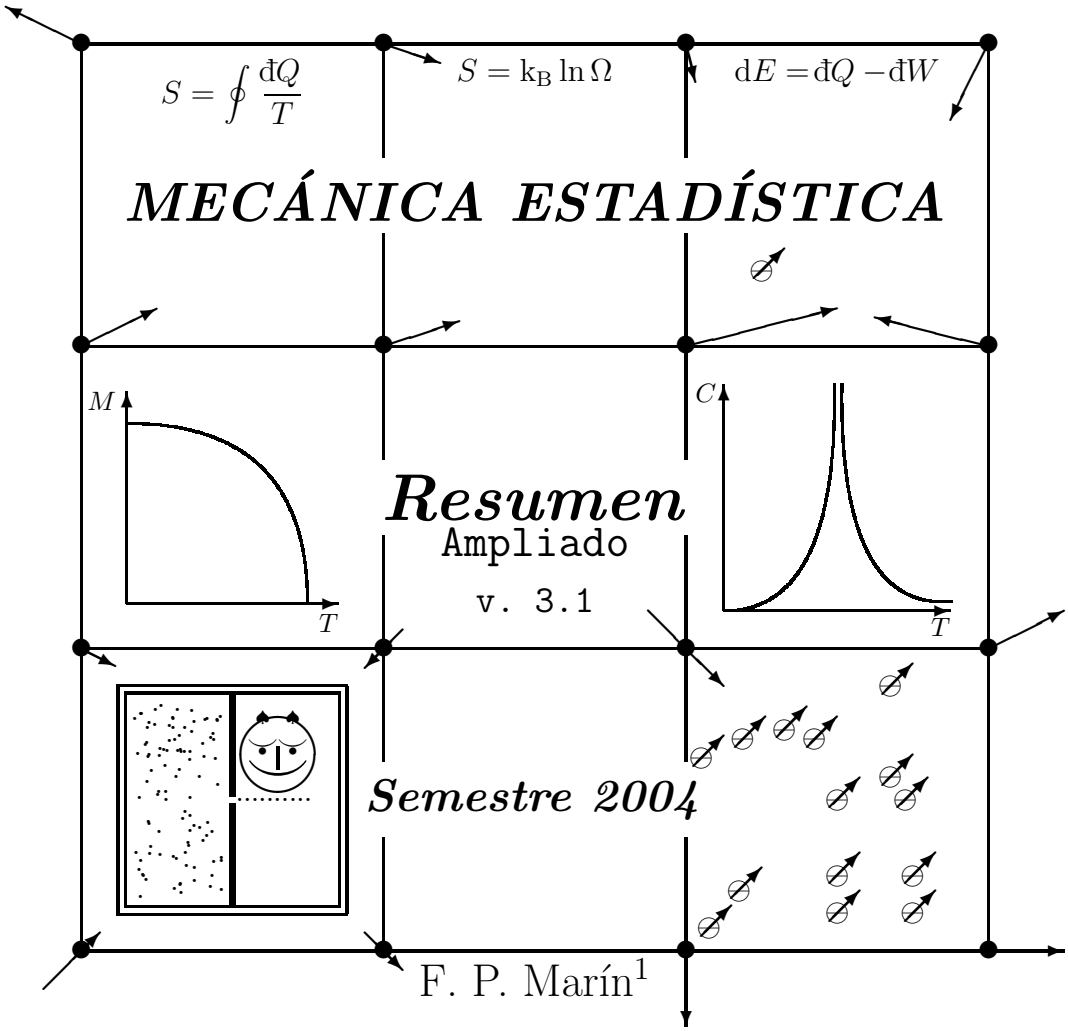
Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física

Laboratorio de Física Teórica de Sólidos (LFTS)
Centro de Física Teórica y Computacional (CEFITEC)
A.P. 47586. Caracas 1041-A. Venezuela



Estas notas han sido editadas en LaTeX 2_ε[2]

Caracas: Abril del 2005

[1] felix@fisica.ciens.ucv.ve
http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/

[2] http://www.latex-project.org/

Índice general

Introducción vi

I Tareas, Parciales y Soluciones 1

0. Tarea 0: Probabilidades 2
0.1. Programas en `C++` 14

1. Tarea 1: Termodinámica 18

2. Tarea 2: Gas Ideal Clásico 19
2.1. Ejercicios adicionales 27
Ejercicio 2.1: Distribución estadística de la corriente eléctrica . . . 27

3. Tarea 3: Gas Ideal Clásico (*continuación*) 32

4. Tarea 4: *Modelo de Ising* 48

5. Tarea 5: Gas Ideal Cuántico 52

6. Parcial 1 59

7. Parcial 2 71

8. Parcial 3 80

II Apéndices 82

A. Estimaciones: Constantes y Unidades 83

B. Herramientas Matemáticas 86
B.1. Fórmulas Útiles 86

B.2. Funciones *Salto* $\Theta(x)$, *Signo* $\mathrm{sgn}(x)$ y *Valor Absoluto* $|x|$ 88
B.3. Delta de Dirac 89
Ejercicio B.1: Ecuación con *fuente* tipo delta de Dirac 92
Ejercicio B.2: Función de Green del oscilador armónico 92
Ejercicio B.3: La integral $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{sen}(x)}{x}$ 95
Ejercicio B.4: La integral $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{sen}^2(x)}{x^2}$ 95
Ejercicio B.5: La integral $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{sen}^3(x)}{x^3}$ 96
Ejercicio B.6: Transformada de Fourier de $\Theta(t)\,\mathrm{F}(t)$ 97
B.4. Expansiones Asintóticas 98

C. Probabilidades y Simulaciones Simples 99
C.1. Probabilidades 99
Ejercicio C.1: Probabilidad de obtener una suma dada 99
Ejercicio C.2: Distribución de probabilidades de la suma 101
Ejercicio C.3: Distribuciones de probabilidad Lorentzianas 103
Ejercicio C.4: Distribución de Poisson 104
Ejercicio C.5: La suma de las caras de un dado 105
Ejercicio C.6: Analogías del juego de beisbol vs. espectroscopías . 110
C.2. Simulaciones Simples 121
Ejercicio C.7: Simulando el lanzamiento de monedas 124
Ejercicio C.8: Sesgando la simulación del lanzamiento de monedas 125
Ejercicio C.9: Experimento simulado y ajuste teórico en el lanzamiento de monedas 127
Ejercicio C.10: Rudimentos de Teoría de Información 130
Ejercicio C.11: Simulando el lanzamiento de un dado 134
Ejercicio C.12: Sesgando la simulación en el lanzamiento de un dado 135
Ejercicio C.13: Simulando el lanzamiento de un dado sesgado de 24 caras 137
Ejercicio C.14: Generando valores en el continuo: $\mathrm{P}(\theta) \equiv \mathrm{sen}(\theta)/2$ 140
Ejercicio C.15: Generando números distribuídos en forma Gaussiana 143
Ejercicio C.16: Dos partículas *" Gaussianas "* 148
Ejercicio C.17: Simulación basada en los resultados del `Ejercicio C.6` (espectroscopías, etc...) 150
Ejercicio C.18: Integración de Montecarlo 156
Ejercicio C.19: Integral Gaussiana (Método de Montecarlo) . . . 160
Ejercicio C.20: Integral *" fuertemente oscilante "* (Método de Montecarlo) 163
Ejercicio C.21: Ejemplo típico de Integración de Montecarlo . . . 165

Ejercicio C.22: Ejemplo de Integración de Montecarlo con uso de algunas herramientas típicas 169
Ejercicio C.23: Cálculo de π por el método de Montecarlo 171
Ejercicio C.24: Integración compleja y bidimensional (Método de Montecarlo) 173

D. Teoría de Ginzburg–Landau 180
D.1. Magnetismo Localizado 180
D.2. Ferromagnetismo 183
D.3. Antiferromagnetismo y *Similares* 189

E. Ondas de Espin (Magnones) 192
E.1. Momento Magnético Total vs. T: $\mathrm{M}(T)\,\hat{z}$ 197
E.2. Calor Específico 198

F. Recocido Simulado 199
F.1. Introducción 199
F.2. El Método de Recocido Simulado 200
F.3. Implementación del Recocido Simulado 204
F.4. Ejemplos 207
F.4.1. Una partícula de masa infinita 207
F.4.2. Un gas de partículas de masa infinita 212
F.4.3. Sistemas de Ecuaciones o/y Minimización de Funciones . . 217
F.4.4. El modelo de Ising en Dos Dimensiones 223
F.4.5. La Radiación del Cuerpo Negro 231
Derivación Teórica (Recocido Simulado) 233
Simulación de un gas de fotones (Recocido Simulado) 237
Simulación de la distribución de energía de un gas de fotones (Recocido Simulado) 241
Ejercicio F.1: El destino del jugador 246

Índice de figuras

3.1. Variación del momento magnético vs. temperatura 36
3.2. D (α) vs. alpha 40

4.1. Variación, con la temperatura, del momemto magnético medio. . . 50

5.1. Modelo simple de un semiconductor 56

7.1. Comportamiento de m vs. t. $0 \leq t \leq 1$. Cuando $t > 1$, $m = 0$. . . 76
7.2. Susceptibilidad Magnética del modelo de Ising con rango infinito . 78

C.1. Espectroscopía del beisbol 111
C.2. Beisból vs. Espectroscopías 120
C.3. Lanzamiento de monedas (método de mínimos cuadrados) 129
C.4. Ilustración de registros de información en un juego de beisbol . . . 151
C.5. Simulación de la estructura del bateador 157
C.6. Funciones y el método de Montecarlo 168
C.7. Ilustración del cálculo de π por el método de Montecarlo 174

D.1. Solución de la ecuación de Ginzburg–Landau en un ferromagneto 187
D.2. Variación espacial del campo magnético, generado por la magnetización ferromagnética, en la aproximación de Ginzburg–Landau . 189
D.3. Antiferromagnetismo en la aproximación de campo medio 190

F.1. Transiciones, en el equilibrio termodinámico, entre estados 202
F.2. Caminata en el espacio de fases (Recocido Simulado) 207
F.3. Solución simulada de un sistema de ecuaciones 222
F.4. Simulación del modelo de Ising Bidimensional 226
F.5. Recocido Simulado en un gas de fotones 240
F.6. Distribución de energía del cuerpo negro (Recocido Simulado) . 245

Índice de cuadros

3.1. Parámetros típicos del gas de moléculas de nitrógeno (N_2) 42

4.1. Breve descripción del *modelo de Ising*. 51

Introducción

En estas notas presentamos las tareas y soluciones, asignadas en el semestre 2004, del curso Mecánica Estadística del postgrado de Física. Algunas de ellas han sido ligeramente modificadas para evitar ambiguedades y/o confusiones de la redacción de ellas. Sus soluciones han sido revisadas exhaustivamente respecto de las soluciones iniciales entregadas a los estudiantes del curso. Sin embargo, como puede esperarse, es posible que contenga errores derivados del proceso de escritura. En tal caso, pueden comunicarlo al correo electrónico que se menciona en la portada.

A lo largo del curso, nos hemos convencido de la necesidad de incluir, en forma de apéndices, algunos tópicos que forman parte de las herramientas básicas de la Mecánica Estadística actual. En particular a lo que concierne a simulación de procesos físicos. Para entender la idea, digamos *gráficamente*, usemos el ejemplo del estudiante `E0` que ha aprobado el curso de Física Estadística del pregrado. `E0` ha aprendido a manipular reglas que permiten el cálculo de promedios, desviación standard, etc... así como energías, calores específicos, susceptibilidades magnéticas, presiones, etc... Sin embargo, tal curso no le enseñó a `E0` como *realizar en la práctica* la generación de un proceso con una distribución de probabilidad dada. Por ejm..., como *crear* un conjunto de espines, en un campo magnético $H\hat{z}$ a la temperatura T, con distribución de probabilidad para cada espin individual $\operatorname{sech}(mH/T)\,\mathrm{e}^{-Hm/T}/2$ y $m = \pm M_0$, $M_0 > 0$; lo cual es tan simple que puede realizarse con una simple calculadora de bolsillo (ver pág. 122).

Un conjunto de simulaciones *extremadamente simples* se han incluído para paliar parcialmente las deficiencias mencionadas arriba acompañadas de programas en el lenguaje `C++` que ilustran los diferentes procesos de simulación.

F. P. Marín
Laboratorio de Física Teórica de Sólidos
(asociado al CEFITEC)
Escuela de Física. Facultad de Ciencias
Universidad Central de Venezuela
A.P. 47586. Caracas 1041-A. Venezuela

Abril del 2005

Parte I

Tareas, Parciales y Soluciones

Capítulo 0

Tarea 0: Probabilidades

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

21 / 04 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/`
TAREA[1] Nº 0

REPASO

1. Suponga que se generan números " *pseudo al azar* " $\{x_0, x_1, x_2\}$ tales que

$$x_n = 3{,}99 x_{n-1}\left(1 - x_{n-1}\right) , \qquad n \geq 0 \quad \text{y} \quad x_{-1} = 0{,}339 \tag{0.1}$$

Heurísticamente, " *pseudo al azar* " significa que tales números están distribuídos uniformemente (en forma aproximada) en el intervalo $[0, 1)$. Explique como se usa el triplete $\{x_0, x_1, x_2\}$ para obtener un punto $\vec{r} = (x, y, z)$ uniformemente distribuído[1] en el interior de una esfera de radio 3. Obtenga el valor particular de $\vec{r}$ en el presente caso. **(6 puntos)**

SOLUCIÓN:

Sea $\mathrm{P}\left(\vec{r}\right)$ la distribución *uniforme* (independiente de $\vec{r}$) de probabilidades de puntos en el interior de una esfera de radio a, para la cual se cumple, obviamente, la condición de normalización

$$\int_{r<a} \mathrm{P}\left(\vec{r}\right) \, \mathrm{d}^3_{\vec{r}} = 1$$

Puesto que $\mathrm{P}\left(\vec{r}\right)$ es uniforme, se cumple que

$$1 = \int_{r<a} \mathrm{P}\left(\vec{r}\right) \, \mathrm{d}^3_{\vec{r}} = \mathrm{P}\left(\vec{r}\right) \int_{r<a} \mathrm{d}^3_{\vec{r}} = \mathrm{P}\left(\vec{r}\right) \left(\frac{4}{3}\pi a^3\right) \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{P}\left(\vec{r}\right) = \frac{3}{4\pi a^3}$$

[1] FECHA DE ENTREGA: **miercoles 05 de mayo de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

[1] En realidad este es un *abuso del lenguaje* y es una simplificación que cobra sentido cuando generamos una gran cantidad de puntos.

La condición de normalización puede reescribirse, en coordenadas esféricas, en la forma

$$1 = \int_0^a \mathrm{d}r\, \frac{3r^2}{a^3} \int_0^\pi \mathrm{d}\theta\, \frac{1}{2}\, \mathrm{sen}\,\theta \int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi}$$

$3r^2/a^3$, $\mathrm{sen}\,(\theta)\,/2$ y $1/2\pi$ son distribuciones de probabilidad para r, θ y ϕ en los intervalos $[0, a)$, $[0, \pi)$ y $[0, 2\pi)$, respectivamente. Entonces, podremos usar el triplete (x_0, x_1, x_2) en la determinación del triplete (r, θ, ϕ) con lo cual determinaremos a (x, y, z). En efecto, es necesario resolver

$$\begin{aligned}
\frac{3}{a^3}\, r^2\, \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}x_0} &= 1\,, \qquad r|_{x_0=0} = 0 \\
\frac{1}{2}\, \mathrm{sen}\,\theta\, \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x_1} &= 1\,, \qquad \theta|_{x_1=0} = 0 \\
\frac{1}{2\pi}\, \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x_2} &= 1\,, \qquad \phi|_{x_2=0} = 0
\end{aligned}$$

cuya solución es inmediata:

$$r = a x_0^{1/3}\,, \qquad \theta = 2\,\mathrm{arc\,sen}\,(\,\sqrt{x_1}\,)\,, \qquad \phi = 2\pi x_2$$

Usando la expresión (0.1), se obtiene

$$x_0 = 0{,}894075\,, \qquad x_1 = 0{,}377872\,, \qquad x_2 = 0{,}937988$$

Las coordenadas cartesianas x, y y z vienen dadas por

$$\begin{aligned}
x &= r\,\mathrm{sen}\,\theta\cos\phi = a x_0^{1/3}\,\sqrt{1-(1-2x_1)^2}\;\cos(2\pi x_2) \\
y &= r\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{sen}\,\phi = a x_0^{1/3}\,\sqrt{1-(1-2x_1)^2}\;\mathrm{sen}\,(2\pi x_2) \\
y &= r\cos\theta \qquad\quad = a x_0^{1/3}\,(1-2x_1)
\end{aligned}$$

Finalmente, (x, y, z) se genera usando una calculadora simple (ver pág. 122)

$$\boxed{x = 2{,}5925\,, \qquad y = -1{,}06455\,, \qquad z = 0{,}705925} \tag{0.2}$$

o usando un pequeño programa en `C++` (ver sección 0.1).

2. Una partícula ejecuta saltos, a lo largo del eje x, de longitud ℓ con probabilidad $p_\rightarrow$ ($p_\leftarrow$) a la *derecha* (*izquierda*). $p_\rightarrow + p_\leftarrow = 1$. Tales saltos ocurren a intervalos de tiempo τ. Denotemos con $p_n\,(t)$ la probabilidad de que tal partícula se encuentre, en el instante t, en el punto $n\ell$. $n \in \mathbf{Z}$.

a) Construya una relación[2] entre $p_n(t)$ y $p_{n\pm1}(t-\tau)$. Suponga que cada salto ocurre con independencia de cualquier salto anterior.**(1 punto)**

SOLUCIÓN:

La partícula se encuentra, en el instante t, en el punto $n\ell$ (con probabilidad $p_n(t)$) si ocurre que:

1) la partícula se encuentra, en el instante $t-\tau$ en la posición $(n-1)\ell$ (con probabilidad $p_{n-1}(t-\tau)$) y *decide* realizar un salto a la derecha (con probabilidad $p_{\rightarrow}$). Este evento ocurre con probabilidad $p_{n-1}(t-\tau)\,p_{\rightarrow}$
2) o se encuentra, en el instante $t-\tau$, en la posición $(n+1)\ell$ (con probabilidad $p_{n+1}(t-\tau)$) y *decide* realizar un salto a la izquierda (con probabilidad $p_{\leftarrow}$). Este evento ocurre con probabilidad $p_{n+1}(t-\tau)\,p_{\leftarrow}$.

Por tanto

$$\boxed{p_n(t) = p_{n-1}(t-\tau)\,p_{\rightarrow} + p_{n+1}(t-\tau)\,p_{\leftarrow}} \tag{0.3}$$

b) Deduzca una expresión para la distribución de probabilidades $\mathrm{P}(x,t)$ de la posición x de la partícula en el instante t. Note que en este caso $x, t \in \mathbf{R}$. **(1 punto)**

SOLUCIÓN:

$\mathrm{P}(x,t)$ puede escribirse en la forma

$$\mathrm{P}(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{x} \mathrm{d}x'\,\mathrm{P}(x',t)$$

La integral representa la probabilidad de que la partícula se encuentre, en el instante t, en cualquier *punto* $< x$. En consecuencia

$$\int_{-\infty}^{x} \mathrm{d}x'\,\mathrm{P}(x',t) = \sum_{\substack{n=-\infty \\ n\ell<x}}^{\infty} p_n(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n(t)\,\Theta(x-n\ell)$$

la cual se inserta en la anterior para obtener

$$\boxed{\mathrm{P}(x,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n(t)\,\delta(x-n\ell)} \tag{0.4}$$

y donde hemos usado la identidad $\mathrm{d}\Theta(x)/\mathrm{d}x = \delta(x)$.

[2] Relación de recurrencia.

c) Encuentre una relación entre $\mathrm{P}(x,t)$ y $\mathrm{P}(x \pm \ell, t-\tau)$. **(1 punto)**

SOLUCIÓN:

En el resultado anterior (0.4), reemplazemos la relación de recurrencia (0.3):

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}(x,t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[p_{n-1}(t-\tau)\, p_{\rightarrow} + p_{n+1}(t-\tau)\, p_{\leftarrow}\right] \delta(x - n\ell) \\
&= p_{\rightarrow} \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n(t-\tau)\, \delta([x-\ell] - n\ell) \\
&\quad + \\
&\quad p_{\leftarrow} \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n(t-\tau)\, \delta([x+\ell] - n\ell)
\end{aligned}$$

Usando, una vez mas, el resultado (0.4)

$$\boxed{\mathrm{P}(x,t) = p_{\rightarrow}\mathrm{P}(x-\ell, t-\tau) + p_{\leftarrow}\mathrm{P}(x+\ell, t-\tau)} \tag{0.5}$$

d) Suponga que la escala de variación *espacial* (*temporal*) de $\mathrm{P}(x,t)$ es *muy grande* en comparación con ℓ (τ). Demuestre que en el límite $\ell \to 0$, $\tau \to 0$ y ℓ^2/τ finito; $\mathrm{P}(x,t)$ satisface la *Ecuación de Difusión* cuando $p_{\rightarrow} = p_{\leftarrow} = 1/2$. **(2 puntos)**

SOLUCIÓN:

Desarrollemos[3] $\mathrm{P}(x \pm \ell, t-\tau)$ en potencias de ℓ y τ cuando $\ell \approx 0$ y $\tau \approx 0$:

$$\mathrm{P}(x-\ell, t-\tau) \approx \mathrm{P}(x,t) - \frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial x}\ell - \frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial t}\tau + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathrm{P}(x,t)}{\partial x^2}\ell^2 \tag{0.6}$$

$$\mathrm{P}(x+\ell, t-\tau) \approx \mathrm{P}(x,t) + \frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial x}\ell - \frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial t}\tau + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathrm{P}(x,t)}{\partial x^2}\ell^2 \tag{0.7}$$

En las expresiones anteriores, se supone que $\mathrm{P}(x,t)$ *varía suavemente* en el espacio y el tiempo: Es decir, la escala de variación *espacial* (*temporal*) de $\mathrm{P}(x,t)$ es muy *grande* en comparación con ℓ (τ) para

[3] $\mathrm{f}(\vec{r}+\delta\vec{r}) = \mathrm{f}(\vec{r}) + (\delta\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})\,\mathrm{f}(\vec{r}) + \frac{1}{2}(\delta\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})^2\,\mathrm{f}(\vec{r}) + \cdots + \frac{1}{n!}(\delta\vec{r}\cdot\nabla_{\vec{r}})^n\,\mathrm{f}(\vec{r}) + \cdots$

valores finitos de estos. Por tanto, no se incluyen derivadas de orden superior al primer orden en el tiempo. La derivada espacial de segundo orden es necesaria en cualquier caso para valores arbitrarios de $p_{\leftarrow}$ con $p_{\rightarrow}+p_{\leftarrow}=1$. Derivadas *cruzadas* como, por ejm. . . , $\partial^2 \mathrm{P}\left(x,t\right)/\partial x \partial t$ son una contribución despreciable en el límite ℓ^2/τ finito con $\ell \to 0$ y $\tau \to 0$.

Reemplazando las expresiones (0.6) y (0.7) en la expresión (0.5) se obtiene la aproximación:

$$\begin{aligned} \mathrm{P}\left(x,t\right) \approx & \left(p_{\rightarrow}+p_{\leftarrow}\right)\mathrm{P}\left(x,t\right) - \left(p_{\rightarrow}-p_{\leftarrow}\right)\frac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial x}\,\ell \\ & - \\ & \left(p_{\rightarrow}+p_{\leftarrow}\right)\frac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial t}\,\tau + \frac{1}{2}\left(p_{\rightarrow}+p_{\leftarrow}\right)\frac{\partial^2 \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial x^2}\,\ell^2 \end{aligned}$$

Esta se reduce a con ($p_{\rightarrow}+p_{\leftarrow}=1$)

$$\frac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial t} \approx \frac{\ell^2}{2\tau}\frac{\partial^2 \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial x^2} - \left(p_{\rightarrow}-p_{\leftarrow}\right)\frac{\ell}{\tau}\frac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial x} \tag{0.8}$$

En el presente caso ($p_{\rightarrow}=p_{\leftarrow}=1/2$) obtendremos:

$$\boxed{\begin{array}{c} \text{Ecuación de Difusión} \\ p_{\rightarrow}=p_{\leftarrow}=\dfrac{1}{2} \\ \dfrac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial t} = D\,\dfrac{\partial^2 \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial x^2} \\ D \equiv \lim\limits_{\substack{\ell\to 0^+ \\ \tau\to 0^+}} \dfrac{\ell^2}{2\tau} \qquad D\text{: Constante de Difusión} \end{array}} \tag{0.9}$$

De acuerdo a la ecuación de continuidad[4]

$$\frac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial t} + \frac{\partial \mathrm{J}\left(x,t\right)}{\partial x} = 0$$

podemos afirmar que la *corriente de probabilidad* es

$$\mathrm{J}\left(x,t\right) = -D\,\frac{\partial \mathrm{P}\left(x,t\right)}{\partial x}$$

[4]La probabilidad se conserva: $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\mathrm{P}\left(x,t\right)=1,\ \forall t$

e) Encuentre la ecuación que satisface $\mathrm{P}(x,t)$ cuando

$$D \equiv \lim_{\substack{\ell\to 0^+\\ \tau\to 0^+}} \frac{\ell^2}{2\tau} \quad \text{y} \quad v_d \equiv \lim_{\substack{\ell\to 0^+\\ \tau\to 0^+}} (p_\rightarrow - p_\leftarrow)\frac{\ell}{\tau} = 2D \lim_{\substack{\ell\to 0^+\\ \tau\to 0^+}} \frac{p_\rightarrow - p_\leftarrow}{\ell} \text{ finitos}$$

Demuestre que la ecuación encontrada puede ser reducida a una ecuación de difusión e interprete físicamente el resultado encontrado. Note que, en este caso, se debe cumplir

$$\lim_{\substack{\ell\to 0^+\\ \tau\to 0^+}} p_\rightarrow = \lim_{\substack{\ell\to 0^+\\ \tau\to 0^+}} p_\leftarrow = \frac{1}{2}$$

(3 puntos)

<u>SOLUCIÓN</u>:

En este caso partimos de la expresión general (0.8): Puesto que $p_\rightarrow \ell + p_\leftarrow(-\ell) = (p_\rightarrow - p_\leftarrow)\,\ell$ es el *desplazamiento medio por salto*, $v_d \equiv (p_\rightarrow - p_\leftarrow)\,\ell/\tau$ es la componente x de la *velocidad media*. Escribimos, entonces, la expresión general (0.8) en la forma:

$$\boxed{\frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 \mathrm{P}(x,t)}{\partial x^2} - v_d\,\frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial x}} \tag{0.10}$$

la cual se conoce tambien como *Ecuación de Bernoulli*.

La corriente de probabilidad resulta ser

$$-D\,\frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial x} + \mathrm{P}(x,t)\,v_d$$

El segundo término representa el desplazamiento, superpuesto al proceso de difusión, con velocidad v_d lo cual es típico de un fluido. Si argumentamos que debe despreciarse la segunda derivada espacial en comparación con la primera (*variación espacial lenta*) obtendremos

$$\frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial t} = -v_d\,\frac{\partial \mathrm{P}(x,t)}{\partial x}$$

cuya solución general es de la forma $\mathrm{P}(x,t) = \mathrm{P}(x - v_d t, 0)$. Esta representa una propagación, sin deformación, con velocidad v_d y no describe adecuadamente el proceso físico de difusión. Por estas razones se retiene, en general, la presencia de la segunda derivada espacial y la nueva ecuación de difusión describe una conducta de traslación *superpuesta* al proceso de difusión.

Para reducir la ec. (0.10) a la forma de una ecuación de difusión debemos *factorizar* el segundo miembro:

$$D\,\frac{\partial^2 \mathrm{P}\,(x,t)}{\partial x^2} - v_d\,\frac{\partial \mathrm{P}\,(x,t)}{\partial x} = D\left[\frac{\partial^2 \mathrm{P}\,(x,t)}{\partial x^2} - \frac{v_d}{D}\,\frac{\partial \mathrm{P}\,(x,t)}{\partial x}\right]$$

$$= D\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)^2 \mathrm{P}\,(x,t) - \frac{v_d^2}{4D}\,\mathrm{P}\,(x,t)$$

La ec. (0.10) se reduce a

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_d^2}{4D}\right)\mathrm{P}\,(x,t) = D\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)^2 \mathrm{P}\,(x,t) \tag{0.11}$$

Pero

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)^2 \mathrm{P}\,(x,t) = \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)\mathrm{P}\,(x,t)$$
$$=$$
$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)\mathrm{e}^{v_d x/2D}\left[\mathrm{e}^{-v_d x/2D}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)\mathrm{P}\,(x,t)\right]$$
$$=$$
$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{v_d}{2D}\right)\mathrm{e}^{v_d x/2D}\,\frac{\partial\left[\mathrm{e}^{-v_d x/2D}\mathrm{P}\,(x,t)\right]}{\partial x}$$
$$=$$
$$\mathrm{e}^{v_d x/2D}\,\frac{\partial^2\left[\mathrm{e}^{-v_d x/2D}\mathrm{P}\,(x,t)\right]}{\partial x^2}$$

Similarmente

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_d^2}{4D}\right)\mathrm{P}\,(x,t) &= \mathrm{e}^{-v_d^2 t/4D}\left[\mathrm{e}^{v_d^2 t/4D}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_d^2}{4D}\right)\mathrm{P}\,(x,t)\right]\\ &= \mathrm{e}^{-v_d^2 t/4D}\,\frac{\partial\left[\mathrm{e}^{v_d^2 t/4D}\mathrm{P}\,(x,t)\right]}{\partial t}\end{aligned}$$

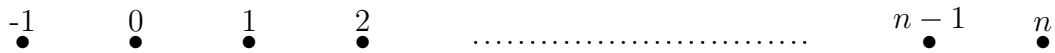
Con estos resultados la ec. (0.11) se reduce a

$$\mathrm{e}^{-v_d^2 t/4D}\,\frac{\partial\left[\mathrm{e}^{v_d^2 t/4D}\mathrm{P}\,(x,t)\right]}{\partial t} = D\,\mathrm{e}^{v_d x/2D}\,\frac{\partial^2\left[\mathrm{e}^{-v_d x/2D}\mathrm{P}\,(x,t)\right]}{\partial x^2}$$

la cual puede escribirse en la forma de una ecuación de difusión

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial \mathcal{P}(x,t)}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 \mathcal{P}(x,t)}{\partial x^2} \\ \mathcal{P}(x,t) \equiv \mathrm{e}^{v_d^2 t/4D - v_d x/2D}\ \mathrm{P}(x,t) = \mathrm{e}^{t/\tau_0 - x/\lambda_0}\ \mathrm{P}(x,t) \\ \tau_0 \equiv \frac{4D}{v_d^2} = \frac{2}{(p-q)^2}\,\tau\,, \qquad \lambda_0 \equiv \frac{2D}{v_d} = \frac{1}{p-q}\,\ell\end{gathered}} \tag{0.12}$$

3. En la cadena de la figura, el individuo -1 transmite la información $\uparrow$ al



individuo 0. $\downarrow$ es la información que niega la información $\uparrow$. Por ejm..., $\uparrow$ significa *cierto* y $\downarrow$ significa *falso*, etc... El objetivo de este problema es evaluar cuan confiable es la información que recibe el individuo n despues que ésta atraviesa una cadena de n individuos. Para ello supongamos, que el individuo ℓ ($\ell \geq 0$) transmite, al individuo $\ell+1$, la información que posee con probabilidad p y con probabilidad $q = 1-p$ la información contraria. Evalue la probabilidad p_n de que el individuo n obtenga la información correcta $\uparrow$. Discuta los casos límites. **(6 puntos)**

SOLUCIÓN:

El individuo ℓ recibe la información correcta $\uparrow$ (con probabilidad p_ℓ) si

1) el individuo $\ell-1$ posee la información correcta $\uparrow$ (con probabilidad $p_{\ell-1}$) y decide comunicar ésta información (con probabilidad p)
2) o el individuo $\ell-1$ posee la información incorrecta $\downarrow$ (con probabilidad $1-p_{\ell-1}$) y decide mentir lo cual ocurre con probabilidad $q = 1-p$.

El evento 1) ocurre con probabilidad $p_{\ell-1}p$ mientras el evento 2) ocurre con probabilidad $(1-p_{\ell-1})\,q$. Por tanto, $p_\ell = p_{\ell-1}p + (1-p_{\ell-1})\,q$ con $\ell \geq 1$ y $p_0 = 1$ la cual equivale a

$$p_\ell + (q-p)\,p_{\ell-1} = q\,, \quad \ell \geq 1\,; \qquad p_0 = 1 \tag{0.13}$$

Una solución particular de esta ecuación inhomogenea es $p_\ell^{(0)} = 1/2$, $\forall \ell$. Por tanto, la ecuación para $p_\ell - 1/2$ es homogenea:

$$\left(p_\ell - \frac{1}{2}\right) + (q-p)\left(p_{\ell-1} - \frac{1}{2}\right) = 0\,, \quad \ell \geq 1\,; \qquad p_0 = 1$$

La solución de esta ecuación es de la forma $p_\ell - 1/2 = A\alpha^\ell$ donde $A \neq 0$ y $\alpha \neq 0$ son independientes de ℓ. Reemplazando en la ecuación anterior

$$A\alpha^\ell + (q-p)\,A\alpha^{\ell-1} = 0 \quad \Longrightarrow \quad 1 + \frac{q-p}{\alpha} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \alpha = p - q$$

y la solución se reduce a $p_\ell = 1/2 + A\,(p-q)^\ell$. Satisfaciendo la condición de frontera

$$1 = p_0 = \frac{1}{2} + A \qquad \Longrightarrow \qquad A = \frac{1}{2}$$

La solución se reduce a

$$\boxed{p_n = \frac{1 + (p-q)^n}{2}\,, \qquad n \geq 0} \tag{0.14}$$

Veamos algunos casos particulares:

a) TODOS DICEN LA VERDAD: $p = 1$, $q = 0$

En tal caso

$$p_n = 1\,, \qquad \forall n \geq 0$$

La información atravesó la fila de individuos sin modificación alguna puesto que cada individuo le comunica la verdad $\uparrow$ a su vecino.

b) TODOS MIENTEN: $p = 0$, $q = 1$

En tal caso

$$p_n = \frac{1 + (-1)^n}{2} = \begin{cases} 0, & \text{si } n \text{ es impar} \\ 1, & \text{si } n \text{ es par} \end{cases}$$

La información cierta $\uparrow$ o falsa $\downarrow$ se alterna a lo largo de la fila de individuos puesto que cada individuo le miente a su vecino: Los individuos en los sitios impares reciben la información falsa $\downarrow$ mientras los individuos en los sitios pares reciben la información correcta $\uparrow$.

c) TODOS MIENTEN O DICEN LA VERDAD DE MANERA COMPLETAMENTE AL AZAR: $p = q = 1/2$

En tal caso

$$p_n = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad n = 0 \\ \dfrac{1}{2} & \text{si} \quad n > 0 \end{cases}$$

Salvo el primero ($n = 0$) que recibió la información correcta $\uparrow$, los restantes individuos ($n > 0$) reciben una información distribuída completamente al azar ($p_n = 1/2$, $n > 0$).

d) TODOS <u>CASI</u> DICEN LA VERDAD: $p \lesssim 1$, $q \gtrsim 0$

En tal caso, la solución puede aproximarse en la forma

$$\begin{aligned} p_n &= \frac{1+(p-q)^n}{2} = 1 - \frac{1-(1-2q)^n}{2} = 1 - \frac{1-\,\mathrm{e}^{n\ln(1-2q)}}{2} \\ &\approx 1 - \frac{1-\,\mathrm{e}^{-2qn}}{2} \end{aligned}$$

Cuando $n \ll 1/(2q)$ se obtiene $p_n \lesssim 1$: Los individuos con $n \lesssim 1/(2q)$ *prácticamente reciben con mucha confianza* la información verdadera $\uparrow$ mientras los individuos con $n \gg 1/(2q)$ reciben ésta con probabilidad[5] $p_n \approx 1/2$.

$1/(2q)$ delimita el rango de valores de n para los cuales los individuos de la fila reciben, aproximadamente, la información verdadera. Por ejm. . . , con $p = 0{,}99$ y $q = 0{,}01$ se obtiene $1/(2q) = 50$.

e) TODOS <u>CASI</u> MIENTEN: $p \gtrsim 0$, $q \lesssim 1$

En tal caso, la solución guarda similaridades con el caso anterior y se aproxima en la forma

$$p_n \approx 1 - \frac{1-(-1)^n\,\mathrm{e}^{-2pn}}{2}$$

Cuando $n \ll 1/(2p)$ se obtiene $p_n \lesssim 1$ para los sitios con n par y $p_n \approx 0$ para los sitios con n impar: Existe una región en la fila de individuos con $n \ll 1/(2p)$ donde la información se alterna como se explica arriba. Cuando $n \gg 1/(2p)$, se obtiene $p_n \approx 1/2$.

f) p_n *VARÍA SUAVEMENTE* A LO LARGO DE LA FILA DE INDIVIDUOS: $p_n \approx p_{n-1}$.

Es conveniente realizar el análisis a partir de la *ecuación en diferencias* (0.13) y realizar el *límite continuo* (a es la separación entre los individuos):

$$p_\ell \to \mathrm{p}(x)\ , \quad p_{\ell-1} \to \mathrm{p}(x-a) \approx \mathrm{p}(x) - \mathrm{p}'(x)\,a\,; \qquad \mathrm{p}(0) = 1$$

Con esto se obtiene $\mathrm{p}(x) + (q-p)\left[\mathrm{p}(x) - \mathrm{p}'(x)\,a\right] = q$ la cual equivale a

$$\mathrm{p}'(x) + \frac{2q/(p-q)}{a}\,\mathrm{p}(x) = \frac{q/(p-q)}{a}$$

[5] Note que $\lim\limits_{\substack{n\to\infty \\ 0<p<1}} p_n = \dfrac{1}{2}$.

Con la condición de frontera $\mathrm{p}(0) = 1$ La solución de esta ecuación viene dada por

$$\mathrm{p}(x) = \frac{1 + \mathrm{e}^{-x/\lambda}}{2}, \qquad \lambda \equiv \frac{p-q}{2q}\, a = \frac{1}{2}\left(\frac{p}{q} - 1\right) a$$

λ no puede ser negativo puesto que en tal situación obtendríamos valores de la probabilidad mayores que uno ($\mathrm{p}(x) > 1$). El caso $\lambda = 0$ genera una *variación abrupta* (en contra de la hipótesis inicial) entre el individuo 0 y el individuo 1.

Por tanto, $\lambda > 0$ y en consecuencia $p > q$. Además, puesto que $\lambda \gg a$ (variación suave de $\mathrm{p}(x)$) debe cumplirse que $p \lesssim 1$, $q \gtrsim 0$ y por tanto $\lambda \approx a/(2q)$. Vemos, entonces, que este caso coincide con el caso $3d$ (ver pag. 11).

g) El caso anterior sugiere desarrollar un caso análogo para la situación $3e$ (ver pag. 11). En ese caso, la variación lenta ocurre a lo largo de la subred de valores para n par. Para ello debemos encontrar la relación de recurrencia entre dos sitios consecutivos etiquetados con números pares. A partir de (0.13) encontramos tal relación. En efecto

$$p_{\ell-1} = q + (p-q)\, p_{\ell-2}$$

la cual substituimos en (0.13)

$$p_\ell + (q-p)\left[q + (p-q)\, p_{\ell-2}\right] = q \qquad \Longrightarrow \qquad p_\ell - (q-p)^2\, p_{\ell-2} = 2pq$$

En el límite continuo, debemos hacer, entre otras (ver $3d$), la substitución $p_{\ell-2} \to \mathrm{p}(x) - 2a\mathrm{p}'(x)$ con la que se obtiene

$$\left[1 - (q-p)^2\right] \mathrm{p}(x) + 2a\,(q-p)^2\, \mathrm{p}'(x) = 2pq$$

la cual equivale a

$$\mathrm{p}'(x) + \frac{2pq}{(q-p)^2}\,\frac{1}{a}\,\mathrm{p}(x) = \frac{pq}{(q-p)^2}\,\frac{1}{a}, \qquad \mathrm{p}(0) = 1$$

La solución resulta ser

$$\mathrm{p}(x) = \frac{1 + \mathrm{e}^{-x/\Lambda}}{2}, \qquad \Lambda \equiv \frac{(q-p)^2}{2pq}\, a$$

Puesto que $\mathrm{p}(x)$ debe *variar lentamente* a lo largo de la subred con n pares, se debe cumplir que $\Lambda \gg a$. Para facilitar el análisis de Λ es conveniente parametrizar p y q:

$$p = \operatorname{sen}^2\theta\,, \quad q = \cos^2\theta\,, \qquad 0 \le \theta \le \frac{\pi}{2}$$

y

$$\frac{\Lambda}{a} = \frac{\left(\cos^2\theta - \operatorname{sen}^2\theta\right)^2}{2\operatorname{sen}^2(\theta)\cos^2(\theta)} = \frac{\cos^2(2\theta)}{2\left[\operatorname{sen}(2\theta)/2\right]^2} = \frac{2}{\tan^2(2\theta)}$$

Observemos que $\Lambda \gg a$ cuando $\theta \gtrsim 0$ o $\theta \lesssim \pi/2$. El caso $\theta \lesssim \pi/2$ corresponde al caso anterior $\Big(\, p \lesssim 1, q \gtrsim 0 \,\Big)$.

El caso que nos interesa, en este aparte, es $\theta \gtrsim 0$ lo cual significa $p \gtrsim 0$ y $q \lesssim 1$. Se obtiene entonces $\Lambda \approx a/(2p) \gg 2a$. Ver $3e$ en pag. 11.

<u>COMENTARIO ADICIONAL</u>:

La *ecuación en diferencias* (0.13) puede resolverse, al menos, en dos formas adicionales:

a) Iterando a

$$\left(p_\ell - \frac{1}{2}\right) = (p-q)\left(p_{\ell-1} - \frac{1}{2}\right), \quad \ell \geq 1\,; \qquad p_0 = 1$$

En efecto

$$\begin{aligned}
\left(p_1 - \frac{1}{2}\right) &= (p-q)\left(p_0 - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\,(p-q) \\
\left(p_2 - \frac{1}{2}\right) &= (p-q)\left(p_1 - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\,(p-q)^2 \\
\left(p_3 - \frac{1}{2}\right) &= (p-q)\left(p_2 - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\,(p-q)^3 \\
\vdots \quad \vdots \quad & \vdots \\
\left(p_n - \frac{1}{2}\right) &= (p-q)\left(p_{n-1} - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\,(p-q)^n
\end{aligned}$$

Por tanto

$$p_n = \frac{1 + (p-q)^n}{2}$$

que coincide con el resultado (0.14).

b) Introduciendo la *Función Generatriz* $\Psi(z)$ ($z \in \mathbf{C},\ |z| < 1$):

$$\Psi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n \qquad \Longrightarrow \qquad p_n = \frac{1}{n!}\,\frac{\partial^n \Psi(z)}{\partial z^n}\bigg|_{z=0}$$

En efecto, multipliquemos ambos miembros de $p_n + (q-p)\,p_{n-1} = q$ por z^n y sumemos $\forall n \geq 1$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} p_n z^n + (q-p)\sum_{n=1}^{\infty} p_{n-1} z^n = q\sum_{n=1}^{\infty} z^n$$

la cual puede reescribirse en la forma

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n - \overbrace{p_0}^{=1}\right) + (q-p)\, z \sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n = q\,\frac{z}{1-z} = -q + q\,\frac{1}{1-z}$$

$\Psi(z)$ satisface

$$\begin{aligned}
\Psi(z) &= \frac{1}{1-(p-q)\,z}\left(p + \frac{q}{1-z}\right) = \frac{1}{1-(p-q)\,z}\,\frac{1-pz}{1-z} \\
&= \frac{1/2}{1-z} + \frac{1/2}{1-(p-q)\,z} = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty} z^n + \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\left[(p-q)\,z\right]^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1+(p-q)^n}{2}\, z^n
\end{aligned}$$

Por tanto

$$p_n = \frac{1+(p-q)^n}{2}\,, \qquad n \geq 0$$

lo cual coincide con el resultado (0.14).

0.1. Programas en C++

solucion01.cc: Este programa puede usarse para generar puntos *uniformemente distribuídos* en el interior de una esfera de radio 3. En particular, de acuerdo al problema 1, solo se genera *un* punto.

```
// solucion01.cc
#include <cmath>
#include <iostream>
using namespace std;
const double DOSPI=2.0*M_PI,FACTOR=3.99,RADIO=3.0,UNTERCIO=1.0/3.0;
const double X_1=0.339;
double Semilla;


inline double& siguiente()
{
 return Semilla*=FACTOR*(1.0 - Semilla);
}
```

```
int main()
{
 double x0,x1,x2;

 siguiente()=X_1;                        // Inicializa el generador
                                         // de numeros al azar.
 cout<<"x0 = "<<(x0=siguiente())<<endl;
 cout<<"x1 = "<<(x1=siguiente())<<endl;
 cout<<"x2 = "<<(x2=siguiente())<<endl<<endl;

 x0=RADIO*pow(x0,UNTERCIO);
 x1=1.0 - 2.0*x1;
 double temp=1.0 - x1*x1,x,y;
 if (  ( temp>0 ) && ( (temp=sqrt(temp))>0 )  ) {
    y=x0*temp;
    x2*=DOSPI;
    x=y*cos(x2);
    y*=sin(x2);
 } else x=y=0;
 cout<<"Estos valores generan el punto (x,y,z):\n";
 cout<<"x = "<<x<<"\ny = "<<y<<endl;
 cout<<"z = "<<(x0*x1)<<endl;

 return 0;
}
```

La ejecución del programa anterior genera el resultado

```
x0 = 0.894075
x1 = 0.377872
x2 = 0.937988

Estos valores generan el punto (x,y,z):
x = 2.5925
y = -1.06455
z = 0.705925
```

solucion03.cc: Simulación de una cadena de 10 personas. La probabilidad de que una persona le transmita a su vecino la información que posee se ha tomado igual a $0{,}9$. Iterando 10^6 veces se evalua el número de veces que cada persona en la cadena recibe la respuesta correcta. Las probabilidades simuladas de que una persona en particular haya recibido la información correcta se obtienen dividiendo por el número de iteraciones. Ver problema 3.

```
// solucion03.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iostream>
#include <vector>
using namespace std;
const double PVERDAD=0.9;
const double P_Q=2.0*PVERDAD - 1.0,RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t ITERACIONES=1000000U,N=10U;


inline double pTeo(size_t n)
{
 return (1.0 + pow(P_Q,double(n)))/2.0;
}


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
int main()
{
 vector<double> P(N);
 size_t i=0;

 while ( i<P.size() ) P[i++]=0;

 bool p;
 size_t j;
 for ( j=0 ; j<ITERACIONES ; ++j ) {
     srand(size_t(time((time_t *)0)));
     p=true;
     for ( i=0 ; i<P.size() ; ++i ) {
         if ( rand01()>=PVERDAD ) p=!p;
         P[i]+=( p==true );
     }
 }

 for ( i=(j=1U,0) ; i<P.size() ; ++i,++j ) {
     cout<<'p'<<j<<" = "<<(P[i]/ITERACIONES)<<",  ";
     cout<<pTeo(j)<<endl;
 }

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera la simulación

```
 p1 = 1       ,  0.9
 p2 = 0.824462,  0.82
 p3 = 0.768136,  0.756
 p4 = 0.855394,  0.7048
 p5 = 0.91213 ,  0.66384
 p6 = 0.67505 ,  0.631072
 p7 = 0.586408,  0.604858
 p8 = 0.498648,  0.583886
 p9 = 0.586408,  0.567109
p10 = 0.586408,  0.553687
```

Los valores en la columna izquierda son el resultado de la simulación mientras aquellos en el extremo derecho son evaluados con la expresión teórica $(1 + 0{,}8^n)/2$ donde $n = 1, 2, \ldots, 10$

Capítulo 1

Tarea 1: Termodinámica

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

26 / 05 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/`
TAREA[1] **Nº 1**

1. Elabore una discusión que involucre

   a) Las Tres Leyes de la Termodinámica:

   1ª Ley: Diferencias y Semejanzas con los *" conceptos equivalentes "* en Mecánica.

   2ª Ley: Máximo de la Entropía de un sistema aislado. Ciclo de Carnot. Introducción de escalas de temperatura.

   3ª Ley: Aplicación de ésta a un sistema con estado fundamental degenerado. Consecuencias.

   (15 puntos)

2. El Experimento de Joule. **(5 puntos)**

Dado que la respuesta a esta tarea es de caracter personal no intentamos una solución posible a esta.

---

[1] FECHA DE ENTREGA: **jueves 03 de junio de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

Capítulo 2

Tarea 2: Gas Ideal Clásico

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

08 / 06 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/`
TAREA[1] N° 2

1. Considere un gas ideal *clásico* que consiste de N partículas *idénticas* de masa m en un recipiente de volumen V a la temperatura T. Cada partícula posee, aparte de su energía cinética, dos *estados internos* de energías $\pm\Delta/2$ con $\Delta > 0$.

   a) Justifique a la expresión formal siguiente

$$\mathcal{D}(E) = \frac{1}{N!}\sum_{\{\sigma_i\}}\frac{1}{h^{3N}}\prod_{i=1}^{N}\int \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\,\delta\left(E - \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\vec{p}_j^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}\sigma_j\Delta\right]\right)$$

   como la correcta *Densidad de Estados de Energía* del gas en consideración. **(3 puntos)**

   SOLUCIÓN:

   Una expresión formal y conveniente para la densidad de estados viene dada por

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\partial}{\partial E}\int_{-\infty}^{E}\mathrm{d}E'\,\mathcal{D}(E') \tag{2.1}$$

   La integración corresponde al *número total de estados con energía menor que* E tal que el problema se reduce a encontrar una expresión equivalente para esta cantidad.

[1] FECHA DE ENTREGA: **viernes 18 de junio de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

Note que $(\vec{r}, \vec{p}, \sigma)$ con $\sigma = \pm 1$ es un punto en el espacio de fases de *una* partícula tal que el número de estados en el elemento de volumen $\mathrm{d}^3_{\vec{r}}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}}$ es $\sum_{\sigma=\pm 1} \mathrm{d}^3_{\vec{r}}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}}/h^3 = 2\,\mathrm{d}^3_{\vec{r}}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}}/h^3$.

En cada estado se pueden *colocar* dos partículas con energías $\vec{p}^{\,2}/2m + \Delta/2$ y $\vec{p}^{\,2}/2m - \Delta/2$ tal que la energía total del gas para una configuración $\{(\vec{r}_i, \vec{p}_i, \sigma_i)\}$ dada es $E = \sum_{i=1}^{N} (\vec{p}_i^{\,2}/2m + \sigma_i \Delta/2)$. Al realizar la suma o/e integración sobre el espacio de fases del gas es conveniente anotar que permutaciones de partículas no generan un nuevo estado puesto que ellas son idénticas. En consecuencia, el resultado de la suma o/e integración mencionada arriba es dividida por el número $N!$ de permutaciones de todas las partículas. Es decir

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{E} \mathrm{d}E'\,\mathcal{D}(E') &= \frac{1}{N!} \sum_{\substack{\{\sigma_i\} \\ \sum_{j=1}^{N}\left(\vec{p}_j^{\,2}/2m + \sigma_j \Delta/2\right) < E}} \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{N} \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i} \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{\{\sigma_i\}} \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{N} \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\,\Theta\left(E - \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\vec{p}_j^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}\sigma_j \Delta\right]\right)
\end{aligned}$$

donde $\sum_{\{\sigma_i\}}$ significa *suma sobre las* 2^N *configuraciones* del conjunto $\{\sigma_i\}$.

Reemplazando el resultado anterior en (2.1) se obtiene

$$\boxed{\mathcal{D}(E) = \frac{1}{N!} \sum_{\{\sigma_i\}} \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{N} \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\,\delta\left(E - \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\vec{p}_j^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}\sigma_j \Delta\right]\right)} \tag{2.2}$$

donde hemos usado la identidad $\mathrm{d}\Theta(t)/\mathrm{d}t = \delta(t)$.

Para un valor dado de E, la expresión (2.2) se anula si no es posible anular el argumento de la delta de Dirac para ninguno de los valores posibles de $(\vec{p}_j, \sigma_j)$. Por ejm..., es obvio que $\mathcal{D}(E) = 0$ si $E < -N\Delta/2$. Además

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E\,\mathcal{D}(E) = \frac{1}{N!} \sum_{\{\sigma_i\}} \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{N} \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}$$

lo cual es el número total de estados para N partículas indistinguibles.

b) Demuestre que la expresión anterior se reduce a

$$\mathcal{D}(E) = \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}tE}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta/2} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\Delta/2}\right)^N \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p}{h}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tp^2/2m}\right)^{3N}$$

(4 puntos)

SOLUCIÓN:

Usando la representación integral de Fourier para la delta de Dirac

$$\delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$

en la expresión (2.2) (la integración espacial genera un factor multiplicativo V^N) se obtiene:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(E) &= \frac{V^N}{N!} \sum_{\{\sigma_i\}} \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{N} \int \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\left[E - \sum_{j=1}^{N}\left(\vec{p}_j^{\,2}/2m + \sigma_j \Delta/2\right)\right]} \\
&= \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}tE} \left(\sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \Delta/2} \right) \times \\
&\qquad \left(\frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{N} \int \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t \sum_{j=1}^{N} \vec{p}_j^{\,2}/2m} \right) \\
&= \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}tE} \left(\sum_{\sigma=\pm 1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\sigma\Delta/2} \right)^N \left(\frac{1}{h^3} \int \mathrm{d}^3_{\vec{p}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\vec{p}_j^{\,2}/2m} \right)^N
\end{aligned}$$

y finalmente

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathcal{D}(E) &= \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}tE} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta/2} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\Delta/2} \right)^N \times \\
&\qquad \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p}{h}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}tp^{\,2}/2m} \right)^{3N}
\end{aligned}} \tag{2.3}$$

c) Demuestre que la anterior puede reescribise en la forma

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(E) &= \frac{2^N V^N}{N!} \int_{-\mathrm{i}\infty}^{\mathrm{i}\infty} \frac{\mathrm{d}b}{2\pi\mathrm{i}}\, \mathrm{e}^{\mathcal{F}(b)} \\
\mathcal{F}(b) &= bE + N \ln\cosh\left(\frac{b\Delta}{2}\right) - 3N \ln\lambda(b)
\end{aligned}$$

donde $\lambda^{-1}(b) = \left(\sqrt{2\pi m/b} \right)/h$. $\lambda(b)$ tiene dimensiones de longitud.

(3 puntos)

SOLUCIÓN:

Realizando el cambio de variables $t = -\mathrm{i}b$ en la integración sobre t (ver expresión (2.3)) se obtiene

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(E) &= \frac{V^N}{N!}\int_{-\mathrm{i}\infty}^{\mathrm{i}\infty}\frac{\mathrm{d}b}{2\pi\mathrm{i}}\,\mathrm{e}^{bE}\left[\mathrm{e}^{b\Delta/2}+\mathrm{e}^{-b\Delta/2}\right]^N\left(\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{h}\,\mathrm{e}^{-bp^2/2m}\right)^{3N} \\
&= \frac{V^N}{N!}\int_{-\mathrm{i}\infty}^{\mathrm{i}\infty}\frac{\mathrm{d}b}{2\pi\mathrm{i}}\,\mathrm{e}^{bE}\left[2\cosh\left(\frac{b\Delta}{2}\right)\right]^N\times \\
&\qquad\left(\frac{\sqrt{2m/b}}{h}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{-p^2}}_{=\sqrt{\pi}}\right)^{3N}
\end{aligned}$$

Con $\lambda(b)\equiv h/\sqrt{2\pi m/b}\ \propto b^{1/2}$ se obtiene

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathcal{D}(E) &= \frac{2^N V^N}{N!}\int_{-\mathrm{i}\infty}^{\mathrm{i}\infty}\frac{\mathrm{d}b}{2\pi\mathrm{i}}\,\mathrm{e}^{\mathcal{F}(b)} \\
\mathcal{F}(b) &= bE + N\ln\cosh\left(\frac{b\Delta}{2}\right) - 3N\ln\lambda(b)
\end{aligned}} \tag{2.4}$$

d) Use, para evaluar asintóticamente la integral anterior, el *Método del Descenso mas Rápido* y relacione la coordenada $\widetilde{b}$ del *punto de ensilladura* $\left(\widetilde{b},\mathcal{F}\left(\widetilde{b}\right)\right)$ con la temperatura absoluta T. **(4 puntos)**

SOLUCIÓN:

Básicamente, el método consiste en encontrar el valor $\widetilde{b}$ de b que anula la derivada de $\mathcal{F}(b)$ con el propósito de encontrar máximos de $\mathrm{e}^{\mathrm{Re}\,\mathcal{F}(b)}$ y reducir las oscilaciones de $\mathrm{e}^{i\,\mathrm{Im}\,\mathcal{F}(b)}$ las cuales *generan una cancelación* de la contribución importante alrededor del máximo de $\mathrm{e}^{\mathrm{Re}\mathcal{F}(b)}$. Tal procedimiento provee una región, alrededor de $b=\widetilde{b}$, que genera la contribución mas importante a la integral en cuestión bajo ciertas condiciones: Por ejm... $N\gg 1$ que es usualmente el caso de interes en Mecánica Estadística. El lector debe *repasar* la literatura adecuada para completar esta brevísima descripción.

En definitiva

$$\mathcal{F}'\left(\widetilde{b}\right)=0 \quad\Longrightarrow\quad E+\frac{1}{2}N\Delta\tanh\left(\frac{\widetilde{b}\Delta}{2}\right)-\frac{3}{2}\frac{N}{\widetilde{b}}=0$$

La corrección *Gaussiana* a la integral es omitida puesto que solo estamos interesados en términos tales que $[\ln \mathcal{D}(E)]/N$ es finito en el límite termodinámico ($\lim_{\substack{N\to\infty \\ V\to\infty}} (N/V)$ *finito*) tal que

$$\boxed{\begin{aligned} \ln \mathcal{D}(E) &= N\ln 2 + N\ln V - \ln N! + \ln \mathcal{F}\left(\widetilde{b}\right) \\ &= N\ln 2 + N\ln V - \ln N! \\ &+ \widetilde{b}E + N\ln\cosh\left(\frac{\widetilde{b}\Delta}{2}\right) - 3N\ln\lambda\left(\widetilde{b}\right) \end{aligned}} \tag{2.5}$$

$\widetilde{b}$ se obtiene a partir de la relación

$$E + \frac{1}{2}N\Delta\tanh\left(\frac{\widetilde{b}\Delta}{2}\right) - \frac{3N}{2\widetilde{b}} = 0 \tag{2.6}$$

Sin embargo, la temperatura absoluta T se relaciona con la densidad de estados $\mathcal{D}(E)$ a traves de la relación $1/\mathrm{k_B}T = \partial \ln \mathcal{D}(E)/\partial E$ la cual equivale a la relación termodinámica $1/T = (\partial S/\partial E)_{N,V}$ de lo cual resulta obviamente que

$$\boxed{\frac{1}{\mathrm{k_B}T} = \widetilde{b}} \tag{2.7}$$

e) Demuestre que la *Energía* E del gas viene dada por

$$E = \frac{3}{2}Nk_BT - \frac{1}{2}N\Delta\tanh\left(\frac{\Delta}{2k_BT}\right)$$

(1 punto)

<u>SOLUCIÓN</u>:
Reemplazando $\widetilde{b} = 1/\mathrm{k_B}T$ en la expresión (2.6) se obtiene

$$\boxed{E = \frac{3}{2}Nk_BT - \frac{1}{2}N\Delta\tanh\left(\frac{\Delta}{2k_BT}\right)} \tag{2.8}$$

f) Demuestre que la *Ecuación de Estado* no es afectada por la estructura interna actual de las partículas. **(1 punto)**

SOLUCIÓN:

A partir de la expresión (2.5) para $\ln \mathcal{D}(E)$ podemos *" construir "*, en relación con el sistema en estudio, la primera ley de la termodinámica:

$$\begin{aligned} đQ &= T\,\mathrm{d}S = \mathrm{k_B}T\,\mathrm{d}\left(\ln \mathcal{D}\right) \\ &= \overbrace{\mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial E}}^{=\,1}\,\mathrm{d}E + \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial V}\,\mathrm{d}V + \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial N}\,\mathrm{d}N \end{aligned}$$

la cual equivale a

$$\mathrm{d}E = đQ - \overbrace{\left[\mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial V}\,\mathrm{d}V - \left(-\mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial N}\,\mathrm{d}N\right)\right]}^{đW}$$

Esta es la primera ley de la Termodinámica. Es decir

$$\mathrm{d}E = đQ - đW = đQ - P\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}N\,, \qquad đW = P\mathrm{d}V - \mu\mathrm{d}N$$

$đW$ es el *trabajo realizado* ***por*** *el sistema sobre el medio que lo circunda.* P y $-\mu$ son las *fuerzas generalizadas* asociadas al *volumen* V y al *número de partículas* N, respectivamente:

$$P = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial V}\,, \qquad (\text{ P: Presión }) \tag{2.9}$$

$$\mu = -\mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial N}\,, \qquad (\ \mu\text{: Potencial Químico }) \tag{2.10}$$

Usando las expresiones (2.9) y (2.5) obtendremos

$$\boxed{P = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial\left(N \ln V\right)}{\partial V} \qquad \Longrightarrow \qquad PV = N\mathrm{k_B}T} \tag{2.11}$$

la cual es la ecuación de estado *usual* para el gas ideal clásico.

Note que $\Delta = 0$ no corresponde a esta situación porque aun *sobreviven* los dos estados internos con energía nula. Esta diferencia se hace visible, por ejm..., en la expresión del potencial químico.

g) Pruebe que el *Potencial Químico* μ viene dado por

$$\mu = -\mathrm{k_B}T \ln\left(\frac{2\cosh\left(\Delta/2\mathrm{k_B}T\right)}{n\lambda_{DB}^3}\right) ; \qquad n \equiv \frac{N}{V}, \quad \lambda_{DB} \equiv \lambda\left(\widetilde{b}\right)$$

λ_{DB} es la *Longitud de Onda Térmica de De Broglie*. **(2 puntos)**

SOLUCIÓN:

Usando las expresiones (2.10) y (2.5) obtendremos

$$\begin{aligned}
\mu &= -\mathrm{k_B}T \\
&\times \frac{\partial\left[N\ln 2 + N\ln V - \ln N! + N\ln\cosh\left(\Delta/2\mathrm{k_B}T\right) - 3N\ln\lambda\left(1/\mathrm{k_B}T\right)\right]}{\partial N} \\
&= -\mathrm{k_B}T\left[\ln 2 + \ln V - \ln N + \ln\cosh\left(\frac{\Delta}{2\mathrm{k_B}T}\right) - 3\ln\lambda_{DB}\right] \\
&= -\mathrm{k_B}T\ln\left(\frac{2V\cosh\left(\Delta/2\mathrm{k_B}T\right)}{N\lambda_{DB}^3}\right)
\end{aligned}$$

donde

$$\lambda_{DB} \equiv \lambda\left(\frac{1}{\mathrm{k_B}T}\right) = \frac{h}{\sqrt{2\pi m\mathrm{k_B}T}}$$

es la *Longitud de Onda Térmica de De Broglie*. Finalmente

$$\boxed{\mu = -\mathrm{k_B}T\ln\left(\frac{2\cosh\left(\Delta/2\mathrm{k_B}T\right)}{n\lambda_{DB}^3}\right)} \tag{2.12}$$

donde $n \equiv \lim_{\substack{N\to\infty \\ V\to\infty}} N/V$ es la *densidad de partículas*.

h) Considere el caso $\Delta = 0$. Argumente físicamente por qué el potencial químico debe ser negativo y grande en magnitud para considerar al gas dentro del *ámbito* clásico. Establezca un criterio para obtener una temperatura por encima de la cual es correcto considerar al gas como clásico. Discuta la Física de esta temperatura. **(1 punto)**

SOLUCIÓN:

En este caso, μ se reduce a

$$\mu = -\mathrm{k_B}T\ln\left(\frac{2}{n\lambda_{DB}^3}\right)$$

$d \equiv n^{-1/3}$ es una *medida de la separación* entre partículas. Por ello resulta ser un parámetro adecuado para la discusión (en relación

con λ_{DB}):

$$\mu = -3\mathrm{k_B}T \ln\left(2^{1/3}\,\frac{d}{\lambda_{DB}}\right)$$

λ_{DB} es una medida de la localización de la partícula y efectos cuánticos son despreciables en la medida en que $\lambda_{DB} \ll d$ lo cual significa que $\mu < 0$. En caso contrario, no se puede distinguir la *individualidad* de las partículas y por tanto es estrictamente necesario considerar *globalmente* al gas al momento de extraer consecuencias mecánico-estadísticas: Este es el caso de las *estadísticas cuánticas*.

Puesto que $\lambda_{DB} \propto m^{-1/2}$ y $\propto T^{-1/2}$, es claro que partículas *mas pesadas* y/o altas temperaturas favorece la tendencia a considerar al gas como un sistema clásico: Un caso notable, por ejm..., donde esta conducta no se cumple es el gas de electrones a bajas temperaturas.

Un criterio de validez del caracter clásico del gas se obtiene al cruzar la frontera con $\lambda_{DB} \sim d$: Por ejm... $\lambda_{DB} \ll d$ significa

$$\frac{h}{\sqrt{2\pi m \mathrm{k_B} T}} \ll d \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{k_B}T \gg \frac{h^2}{2\pi m d^2} = 4\pi\,\frac{m_e}{m}\left(\frac{a_0}{d}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$$

$a_0 = 0{,}529$ Å es el *radio de Bohr* y m_e es la *masa del electrón*. $\hbar^2/2m_e a_0^2 = 13{,}6$ eV es la *energía de ionización del átomo de hidrógeno*. 1 eV ≈ 11605 K con $\mathrm{k_B} = 1$. Así mismo

$$4\pi\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = 4\pi \times 13{,}6 \times 11605\,\mathrm{K} \approx 1{,}98 \times 10^6\,\mathrm{K} \quad \text{con} \quad \mathrm{k_B} = 1$$

El gas puede considerarse clásico a temperaturas T que satisfacen

$$\boxed{T \gg 1{,}98 \times 10^6 \times \frac{m_e}{m}\left(\frac{a_0}{d}\right)^2\,\mathrm{K}} \tag{2.13}$$

Por ejm..., para el Oxígeno el *número de masa* es 16 lo cual significa $m_e/m \sim 1/\,(16 \times 1{,}8361)$ y supongamos que $d/a_0 \sim 20$. Entonces

$$T \gg \frac{1{,}98 \times 10^6}{16 \times 1{,}8361 \times 400}\,\mathrm{K} \qquad \Longrightarrow \qquad T \gg 168{,}5\,\mathrm{K}$$

mientras para un gas de electrones ($m = m_e$) la *región clásica* ocurre a muy altas temperaturas.

i) Retornando al caso $\Delta > 0$: ¿ Mejora la posibilidad de considerar al gas como clásico ?. Discuta su respuesta. **(1 punto)**

SOLUCIÓN:

Recordemos que en este caso

$$\mu = -\mathrm{k_B}T \ln\left(\frac{2\cosh\left(\Delta/2\mathrm{k_B}T\right)}{n\lambda_{DB}^3}\right)$$

Puesto que el factor $\cosh\left(\Delta/2\mathrm{k_B}T\right) \geq 1$ es claro que su presencia favorece el *caracter negativo* del potencial químico μ y por tanto el caracter clásico del gas en consideración.

2.1. Ejercicios adicionales

Ejercicio 2.1

Un gas ideal clásico de electrones está confinado a un *tubo*, cuyo eje descansa a lo largo del eje z, de sección transversal A. Cada partícula tiene masa m y carga $-e < 0$. Un *fondo* de cargas positivas, en reposo, es distribuído uniformemente en el interior del tubo con el *único* propósito de mantener la neutralidad eléctrica. Suponga que una corriente eléctrica $I = -\left(neA/m\right)\sum_i p_{iz}$ circula por el tubo a lo largo del eje z. $n = \lim_{\substack{N\to\infty \\ V\to\infty}} N/V$ es la densidad de partículas. N y V es el número de partículas y el volumen del sistema, respectivamente. p_{iz} es la componente z del momento lineal de la i-ésima partícula.

1. Evalue la densidad de estados $\mathcal{D}\left(E, I\right)$ del sistema para valores dados de la energía E y la corriente eléctrica I.
2. Evalue la energía E del sistema en términos de la corriente eléctrica I y la temperatura T.
3. Suponga que el número de partículas N y el volumen V permanecen constantes. Evalue el calor específico $đQ/\mathrm{d}T$
   a) a *corriente eléctrica constante* (C_I)
   b) y a *energía constante* (C_E).

SOLUCIÓN:

1. Es obvio, de la solución de la tarea, que $\mathcal{D}\left(E, I\right)$ viene dada por

$$\mathcal{D}\left(E, I\right) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \prod_i \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\, \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\, \delta\left(E - \sum_i \frac{p_i^2}{2m}\right) \delta\left(I + \frac{neA}{m}\sum_i p_{iz}\right)$$

Usemos, en la expresión anterior, la representación de Fourier de la delta de Dirac:

$$\delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$

$\mathcal{D}(E, I)$ se reduce a

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(E,I) &= \frac{V^N}{N!h^{3N}} \int \prod_i \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\left(E-\sum_i p_i^2/2m\right)} \times \\
&\qquad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\xi}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi\left[I+(neA/m)\sum_i p_{iz}\right]} \\
&= \frac{V^N}{N!h^{3N}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\xi}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(tE+\xi I)} \times \\
&\qquad \int \prod_i \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sum_i\left[tp_i^2/2m-\xi neAp_{iz}/m\right]} \\
&= \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\xi}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(tE+\xi I)} \left[\int \frac{\mathrm{d}^3_{\vec{p}}}{h^3}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(tp^2/2m-\xi neAp_z/m\right)}\right]^N \\
&= \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\xi}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(tE+\xi I)} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p}{h}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}tp^2/2m}\right)^{2N} \times \\
&\qquad \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_z}{h}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(tp_z^2/2m-\xi neAp_z/m\right)}\right]^N
\end{aligned}$$

La integración sobre p_z viene dada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{I} &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_z}{h}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(tp_z^2/2m-\xi neAp_z/m\right)} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_z}{h}\, \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}t/2m)\left(p_z^2-2\xi neAp_z/t\right)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_z}{h}\, \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}t/2m)\left[(p_z-\xi neAp_z/t)^2-\xi^2(neA)^2/t^2\right]} \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi^2(neA)^2/2mt} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_z}{h}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}tp_z^2/2m}
\end{aligned}$$

Con la definición

$$\frac{1}{\lambda(b)} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_z}{h}\, \mathrm{e}^{-bp_z^2/2m} \qquad \Longrightarrow \qquad \lambda(b) = h\sqrt{\frac{b}{2\pi m}} \propto b^{1/2}$$

se obtiene

$$\mathcal{D}(E,I) = \frac{V^N}{N!} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\xi}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(tE+\xi I)-3N\ln\lambda(it)+\mathrm{i}N\left[(neA)^2/2m\right]\xi^2/t}$$

En el límite termodinámico, la contribución mas importante del integrando ocurre para aquellos valores $\widetilde{t}$ y $\widetilde{\xi}$ de t y ξ, respectivamente, donde las derivadas del argumento de la exponencial se anulan:

$$\mathrm{i}E - \frac{3N}{2\widetilde{t}} - \mathrm{i}N\,\frac{(neA)^2}{2m}\left(\frac{\widetilde{\xi}}{\widetilde{t}}\right)^2 = 0 \tag{2.14}$$

$$iI + \mathrm{i}N\,\frac{(neA)^2}{m}\,\frac{\widetilde{\xi}}{\widetilde{t}} = 0 \tag{2.15}$$

cuyas soluciones son

$$\widetilde{t} = -\frac{3N/2}{E - mI^2/2N\,(neA)^2}\,\mathrm{i} \tag{2.16}$$

$$\widetilde{\xi} = -\frac{mI}{N\,(neA)^2}\,\widetilde{t} = \frac{mI}{N\,(neA)^2}\,\frac{3N/2}{E - mI^2/2N\,(neA)^2}\,\mathrm{i} \tag{2.17}$$

Así mismo (salvo factores irrelevantes en el límite termodinámico):

$$\ln\mathcal{D}\,(E,I) = \ln\left(\frac{V^N}{N!}\right) + \mathrm{i}\left(\widetilde{t}E + \widetilde{\xi}I\right) - 3N\ln\lambda\left(i\widetilde{t}\right) + \mathrm{i}N\,\frac{(neA)^2}{2m}\,\frac{\widetilde{\xi}^2}{\widetilde{t}} \tag{2.18}$$

Usando los resultados (2.16) y (2.17)

$$\begin{aligned}
\ln\mathcal{D}\,(E,I) &= \ln\left(\frac{V^N}{N!}\right) - 3N\ln\lambda\left(\mathrm{i}\widetilde{t}\right) + \mathrm{i}\widetilde{t}\left[E + \frac{\widetilde{\xi}}{\widetilde{t}}\,I + N\,\frac{(neA)^2}{2m}\left(\frac{\widetilde{\xi}}{\widetilde{t}}\right)^2\right] \\
&= \ln\left(\frac{V^N}{N!}\right) - 3N\ln\lambda\left(\mathrm{i}\widetilde{t}\right) + \mathrm{i}\widetilde{t}\left[E - \frac{mI^2}{2N\,(neA)^2}\right] \\
&= \ln\left(\frac{V^N}{N!}\right) - 3N\ln\lambda\left(\mathrm{i}\widetilde{t}\right) + \frac{3}{2}\,N \\
&= \ln\left(\frac{V^N}{N!}\right) + \frac{3N}{2}\,\ln\left(\frac{2\widetilde{E}}{3N}\right) + \frac{3}{2}\,N\,, \quad \widetilde{E} \equiv E - \frac{mI^2}{2N\,(neA)^2}
\end{aligned}$$

En la última linea de esta expresión no tomamos en cuenta los factores que son irrelevantes en el límite termodinámico. Por tanto, en este límite

$$\boxed{\mathcal{D}\,(E,I) = \frac{V^N\,\widetilde{E}^{3N/2}\,\mathrm{e}^{3N/2}}{N!}\,, \qquad \widetilde{E} \equiv E - \frac{mI^2}{2N\,(neA)^2}} \tag{2.19}$$

2. Con el resultado anterior y

$$\frac{1}{\mathrm{k_B}T} = \frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial E} = \frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial \widetilde{E}} = \frac{3N}{2\widetilde{E}} \qquad \Longrightarrow \qquad \widetilde{E} = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B}T$$

se obtiene

$$\boxed{E = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B}T + \frac{mI^2}{2N\left(neA\right)^2}} \tag{2.20}$$

Este resultado tambien puede obtenerse a partir de (2.18):

$$\frac{1}{\mathrm{k_B}T} = \frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial E} = \mathrm{i}\widetilde{t} \tag{2.21}$$

lo cual puede combinarse con la expresión (2.16) para generar el resultado final dado en (2.20).

Note que E no depende del sentido de la corriente eléctrica sino de su magnitud.

3. Escribamos la primera ley de la termodinámica considerando a E e I como las variables del sistema:

$$đQ = \mathrm{k_B}T\,\mathrm{d}\ln\mathcal{D} = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial E}\,\mathrm{d}E + \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial I}\,\mathrm{d}I$$

Puesto que $1/\mathrm{k_B}T = \partial \ln \mathcal{D}/\partial E$ y (ver (2.17) y (2.21))

$$F_I \equiv \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}}{\partial I} = \mathrm{k_B}T\left(i\widetilde{\xi}\right) = \mathrm{k_B}T\left[-\frac{mI}{N\left(neA\right)^2}\,i\widetilde{t}\right] = -\frac{mI}{N\left(neA\right)^2}$$

la primera ley de la termodinámica se reduce a

$$đQ = \mathrm{d}E - \frac{m}{N\left(neA\right)^2}\,I\,\mathrm{d}I \tag{2.22}$$

F_I es la *fuerza generalizada* asociada a la corriente eléctrica I.

a) Cuando I es constante, (2.22) se reduce a $đQ = \mathrm{d}E$. Por tanto

$$\boxed{C_I = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B}} \tag{2.23}$$

donde hemos usado (2.20) con I constante.

b) Cuando E es constante, (2.22) se reduce a

$$đQ = -\frac{m}{N\left(neA\right)^2} I \, \mathrm{d}I = \mathrm{d}\left[-\frac{m}{2N\left(neA\right)^2} I^2\right]$$

Usando (2.20) con E constante se obtiene

$$\boxed{C_E = \frac{3}{2} N \mathrm{k_B}} \tag{2.24}$$

■

Capítulo 3

Tarea 3: Gas Ideal Clásico (*continuación*)

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

04 / 07 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/
TAREA[1] Nº 3

1. Considere un gas ideal *clásico* que consiste de N partículas *idénticas* de masa m en un recipiente de volumen V y en equilibrio termodinámico a la temperatura T. Cada partícula posee un momento magnético que solo puede tomar los valores $\pm\mu\hat{z}$ tal que $(\vec{r}, \vec{p}, \sigma)$ es un punto en el espacio de fases de *una* partícula. $\mu > 0$ y σ puede tomar los valores ± 1. La energía del gas, para una configuración dada $\{(\vec{r}_i, \vec{p}_i, \sigma_i)\}$, viene dada por $\sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i^{\,2}/2m - J\mathcal{M}^2/2N\mu^2$ con $J > 0$ y $\mathcal{M} = \mu \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$. $\mathcal{M}$ es la *componente z del momento magnético total del gas*.

   a) Evalue la *función de partición* Z, en el conjunto canónico, para este sistema. **(4 puntos)**

   SOLUCIÓN: Esta viene dada por

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\{\sigma_i\}} \int \frac{\prod_i \mathrm{d}^3_{\vec{r}_i} \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}}{h^{3N}} \, \mathrm{e}^{-\beta\left(\sum_i p_i^2/2m - J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 - H\mathcal{M}\right)}$$

   donde $\mathcal{M} = \mu \sum_i \sigma_i$ con $\sigma_i = \pm 1$. Hemos agregado un campo magnético H ($H \to 0^+$) el cual aparece con el propósito de facilitar la evaluación posterior de $\langle \mathcal{M} \rangle$ (rompimiento de simetría).

[1] FECHA DE ENTREGA: **lunes 11 de julio de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

Puesto que los grados de libertad de traslación y magnéticos *no interactuan*, la función de partición se reduce a $Z = Z_{tr} Z_{mag}$ donde

$$\begin{aligned} Z_{tr} &= \frac{V^N \lambda_{DB}^{-3N}}{N!}, \quad \lambda_{DB} \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi \mathrm{k_B} m T}}; \qquad \text{(Ver Capítulo 2)} \\ Z_{mag} &= \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta\left(J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 + H\mathcal{M}\right)} = \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta H \mu \sum_i \sigma_i} \ \mathrm{e}^{\beta J \left(\sum_i \sigma_i\right)^2/2N} \end{aligned}$$

Usando resultados del Apéndice B, Z_{mag} puede reescribirse en la siguiente forma:

$$\begin{aligned} Z_{mag} &= \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta H \mu \sum_i \sigma_i} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{-x^2/4 + \left(\sqrt{\beta J/2N} \ \sum_i \sigma_i\right) x} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{-x^2/4} \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\left(\beta\mu H + \sqrt{\beta J/2N} \ x\right) \sum_i \sigma_i} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{-x^2/4} \times \\ &\qquad \left[\mathrm{e}^{\beta\mu H + \sqrt{\beta J/2N} \ x} + \mathrm{e}^{-\left(\beta\mu H + \sqrt{\beta J/2N} \ x\right)} \right]^N \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{-x^2/4} \left[2\cosh\left(\beta\mu H + \sqrt{\frac{\beta J}{2N}} \ x\right)\right]^N \\ &= \frac{2^N}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{\phi(x)} \end{aligned}$$

donde

$$\phi(x) = -\frac{1}{4} x^2 + N \ln\left(\cosh\left(\beta\mu H + \sqrt{\frac{\beta J}{2N}} \ x\right)\right)$$

Para completar la evaluación de Z_{mag} solo es necesario conocer el *punto de ensilladura* $(\widetilde{x}, \phi(\widetilde{x}))$ de la integral ($\phi'(\widetilde{x}) = 0$) tal que, en el límite termodinámico,

$$\ln Z_{mag} = N \ln 2 + \phi(\widetilde{x})$$

$\widetilde{x}$ es determinado por la ecuación

$$-\frac{1}{2}\widetilde{x} + \sqrt{\frac{\beta J N}{2}} \ \tanh\left(\beta\mu H + \sqrt{\frac{\beta J}{2N}} \ \widetilde{x}\right) = 0 \qquad (3.1)$$

En conclusión, la función de partición Z del sistema viene dada por

$$\boxed{\begin{array}{c} Z \;=\; \dfrac{V^N \lambda_{DB}^{-3N}}{N!}\, 2^N\, \mathrm{e}^{\phi(\widetilde{x})}\,, \qquad \lambda_{DB} \equiv \dfrac{h}{\sqrt{2\pi \mathrm{k_B} m T}} \\ \widetilde{x} \text{ es determinado por la Ec. (3.1)} \end{array}} \tag{3.2}$$

b) Determine la *ecuación de estado*. **(2 puntos)**

<u>SOLUCIÓN</u>: Usando el resultado (3.2) y la definición de la presión P como fuerza generalizada, se obtiene:

$$P = \mathrm{k_B} T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = \mathrm{k_B} T \frac{\partial \ln \left(V^N\right)}{\partial V}$$

$$\boxed{PV = N \mathrm{k_B} T} \tag{3.3}$$

Este es el resultado usual de un gas ideal el cual se obtiene aquí puesto que los grados de libertad de traslación y magnéticos están *desacoplados*.

c) Evalue el valor medio $\langle \mathcal{M} \rangle$. Estudie *en detalle* su dependencia con la temperatura. **(4 puntos)**

<u>SOLUCIÓN</u>:

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{M} \rangle &= \lim_{H \to 0^+} \frac{Z_{tr} \sum_{\{\sigma_i\}} \left[\mathrm{e}^{\beta\left(J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 + H\mathcal{M}\right)}\, \mathcal{M} \right]}{Z_{tr} \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta(J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 + H\mathcal{M})}} \\
&= \lim_{H \to 0^+} \frac{\beta^{-1} \partial \left\{ \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta\left(J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 + H\mathcal{M}\right)} \right\} / \partial H}{\sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta(J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 + H\mathcal{M})}} \\
&= \mathrm{k_B} T \lim_{H \to 0^+} \frac{\partial}{\partial H} \ln \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta\left(J\mathcal{M}^2/2N\mu^2 + H\mathcal{M}\right)} \\
&= \mathrm{k_B} T \lim_{H \to 0^+} \frac{\partial \ln Z_{mag}}{\partial H} \\
&= \mathrm{k_B} T \lim_{H \to 0^+} \left[\underbrace{\frac{\partial \phi\left(\widetilde{x}, H\right)}{\partial \widetilde{x}}}_{=\,0} \frac{\partial \widetilde{x}}{\partial H} + \frac{\partial \phi\left(\widetilde{x}, H\right)}{\partial H} \right]
\end{aligned}$$

En esta expresión hemos usado la notación $\phi(\widetilde{x}, H)$ (en vez de $\phi(\widetilde{x})$) para enfatizar que $\widetilde{x}$ depende de H a traves de la Ec. (3.1). $\langle \mathcal{M} \rangle$ viene dado por

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M} \rangle &= \mathrm{k_B} T \lim_{H \to 0^+} N \tanh\left(\beta\mu H + \sqrt{\frac{\beta J}{2N}}\ \widetilde{x}\right) \beta\mu \\ &= N\mu \tanh\left(\sqrt{\frac{\beta J}{2N}}\ \widetilde{x}\right) = N\mu \frac{1}{2}\widetilde{x}\sqrt{\frac{2}{\beta J N}} = \mu\sqrt{\frac{N}{2\beta J}}\ \widetilde{x} \end{aligned}$$

En la última línea hemos tomado el límite $H \to 0^+$ tal que (sin complicar la notación) $\widetilde{x}$ corresponde a este caso límite:

$$\widetilde{x} = \sqrt{\frac{2\beta J}{N}}\ \frac{\langle \mathcal{M} \rangle}{\mu}, \qquad H \to 0^+$$

Reemplazando este resultado en la Ec. (3.1) se obtiene:

$$\frac{\langle \mathcal{M} \rangle}{N\mu} = \tanh\left(\frac{J}{\mathrm{k_B} T}\frac{\langle \mathcal{M} \rangle}{N\mu}\right), \qquad \left(H \to 0^+ \quad \Longrightarrow \quad \langle \mathcal{M} \rangle \geq 0 \right) \tag{3.4}$$

La temperatura de transición magnética T_c se obtiene como

$$1 = \lim_{\substack{\langle \mathcal{M} \rangle \to 0^+ \\ T \to T_c^-}} \frac{1}{\langle \mathcal{M} \rangle / N\mu} \tanh\left(\frac{J}{\mathrm{k_B} T}\frac{\langle \mathcal{M} \rangle}{N\mu}\right) \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{k_B} T_c = J$$

La Ec. (3.4) describe una *transición de fase de segundo orden*[1] la cual tiene soluciones con $\langle \mathcal{M} \rangle \equiv 0$ que corresponden al *estado normal* (no magnético). Dejamos al lector la tarea de demostrar que las soluciones magnéticas, con $|\langle \mathcal{M} \rangle| > 0$, son mas *estables*, en el sentido termodinámico, en el rango de temperaturas $0 \leq T < T_c$.

En conclusión, la ecuación que describe la transición magnética elaborada con los argumentos de arriba viene dada por:

$$\boxed{m = \tanh\left(\frac{m}{t}\right), \qquad m \equiv \frac{\langle \mathcal{M} \rangle}{N\mu}, \qquad t \equiv \frac{T}{T_c} \qquad \text{(Ver Figura 3.1)}} \tag{3.5}$$

[1] El parámetro de orden $\langle \mathcal{M} \rangle \to 0$ cuando $T \to T_c^-$. En contraste, en transiciones de fase de primer orden el parámetro de orden *" cae abruptamente "* a cero para valores de $T <$ " T_c " donde " T_c " $= J/\mathrm{k_B}$.

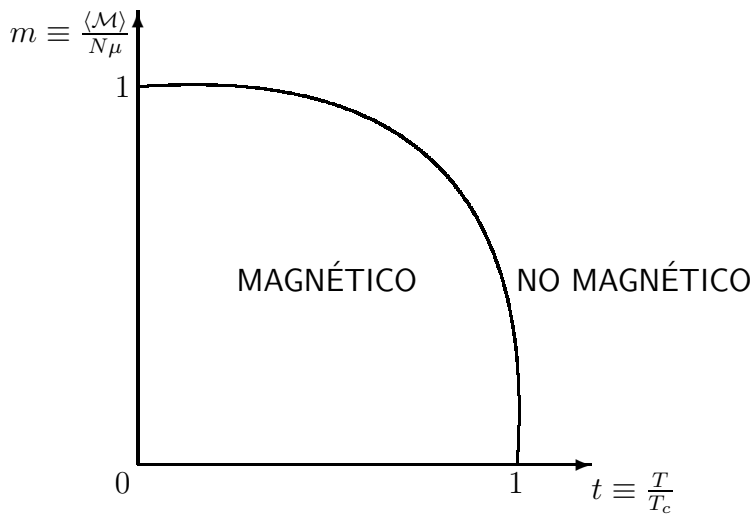


Figura 3.1: Variación de m vs. t obtenida a partir de la Ec.(3.5).

2. Considere un gas ideal relativista (*clásico*) que consiste de N partículas monoatómicas *idénticas*. La *masa en reposo* de cada partícula es m. Tal gas está confinado a un recipiente de volumen V y se encuentra en equilibrio termodinámico a la temperatura T. La energía por partícula viene dada por $E_{\vec{p}} = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}$ donde $\vec{p}$ es el momento lineal de la partícula. c es la *velocidad de la luz*.

   a) Evalue la *función de partición* Z_R, en el conjunto canónico, para este sistema y discuta la validez de la aproximación clásica. **(4 puntos)**

   SOLUCIÓN:

   Z_R viene dada por

$$
\begin{aligned}
Z_R &= \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{\mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\, \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}}{h^3}\, \mathrm{e}^{-\beta \sum_{i=1}^{N} c\sqrt{p_i^2 + (mc)^2}} \\
&= \frac{V^N}{N!} \left[\left(\frac{mc}{h}\right)^3 \int \mathrm{d}^3_{\vec{p}}\, \mathrm{e}^{-\beta mc^2 \sqrt{p^2+1}} \right]^N \\
&= \frac{V^N}{N!}\, \mathrm{e}^{-N\beta mc^2} \left[\left(\frac{mc}{h}\right)^3 \int \mathrm{d}^3_{\vec{p}}\, \mathrm{e}^{-\beta mc^2 \left(\sqrt{p^2+1}\, -1\right)} \right]^N \\
&= \frac{V^N}{N!}\, \mathrm{e}^{-N\beta mc^2} \left[\left(\frac{mc}{h}\right)^3 \int_0^\infty \mathrm{d}p\, 4\pi p^2\, \mathrm{e}^{-\beta mc^2 \left(\sqrt{p^2+1}\, -1\right)} \right]^N
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{V^N}{N!}\,\mathrm{e}^{-N\beta mc^2}\left\{\frac{1}{\lambda_m}\left[\int_0^\infty \mathrm{d}p\,4\pi p^2\,\mathrm{e}^{-\beta mc^2\left(\sqrt{p^2+1}\,-1\right)}\right]^{1/3}\right\}^{3N} \\
&= \mathrm{e}^{-\beta mc^2}\,\frac{V^N\lambda_R^{-3N}}{N!}\,, \qquad \lambda_m \equiv \frac{h}{mc}
\end{aligned}
$$

λ_R viene dado por:

$$
\frac{1}{\lambda_R^3} \equiv \frac{1}{\lambda_m^3}\,\mathrm{e}^{\alpha}\int_0^\infty \mathrm{d}p\,4\pi p^2\,\mathrm{e}^{-\alpha\sqrt{p^2+1}}\ ; \quad \alpha \equiv \beta mc^2 = \frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}
$$

Con el cambio de variables ($p \equiv \operatorname{senh}\theta$) se obtiene

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\lambda_R^3} &= 4\pi\,\frac{\mathrm{e}^{\alpha}}{\lambda_m^3}\int_0^\infty \mathrm{d}\theta\,\cosh(\theta)\operatorname{senh}^2(\theta)\,\mathrm{e}^{-\alpha\cosh\theta} \\
&= -4\pi\,\frac{\mathrm{e}^{\alpha}}{\lambda_m^3}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\left[\int_0^\infty \mathrm{d}\theta\,\operatorname{senh}^2(\theta)\,\mathrm{e}^{-\alpha\cosh\theta}\right] \\
&= 4\pi\,\frac{\mathrm{e}^{\alpha}}{\lambda_m^3}\left\{-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\left[\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)}{\alpha}\right]\right\} \\
&= -4\pi\,\frac{\mathrm{e}^{\alpha}}{\lambda_m^3}\,\alpha\left(\frac{1}{\alpha}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\right)^1\left[\alpha^{-1}\mathrm{K}_1(\alpha)\right] \\
&= -\frac{4\pi\,\mathrm{e}^{\alpha}}{\lambda_m^3}\,\alpha\left[-\alpha^{-2}\mathrm{K}_2(\alpha)\right] = \frac{4\pi}{\lambda_m^3}\,\frac{\mathrm{e}^{\alpha}\mathrm{K}_2(\alpha)}{\alpha}
\end{aligned}
$$

donde $\mathrm{K}_\nu(z)$ es una *función de Bessel modificada*[2]. En esta derivación hemos usado (la numeración **resaltada** corresponde a la referencia en pie de pág. 2)

$$
(\mathbf{9.6.23}): \qquad \mathrm{K}_\nu(z) = \frac{\pi^{1/2}\,(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu+1/2)}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-z\cosh(t)}\,\sinh^{2\nu}(t)\,\mathrm{d}t
$$

$$
\Re\nu > -\frac{1}{2}\,, \qquad |\arg z| < \frac{\pi}{2}
$$

$$
(\mathbf{9.6.28}): \qquad \left(\frac{1}{z}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)^k\left[z^{-\nu}\,\mathrm{e}^{i\nu\pi}\,\mathrm{K}_\nu(z)\right] = z^{-\nu-k}\,\mathrm{e}^{i(\nu+k)\pi}\,\mathrm{K}_{\nu+k}(z)\ ;
$$

$$
k = 0, 1, 2, \ldots
$$

[2]Ver Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, Ed. por *M. Abramowitz* e *I. A. Stegun*. Dover 1965.

y propiedades de la función Gamma: $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ con $z \neq 0, -1, -2, \ldots$ y $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.
En conclusión

$$\boxed{\begin{aligned} Z_R &= \mathrm{e}^{-N\alpha}\,\frac{V^N\,\lambda_R^{-3N}}{N!} \\ \lambda_R = \lambda_m\,(4\pi)^{-1/3}\left[\frac{\alpha\,\mathrm{e}^{-\alpha}}{\mathrm{K}_2(\alpha)}\right]^{1/3}, &\qquad \alpha = \beta mc^2 = \frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T} \end{aligned}} \tag{3.6}$$

Para estudiar la validez de la *aproximación clásica* es conveniente estudiar la entropía S puesto que es bien conocido que esta adquiere valores negativos debajo de cierta temperatura que denotaremos T_{deg}:

$$\begin{aligned} \frac{S}{N\mathrm{k_B}} &= \frac{1}{N}\left(\frac{E}{\mathrm{k_B}T} + \ln Z_R\right) = \frac{1}{N}\left(-\beta\,\frac{\partial \ln Z_R}{\partial\beta} + \ln Z_R\right) \\ &= -\frac{1}{N}\,\alpha\left(\frac{\partial \ln Z_R}{\partial\alpha} - \frac{1}{\alpha}\,\ln Z_R\right) \\ &= -\frac{1}{N}\,\alpha^2\left(\frac{1}{\alpha}\,\frac{\partial \ln Z_R}{\partial\alpha} - \frac{1}{\alpha^2}\,\ln Z_R\right) \\ &= -\frac{1}{N}\,\alpha^2\,\frac{\partial\left(\alpha^{-1}\ln Z_R\right)}{\partial\alpha} = -\alpha^2\,\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\alpha^{-1}\,\frac{\ln Z_R}{N}\right) \end{aligned}$$

Puesto que solo estamos interesados en el límite termodinámico

$$\begin{matrix} n \\ s/\mathrm{k_B} \end{matrix} \equiv \lim_{\substack{N\to\infty \\ V\to\infty \\ S\to\infty}} \begin{matrix} \left(\dfrac{N}{V}\right) \\ \left(\dfrac{S}{N\mathrm{k_B}}\right) \end{matrix}, \qquad n, s \text{ finitos}$$

podemos reescribir (en tal límite) $(\ln Z_R)/N$ de forma tal que

$$\begin{aligned} \frac{\ln Z_R}{N} &= \frac{-N\alpha + N\ln V - 3N\ln\lambda_R - \overbrace{\ln(N!)}^{\approx\, N\ln N - N}}{N} \\ &\to -\alpha - \ln n - 3\ln\lambda_R = -\alpha - \ln\left(n\lambda_R^3\right) \end{aligned}$$

Por tanto

$$\frac{s}{\mathrm{k_B}} = -\alpha^2\,\frac{\partial}{\partial\alpha}\left[-1 - \alpha^{-1}\ln\left(n\lambda_R^3\right)\right]$$

$$
\begin{aligned}
&= \alpha^2 \frac{\partial}{\partial \alpha}\left[\alpha^{-1}\ln\left(\frac{n\lambda_m^3}{4\pi}\right)+\alpha^{-1}\ln\alpha-1-\alpha^{-1}\ln \mathrm{K}_2(\alpha)\right] \\
&= -\ln\left(\frac{n\lambda_m^3}{4\pi}\right)-\ln\alpha+1+\ln \mathrm{K}_2(\alpha)-\alpha\frac{\mathrm{K}_2'(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)} \\
&= -\ln\left(\frac{n\lambda_m^3}{4\pi}\right)-\ln\alpha+1+\ln \mathrm{K}_2(\alpha)-\alpha\left[-\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}-\frac{2}{\alpha}\right]
\end{aligned}
$$

donde hemos usado

$$
(\mathbf{9.6.26}): \qquad \mathrm{K}_\nu'(z) = -\mathrm{K}_{\nu-1}(z) - \frac{\nu \mathrm{K}_\nu(z)}{z} \tag{3.7}
$$

La expresión para $s/\mathrm{k_B}$ resulta ser:

$$
\begin{aligned}
\frac{s}{\mathrm{k_B}} &= -\ln\left(\frac{n\lambda_m^3}{4\pi}\right)+\mathrm{D}(\alpha) \\
\mathrm{D}(\alpha) &\equiv 3-\ln\alpha+\ln \mathrm{K}_2(\alpha)+\alpha\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}
\end{aligned}
$$

Usando las relaciones

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{9.6.8}): \qquad \mathrm{K}_0(z) \sim -\ln z\,, \qquad z\to 0 \\
&(\mathbf{9.6.9}): \qquad \mathrm{K}_\nu(z) \sim \frac{1}{2}\Gamma(\nu)\left(\frac{1}{2}z\right)^{-\nu}\;; \quad \nu \text{ fijo}\,,\ \Re\nu>0\,,\ z\to 0
\end{aligned} \tag{3.8}
$$

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{9.7.2}): \qquad \mathrm{K}_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\ \mathrm{e}^{-z}\left[1+\frac{\delta-1}{8z}+\frac{(\delta-1)(\delta-9)}{2!\,(8z)^2}+\cdots\right] \\
&\qquad\qquad \delta \equiv 4\nu^2\,, \quad |\arg z| < \frac{3\pi}{2}\,, \quad |z|\to\infty
\end{aligned} \tag{3.9}
$$

podemos obtener la conducta de $\mathrm{D}(\alpha)$ en los casos límites $\alpha \gg 1$ (bajas temperaturas: $\mathrm{k_B}T \ll mc^2$) y $\alpha \gtrsim 0$ (altas temperaturas: $\mathrm{k_B}T \gg mc^2$):

$$
\mathrm{D}(\alpha) \sim \begin{cases} -\dfrac{3}{2}\ln\alpha\,, & \alpha \gg 1,\ \left(\mathrm{k_B}T \ll mc^2\right) \\ -3\ln\alpha\ \ , & \alpha \gtrsim 0,\ \left(\mathrm{k_B}T \gg mc^2\right) \end{cases}
$$

El lector puede demostrar que $\mathrm{D}(\alpha)$ es una función *decreciente* con α (ver Figura 3.2) y que se anula en $\alpha \approx 4{,}907545032$. Por tanto la

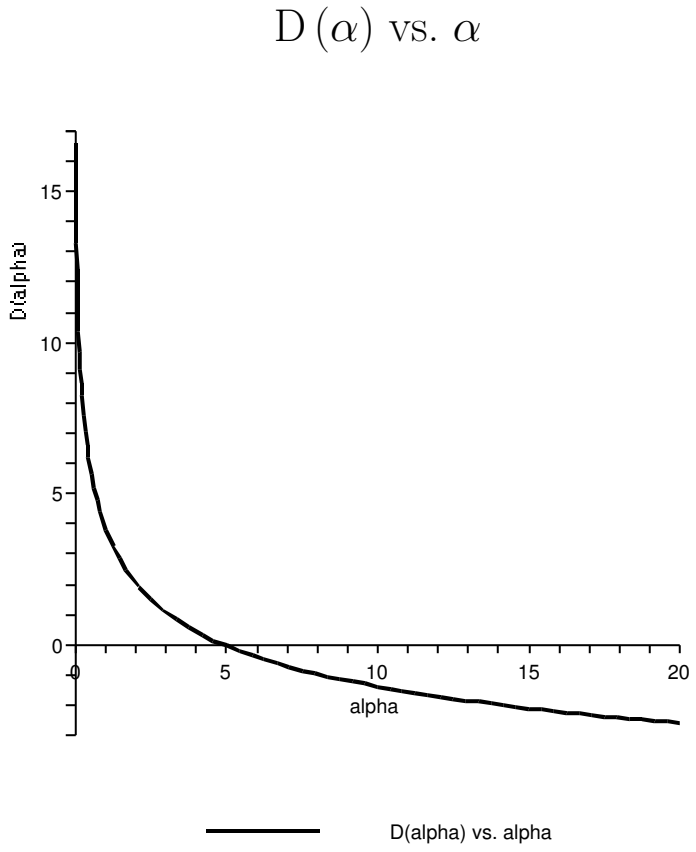


Figura 3.2: Variación de D (α) como función de α. La región *mas favorable* a la aproximación clásica corresponde a aquella que es cercana al eje vertical y " muy alejada hacia abajo " del eje horizontal.

condición de validez de la aproximación clásica $s/\mathrm{k_B} \gg 0$ equivale a:

$$n^{1/3}\lambda_m\,\mathrm{e}^{-\mathrm{D}(\alpha)/3} \ll (4\pi)^{1/3}$$

En los casos límites:

- *Bajas temperaturas* $\left(\ \mathrm{k_B}T \ll mc^2\ \right)$:

$$\begin{aligned}(4\pi)^{1/3} &\gg n^{1/3}\lambda_m\,\mathrm{e}^{\ln(\alpha)/2} = n^{1/3}\lambda_m\alpha^{1/2} = n^{1/3}\frac{h}{mc}\sqrt{\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}}\\ &= n^{1/3}\underbrace{\frac{h}{\sqrt{2\pi m\mathrm{k_B}T}}}_{\lambda_{DB}}\sqrt{2\pi}\end{aligned}$$

λ_{DB} es la longitud de onda térmica de De Broglie usual (en el límite del gas ideal clásico no relativista). La condición de validez de la aproximación clásica se reduce a[3]:

$$\boxed{\frac{\lambda_{DB}}{n^{-1/3}} \ll \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/6} \approx 0{,}9275\,, \qquad \mathrm{k_B}T \ll mc^2} \tag{3.10}$$

Note que, como se espera, el resultado es independiente de la velocidad de la luz c.

- *Altas temperaturas* $\left(\ \mathrm{k_B}T \gg mc^2\ \right)$:

$$\begin{aligned}(4\pi)^{1/3} &\gg n^{1/3}\lambda_m\,\mathrm{e}^{\ln(\alpha)} = n^{1/3}\lambda_m\alpha = n^{1/3}\frac{h}{mc}\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}\\ &= n^{1/3}\left(\frac{hc}{2\pi^{1/3}\mathrm{k_B}T}\right)2\pi^{1/3}\end{aligned}$$

El factor entre paréntesis corresponde a la *longitud térmica* λ_{ur} típica en el límite ultrarrelativista:

$$\lambda_{ur} \equiv \left[\int_0^\infty \mathrm{e}^{-pc/(\mathrm{k_B}T)}4\pi p^2\,\frac{\mathrm{d}p}{h^3}\right]^{-1/3} = \frac{hc}{2\pi^{1/3}\mathrm{k_B}T}$$

La condición de validez de la aproximación clásica, en este caso límite, se reduce a:

$$\boxed{\frac{\lambda_{ur}}{n^{-1/3}} \ll 2^{-1/3} \approx 0{,}7937\,, \qquad \mathrm{k_B}T \gg mc^2} \tag{3.11}$$

[3] $n^{-1/3}$ es una medida de la separación interpartícula.

Note que, como se espera, el resultado es independiente de la *masa en reposo* m.

Con estos resultados y con la ayuda de la Figura 3.2 podemos concluir que *altas temperaturas y/o bajas densidades son favorables a la validez de la aproximación clásica.*

Nitrógeno (N_2)				
T	$\sim$	$300\,\mathrm{K}$	$\sim$	Temperatura Ambiente
P	$\sim$	$10^6\ \dfrac{\text{dinas}}{\text{cm}^2}$	$\sim$	Presión Atmosférica[4]
n	$\sim$	$2{,}5\times 10^{19}\ \dfrac{\text{moléculas}}{\text{cm}^3}$		
$\dfrac{m}{m_e}$	$\sim$	$\dfrac{4{,}65\times 10^{-23}\ \text{gm}}{9{,}10908\times 10^{-28}\ \text{gm}}$	$\sim$	$5{,}1\times 10^4$
(m_e es la masa del electrón)				
d_{pp}	$\sim$	$3{,}42\times 10^{-7}$ cm	$=$	34,2 Å

Cuadro 3.1: Parámetros típicos del gas de moléculas de nitrógeno (N_2) a temperatura y presión ambiente. Ver Física Estadística. Berkeley Physics Course. Vol. 5. Capítulo 1. F. Reif. Editorial Reverté S.A. 1969.

Por ejm..., usando valores típicos de un gas de nitrógeno a presión atmosférica (ver Cuadro 3.1) se obtiene (a_0: Radio de Bohr $\sim$ 0,529 Å)

$$\begin{aligned}\lambda_{DB} &= \frac{h}{\sqrt{2\pi m \mathrm{k_B} T}} = \sqrt{4\pi\,\frac{m_e}{m}\,\frac{\hbar^2/\left(2m_e a_0^2\right)}{\mathrm{k_B}T}}\ \ a_0 \\ &\sim 2\pi^{1/2}\sqrt{\frac{1}{5{,}1\times 10^4}\,\frac{13{,}6\times 11605}{300}}\ \ a_0 \sim \boxed{0{,}36\ a_0}\end{aligned}$$

[4] 1 atmósfera = 760 mm Hg = $1{,}01325\times 10^6\ \dfrac{\text{dinas}}{\text{cm}^2}$

$$\begin{aligned}
\lambda_{ur} &= \frac{1}{2\pi^{1/3}} \overbrace{\frac{h}{m_e c}}^{3{,}9\times10^{-3}\ \text{Å}} \frac{m_e c^2}{\mathrm{k_B} T} \\
&\sim \frac{1}{2\pi^{1/3}} \frac{3{,}9\times10^{-3}}{0{,}529} \frac{0{,}5\times10^{6}\times11605}{300}\, a_0 \sim \boxed{4{,}86\times10^{4}\ a_0}
\end{aligned}$$

$$n^{-1/3} = \frac{(2{,}5\times10^{19})^{-1/3}\times10^{8}}{0{,}529}\, a_0 \sim \boxed{64{,}65\ a_0}$$

Es obvio que gas nitrógeno, a temperatura y presión ambiente, se encuentra en el límite del gas clásico no relativista.

b) Determine la *ecuación de estado*. **(1 punto)**

SOLUCIÓN:

En términos de la función de partición (3.6), la presión P viene dada por

$$P = \mathrm{k_B} T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = \mathrm{k_B} T \frac{\partial (N \ln V)}{\partial V} = \mathrm{k_B} T \frac{N}{V}$$

Por tanto

$$\boxed{PV = N\mathrm{k_B} T\,, \qquad \text{(Ecuación de Estado)}} \tag{3.12}$$

c) Evalue la *energía media del gas* E y los *calores específicos a volumen constante* C_V y a *presión constante* C_P. **(2 puntos)**

SOLUCIÓN:

En términos de la función de partición (3.6), la energía media E viene dada por

$$\begin{aligned}
E &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -mc^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} = -mc^2 \frac{\partial}{\partial \alpha}\left[N \ln\left(\frac{\mathrm{K}_2(\alpha)}{\alpha}\right)\right] \\
&= Nmc^2 \left[\frac{1}{\alpha} - \frac{\mathrm{K}_2'(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}\right]
\end{aligned}$$

Usando la relación (3.7) se obtiene

$$\boxed{E = Nmc^2 \left[\frac{3}{\alpha} + \frac{\mathrm{K}_1(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}\right], \qquad \alpha = \frac{mc^2}{\mathrm{k_B} T}} \tag{3.13}$$

A bajas temperaturas ($\mathrm{k_B}T \ll mc^2$)

$$\begin{aligned} E &\sim Nmc^2\left[\frac{3}{\alpha}+\frac{1+3/8\alpha-15/128\alpha^2}{1+15/8\alpha+105/128\alpha^2}\right] \\ &\approx Nmc^2\left\{\frac{3}{\alpha}+\left[1+\frac{3}{8\alpha}-\frac{15}{128\alpha^2}\right]\left[1-\left(\frac{15}{8\alpha}+\frac{105}{128\alpha^2}\right)+\frac{225}{64\alpha^2}\right]\right\} \\ &\approx Nmc^2\left[\frac{3}{\alpha}+\left(1-\frac{3}{2\alpha}+\frac{15}{8\alpha^2}\right)\right]=Nmc^2\left(1+\frac{3}{2\alpha}+\frac{15}{8\alpha^2}\right) \end{aligned}$$

donde hemos usado la expresión (3.9). En consecuencia

$$E \sim Nmc^2+\frac{3}{2}N\mathrm{k_B}T+\frac{15}{8}Nmc^2\left(\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}\right)^2, \qquad \mathrm{k_B}T \ll mc^2$$

Nmc^2 es la energía en reposo. La contribución $3N\mathrm{k_B}T/2$ es el resultado para un gas ideal clásico con energía, por partícula, $\epsilon_{\vec{p}} = p^2/2m$ lo cual lo hace consistente con el *Teorema de Equipartición*: una contribución $\mathrm{k_B}T/2$ por *término cuadrático*, y por partícula, en $\epsilon_{\vec{p}}$. Este resultado es razonable puesto que a bajas temperaturas la contribución mas importante proviene de la región $\vec{p} \approx \vec{0}$ donde $c\sqrt{p^2+(mc)^2} \approx mc^2+p^2/2m$. El término $\propto T^{-2}$ es una *corrección a bajas temperaturas*[5] del resultado clásico no relativista.

A altas temperaturas ($\mathrm{k_B}T \gg mc^2$) y usando la expresión (3.8)

$$E \sim Nmc^2\left[\frac{3}{\alpha}+\frac{\Gamma(1)(\alpha/2)^{-1}/2}{\Gamma(2)(\alpha/2)^{-2}/2}\right]=Nmc^2\left[\frac{3}{\alpha}+\frac{1}{2}\alpha\right]$$

y por tanto

$$E \sim 3N\mathrm{k_B}T+\frac{1}{2}Nmc^2\left(\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}\right), \qquad \mathrm{k_B}T \gg mc^2$$

En este caso la contribución importante proviene de la región $p \gg mc$. En tal límite, $c\sqrt{p^2+(mc)^2} \approx pc$ tal que las partículas se comportan de manera similar a un gas de osciladores armónicos a altas temperaturas[6] (por ejm... fonones, fotones, etc...). La contribución $3N\mathrm{k_B}T$ es consistente con el teorema de Equipartición: $N \times (3 \times 2) \times (\mathrm{k_B}T/2)$

[5]Note que en esta aproximación, " bajas temperaturas " se refiere a la comparación con mc^2 aun cuando la temperatura es, todavía, *suficientemente alta* para garantizar el límite clásico.

[6]Esta situación se visualiza con claridad si se reescribe, por ejm, la función de partición de

y da lugar a la *Ley de Dulong y Petit* ($\mathrm{d}E/\mathrm{d}T = 3N\mathrm{k_B}$). El término $\propto T^{-1}$ es una *corrección a altas temperaturas* del resultado clásico no relativista.

El *calor específico* C se define por la relación $C \equiv đQ/\mathrm{d}T$ donde $đQ$ es el calor *absorbido* (*emitido*) por el sistema cuando la temperatura varía una cantidad $\mathrm{d}T$. De acuerdo a la *primera ley de la termodinámica* se cumple, en el presente caso, que

$$đQ = \mathrm{d}E + P\,\mathrm{d}V \tag{3.14}$$

$\mathrm{d}E$ es la variación de la energía y $P\,\mathrm{d}V$ es el trabajo que realiza el sistema *sobre* el ambiente que lo rodea debido a la variación $\mathrm{d}V$ del volumen.

---

solo un oscilador armónico unidimensional clásico en diferentes formas equivalentes. En efecto

$$\begin{aligned}
Z_{o.a.cl.} &\equiv \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta\left[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2\right]\right)\frac{\mathrm{d}p_x\,\mathrm{d}x}{h} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta\left[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m}\right]\right)\frac{\mathrm{d}p_x}{h}\,\frac{\mathrm{d}p_y}{m\omega} \\
&= \frac{h}{m\omega}\int \mathrm{e}^{-\beta\vec{p}^{\,2}/2m}\,\frac{\mathrm{d}^2_{\vec{p}}}{h^2} = \frac{\left(\sqrt{h/m\omega}\,\right)^2}{\int \mathrm{d}^2_{\vec{r}}}\,Z_{p.l.\ en\ 2D.} \\
&= Z_{p.l.\ en\ 2D.} \equiv \int \mathrm{e}^{-\beta\vec{p}^{\,2}/2m}\,\frac{\mathrm{d}^2_{\vec{p}}\,\mathrm{d}^2_{\vec{r}}}{h^2}
\end{aligned}$$

donde hemos realizado el cambio de variables $x \to p_y/m\omega$. $Z_{p.l.\ en\ 2D}$ es la función de partición de una partícula libre en dos dimensiones y, en relación con el cálculo de la energía media, el oscilador armónico unidimensional se comporta como una partícula libre, en dos dimensiones, confinada a una región de dimensión lineal equivalente a $\sqrt{h/m\omega}$. Así mismo

$$Z_{o.a.cl.} = \frac{1}{hm\omega}\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta p^2/2m}\,2\pi p\,\mathrm{d}p = \frac{1}{hm\nu}\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta p^2/2m}\,p\,\mathrm{d}p$$

donde $\nu \equiv \omega/2\pi$. Con el cambio de variables $p \to \sqrt{2mc}\;p_x^{1/2}$ se obtiene

$$Z_{o.a.cl.} = \frac{c}{h\nu}\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta p_x c}\mathrm{d}p_x = \frac{c}{2h\nu}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta|p_x|c}\mathrm{d}p_x = \frac{\lambda/2}{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x}\,Z_{f1D}$$

$$\text{donde} \qquad Z_{f1D} \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta|p_x|c}\,\frac{\mathrm{d}p_x\,\mathrm{d}x}{h}\,, \qquad \lambda \equiv \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega}$$

Z_{f1D} es la función de partición de una partícula ultrarelativista ($\epsilon_{p_x} \equiv c\,|p_x|$) en una dimensión. En relación con el cálculo de la energía media, el oscilador armónico unidimensional se comporta como un partícula ultrarelativista (fotón), en una dimensión, confinada a una región de dimensión lineal equivalente a $\lambda/2 = c/2\nu = \pi c/\omega$.

Cuando V es constante, (3.14) se reduce a $đQ = \mathrm{d}E$ y por tanto el *calor específico a volumen constante* $\mathrm{C_V}(T)$ se reduce a

$$\begin{aligned}\mathrm{C_V}(T) &= \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}T} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\alpha}\left(-\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T^2}\right)\\ &= -\mathrm{k_B}\frac{mc^2}{(\mathrm{k_B}T)^2}Nmc^2\left[-\frac{3}{\alpha^2}+\frac{\mathrm{K}_1'(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}-\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)\mathrm{K}_2'(\alpha)}{\mathrm{K}_2^2(\alpha)}\right]\end{aligned}$$

Usando la identidad (3.7), esta se reduce a

$$\begin{aligned}\mathrm{C_V}(T) &= N\mathrm{k_B}\left(\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}\right)^2\times\\ &\left\{\frac{3}{\alpha^2}-\frac{-\mathrm{K}_0(\alpha)-\mathrm{K}_1(\alpha)/\alpha}{\mathrm{K}_2(\alpha)}+\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)\left[\mathrm{K}_1(\alpha)-2\mathrm{K}_2(\alpha)/\alpha\right]}{\mathrm{K}_2^2(\alpha)}\right\}\end{aligned}$$

y, en resumen,

$$\boxed{\begin{aligned}\mathrm{C_V}(T) &= N\mathrm{k_B}\left(\frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}\right)^2\times\\ &\left\{\frac{3}{\alpha^2}+\frac{\mathrm{K}_0(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}-\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)}{\alpha\mathrm{K}_2(\alpha)}+\left[\frac{\mathrm{K}_1(\alpha)}{\mathrm{K}_2(\alpha)}\right]^2\right\}\\ &\alpha = \frac{mc^2}{\mathrm{k_B}T}\end{aligned}} \tag{3.15}$$

Note que la primera ley de la Termodinámica (3.14) puede reescribirse en la forma

$$đQ = \mathrm{C_V}(T)\,\mathrm{d}T + P\,\mathrm{d}V \tag{3.16}$$

Cuando P es constante, (3.14) se reduce a $đQ = \mathrm{d}(E+PV) = \mathrm{d}E + N\mathrm{k_B}\,\mathrm{d}T$ donde hemos usado la ecuación de estado (3.12). Por tanto el *calor específico a presión constante* $\mathrm{C_P}(T)$ se reduce a[7]

$$\mathrm{C_P}(T) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} + N\mathrm{k_B}$$

[7] $H \equiv E + PV$ es la *Entalpía* del sistema. Esta *función de estado* suele ser útil en procesos que evolucionan bajo presión constante. Por ejm..., algunas reacciones químicas, etc... En términos de la entalpía el calor específico a presión constante viene dado por $\mathrm{C_P}(T) = \mathrm{d}H/\mathrm{d}T$.

$$\boxed{\begin{array}{c} \mathrm{C}_P\,(T) = \mathrm{C_V}\,(T) + N\mathrm{k_B} \\ \\ \mathrm{C_V}\,(\mathrm{T}) \text{ viene dado por la expresión (3.15)} \end{array}} \tag{3.17}$$

Note que la primera ley de la Termodinámica (3.14) puede reescribirse en la forma

$$đQ = \mathrm{C_P}\,(T)\;\mathrm{d}T - V\,\mathrm{d}P \tag{3.18}$$

d) Encuentre la relación entre *volumen* V y temperatura T cuando este gas es sometido a un proceso *adiabático*. **(3 puntos)**

<u>SOLUCIÓN</u>:

En un proceso adiabático el sistema no absorbe ni emite calor: La energía transferida al sistema solo ocurre debido a variación de los parámetros externos del mismo. Por tanto se cumple que $đQ = 0$ y las expresiones (3.16) y (3.18) se reducen, respectivamente, a

$$\begin{aligned} \mathrm{C_V}\,(T)\;\mathrm{d}T &= -P\,\mathrm{d}V \\ \mathrm{C_P}\,(T)\;\mathrm{d}T &= \quad V\,\mathrm{d}P \end{aligned}$$

las cuales se combinan para dar lugar al resultado

$$\gamma\,(T) \equiv \frac{\mathrm{C_P}\,(T)}{\mathrm{C_V}\,(T)} = -\frac{V}{P}\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}V} = -\frac{\mathrm{d}\,(\ln P)}{\mathrm{d}\,(\ln V)}$$

cuya integración conduce a

$$PV^{\gamma(T)} = \text{constante}$$

Con la ecuación de estado (3.12) ($P = N\mathrm{k_B}T/V$) se obtiene

$$\boxed{\begin{array}{c} TV^{\gamma(T)-1} = \text{constante}\,, \qquad \gamma\,(T) = \dfrac{\mathrm{C_P}\,(T)}{\mathrm{C_V}\,(T)} \\ \\ \text{Ver resultados (3.15) y (3.17)} \end{array}} \tag{3.19}$$

Por ejm. . . , con la temperatura T_0 y volumen V_0 de *referencias* esta equivale a

$$TV^{\gamma(T)-1} = T_0 V_0^{\gamma(T_0)-1}$$

Capítulo 4

Tarea 4: *Modelo de Ising*

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

15 / 07 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/`
TAREA[1] Nº 4

Explique las siguientes aproximaciones en el Modelo de Ising (una descripción breve del modelo puede verse en el Cuadro 4.1 de la pág. 51):

1. Campo Medio o Molecular

   SOLUCIÓN: En esta aproximación solo se toman en cuenta fluctuaciones de espin, alrededor del valor medio, de una manera limitada. En otras palabras, se supone que el reemplazo $\mathsf{S}_{\vec{n}z} \to \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle$ es una aproximación razonable al estudio de la transición de fase magnética. Ello supone que los estados relevantes a la construcción de tal fase son aquellos que corresponden a valores de la componente z del momento magnético que son *cercanos* a $-g\mu_B \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle$. Tal aproximación puede ser introducida en forma simple si escribimos $\mathsf{S}_{\vec{n}z}$ en la forma:

$$\mathsf{S}_{\vec{n}z} = \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle + (\mathsf{S}_{\vec{n}z} - \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle)$$

   donde consideramos a $\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle$ como un término de *orden cero* y a la *desviación* $\mathsf{S}_{\vec{n}z} - \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle$ como un término de *orden uno* tal que en un producto como $\mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z}$ no tomamos en cuenta los términos de *orden dos*:

$$\begin{aligned}
\mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z} &= [\langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle + (\mathsf{S}_{\vec{m}z} - \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle)] [\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle + (\mathsf{S}_{\vec{n}z} - \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle)] \\
&\approx \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle + \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle (\mathsf{S}_{\vec{n}z} - \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle) + (\mathsf{S}_{\vec{m}z} - \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle) \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle \\
&= -\langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle + \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle \mathsf{S}_{\vec{n}z} + \mathsf{S}_{\vec{m}z} \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle
\end{aligned}$$

[1] FECHA DE ENTREGA: **jueves 22 de julio de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

Reemplazando este resultado en el hamiltoniano (4.3) se obtiene el hamiltoniano H_{CM} en la aproximación de campo medio o molecular:

$$H_{CM} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\left(\vec{m} - \vec{n}\right) \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle - \sum_{\vec{n}} \mathsf{S}_{\vec{n}z} \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n} - \vec{m}\right) \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle$$

el cual describe un sistema de espines *no* interactuantes en presencia de un *campo magnético efectivo*

$$-\frac{1}{g\mu_B} \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n} - \vec{m}\right) \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle$$

Para el caso ferromagnético ($\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle = M,\ \forall \vec{n}$) con interacción solo entre *vecinos mas cercanos* ($\mathrm{J}\left(\vec{m} - \vec{n}\right) \equiv J > 0$), H_{CM} se reduce a

$$H_{CM} = \frac{1}{2} NzJM^2 - zJM \sum_{\vec{n}} \mathsf{S}_{\vec{n}z}$$

z es el *número de vecinos mas cercanos* a un sitio dado. Para el caso de espin 1/2 la evaluación *autoconsistente* de M se reduce a ($1/\mathrm{k_B}T = \beta$)

$$M = \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle = \frac{\mathrm{Tr}_{\vec{n}} \left(\mathrm{e}^{-\beta[-zJM\mathsf{S}_{\vec{n}z}]} \mathsf{S}_{\vec{n}z} \right)}{\mathrm{Tr}_{\vec{n}} \left(\mathrm{e}^{-\beta[-zJM\mathsf{S}_{\vec{n}z}]} \right)} = \frac{(-1/2)\ \mathrm{e}^{-\beta zJM/2} + (1/2)\ \mathrm{e}^{\beta zJM/2}}{\mathrm{e}^{-\beta zJM/2} + \mathrm{e}^{\beta zJM/2}}$$

$$\boxed{|M| = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{zJ\,|M|}{2\mathrm{k_B}T} \right)} \tag{4.1}$$

cuya solución define completamente la dependencia de M con la temperatura T y los parámetros del sistema. Note que $\pm M$ son soluciones de esta ecuación y $M\left(T\right) = 0\ \forall T$ describe el *estado normal* (*ausencia de magnetismo*). La solución corresponde a aquella que minimiza la energía libre de Helmholtz. La Figura 4.1 muestra la solución de (4.1).

A $T = 0\,\mathrm{K}$ se obtiene

$$|M\left(T = 0\,\mathrm{K}\right)| = 1/2$$

y la *temperatura de transición* T_c viene dada por $\lim_{T \to T_c^-} M\left(T\right) = 0$ donde $M\left(T\right)$ es la *solución no nula*:

$$1 = \lim_{\substack{T \to T_c^- \\ M \to 0}} \frac{1}{2} \frac{\tanh\left(zJM/2\mathrm{k_B}T\right)}{M} = \frac{zJ}{4\mathrm{k_B}T_c} \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\mathrm{k_B}T_c = \frac{1}{4}\, zJ}$$

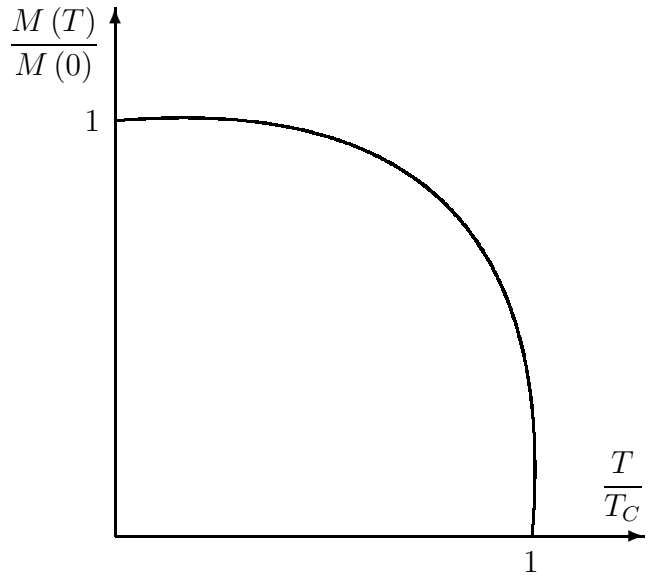


Figura 4.1: Variación, con la temperatura, del momemto magnético medio.

El resultado (4.1) puede obtenerse, en forma equivalente, por minimización de la *energía libre de Helmholtz* F_{CM} respecto de M: $\partial F_{CM}/\partial M = 0$. F_{CM} viene dada por

$$\begin{aligned}
F_{CM} &= -\mathrm{k_B}T \ln \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_{CM}}\right) = \frac{1}{2}NzJM^2 - \mathrm{k_B}T \ln \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{\beta zJM \sum_{\vec{n}} \mathsf{S}_{\vec{n}z}}\right) \\
&= \frac{1}{2}NzJM^2 - \mathrm{k_B}T \ln \mathrm{Tr}\left(\prod_{\vec{n}} \mathrm{e}^{\beta zJM \mathsf{S}_{\vec{n}z}}\right) \\
&= \frac{1}{2}NzJM^2 - \mathrm{k_B}T \ln \prod_{\vec{n}} \mathrm{Tr}_{\vec{n}}\left(\mathrm{e}^{\beta zJM \mathsf{S}_{\vec{n}z}}\right) \\
&= \frac{1}{2}NzJM^2 - \mathrm{k_B}T \sum_{\vec{n}} \ln \mathrm{Tr}_{\vec{n}}\left(\mathrm{e}^{\beta zJM \mathsf{S}_{\vec{n}z}}\right) \\
&= \frac{1}{2}NzJM^2 - \mathrm{k_B}T \sum_{\vec{n}} \ln\left(2\cosh\left(\frac{\beta zJ\,|M|}{2}\right)\right)
\end{aligned}$$

$$\boxed{F_{CM} = -N\mathrm{k_B}T \ln 2 + \frac{1}{2}NzJM^2 - N\mathrm{k_B}T \ln\left(\cosh\left(\frac{\beta zJ\,|M|}{2}\right)\right)} \tag{4.2}$$

2. Bragg-Williams[1]
3. Bethe-Peierls[1]

Cada una vale $20/3$ puntos.

El *modelo de Ising* describe la interacción entre un conjunto (infinito en principio) de espines localizados en los *sitios* de una *red cristalina*[2]. Tal interacción ocurre solo a traves de las componentes z de cada espin tal que el hamiltoniano asociado al modelo es de la forma:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{m},\vec{n}} \mathrm{J}\left(\vec{m}-\vec{n}\right)\mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z}\,; \qquad \mathrm{J}\left(-\vec{n}\right) = \mathrm{J}\left(\vec{n}\right)\,, \quad \mathrm{J}\left(\vec{0}\right) = 0 \tag{4.3}$$

$\mathsf{S}_{\vec{n}i}$ es la componente i-ésima ($i = x, y, z$) del espin $\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}}$ el cual está localizado en el sitio $\vec{n}$ de la red cristalina. Ellos satisfacen las *reglas de conmutación*:

$$\vec{\mathsf{S}}_{\vec{m}} \times \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} = \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} \left[\mathsf{S}_{\vec{m}x}, \mathsf{S}_{\vec{n}y}\right] &= \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}z} \\ \left[\mathsf{S}_{\vec{m}y}, \mathsf{S}_{\vec{n}z}\right] &= \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}x} \\ \left[\mathsf{S}_{\vec{m}z}, \mathsf{S}_{\vec{n}x}\right] &= \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}y} \end{cases}$$

$\mathrm{J}\left(\vec{m}-\vec{n}\right) \in \mathbf{R}$ es la constante de acoplamiento entre espines en los sitios $\vec{m}$ y $\vec{n}$. Físicamente, $\mathrm{J}\left(\vec{m}-\vec{n}\right)$ tiene su origen en la superposición de funciones de onda *cuasiatómicas* localizadas alrededor de los sitios $\vec{m}$ y $\vec{n}$ lo cual significa que $\mathrm{J}\left(\vec{m}-\vec{n}\right)$ *decae* con la distancia $|\vec{m}-\vec{n}|$ entre los sitios $\vec{m}$ y $\vec{n}$. Por esta razón el modelo suele simplificarse al caso en que la interacción ocurre solo entre los vecinos mas cercanos siendo el caso *ferromagnético* ($\mathrm{J}\left(\vec{n}\right) > 0$) el mas estudiado.

Cada espin $\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}}$ tiene asociado un *momento magnético* $\vec{\mu}_{\vec{n}}$ a traves de la relación:

$$\vec{\mu}_{\vec{n}} = -g\mu_B\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}}$$

donde g es el *factor de Lande* y μ_B es el *magnetón de Bohr*.

Cuadro 4.1: Breve descripción del *modelo de Ising*.

---

[1]Las aproximaciones de Bragg-Williams y Bethe-Peierls son descritas en el libro de texto: `Statistical Mechanics`, *K. Huang*, John Wiley & Sons., Ltd 1988.

[2]Una *red cristalina* es caracterizada por un conjunto discreto de puntos, en $\mathbf{R^3}$, $\{\vec{n}\}$ de la forma

$$\vec{n} \equiv n_a\vec{a} + n_b\vec{b} + n_c\vec{c}, \qquad n_a, n_b, n_c \in \mathbf{Z}$$

$\left\{\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\right\}$ es una base de vectores en $\mathbf{R^3}$.

Capítulo 5

Tarea 5: Gas Ideal Cuántico

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

15 / 07 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/postgrado/
TAREA[1] Nº 5

1. Investigue la termodinámica estadística de un gas ideal de Bose en un campo uniforme gravitacional (gravedad g). Muestre, en particular, que el fenómeno de condensación de Bose-Einstein se establece a una temperatura T_c dada por

$$T_c \approx T_c^{(0)} \left\{ 1 + \frac{8}{9} \frac{1}{\zeta(3/2)} \left[\frac{\pi m g L}{\mathrm{k_B} T_c^{(0)}} \right]^{1/2} \right\}$$

donde L es la altura del recipiente, que contiene el gas, y $mgL \ll \mathrm{k_B} T_c^{(0)}$.
(10 puntos)

SOLUCIÓN:

Usemos una versión semiclásica donde la energía de partícula simple viene dada[1] por

$$E_{\vec{k}}(z) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^{\,2}}{2m} + mgz\,, \qquad 0 \le z \le L$$

[1]FECHA DE ENTREGA: **viernes 30 de julio de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

[1]Las autofunciones y autovalores de energía de partícula simple, en el presente caso, vienen dados por:

$$\Psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) \equiv \frac{L}{\sqrt{V}}\, \mathrm{e}^{i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}_\perp} \Psi_n(z)$$

donde $\Psi_n(z)$ satisface

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(z) + mgz\Psi_n(z) = E_n \Psi_n(z)$$

tal que el fenómeno de *condensación de Bose-Einstein* ocurre cuando el potencial químico $\mu = \min\left\{E_{\vec{k}}(z)\right\} = 0$. En el límite continuo de la *caja de normalización*, la integración sobre el número de onda $\vec{k}$ excluye las partículas con $\vec{k} = \vec{0}$ puesto que $\mathrm{d}^3\vec{k} \propto k^2$ en 3 dimensiones. Por tanto, el número de partículas excitadas a $T = T_c$ (la *temperatura de condensación cuando* $g \neq 0$) viene dada por

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{1}{L}\int_0^L \mathrm{d}z \int \frac{\mathrm{d}^3\vec{k}}{\mathrm{e}^{\beta_c\left(\hbar^2k^2/2m+mgz\right)}-1} \tag{5.1}$$

$\beta_c \equiv 1/\mathrm{k_B}T_c$. N es el número total de partículas y V es el volumen del recipiente. Note que $V/(2\pi)^3$ es el prefactor usual de la integral sobre $\vec{k}$ cuando no se toma en cuenta la gravedad ($g = 0$).

El resultado (5.1) se reduce a

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{1}{L}\frac{1}{\beta_c mg}\int_0^{\beta_c mgL}\mathrm{d}z\int_0^\infty \frac{4\pi k^2\,\mathrm{d}k}{\mathrm{e}^{\beta_c\hbar^2k^2/2m+z}-1}$$

Con el cambio de variables

$$\epsilon \equiv \beta_c\frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad\Longleftrightarrow\quad k = \frac{\sqrt{2m\mathrm{k_B}T_c}}{\hbar}\,\epsilon^{1/2}\,; \quad \mathrm{d}k = \frac{1}{2}\frac{\sqrt{2m\mathrm{k_B}T_c}}{\hbar}\,\epsilon^{-1/2}\mathrm{d}\epsilon$$

se obtiene

$$N = \left[\frac{V}{2\pi^2}\frac{(2m\mathrm{k_B}T_c)^{3/2}}{2\hbar^3}\right]\frac{1}{\beta_c mgL}\int_0^{\beta_c mgL}\mathrm{d}z\,\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\mathrm{g}_{3/2}\left(\mathrm{e}^{-z}\right) \tag{5.2}$$

donde[2]

$$\mathrm{g}_n(\xi) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)}\int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon\,\frac{\epsilon^{n-1}}{\xi^{-1}\,\mathrm{e}^\epsilon - 1}$$

A partir de (5.2) y en ausencia de la gravedad ($g \to 0,\ \ T_c \to T_c^{(0)}$) se obtiene

$$N = \left\{\frac{V}{2\pi^2}\frac{\left[2m\mathrm{k_B}T_c^{(0)}\right]^{3/2}}{2\hbar^3}\right\}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\mathrm{g}_{3/2}(1) \tag{5.3}$$

[2]Ver, por ejm... Statistical Mechanics, *R. K. Pathria*, Pergamon Press 1972. Especialmente, la aproximación de Robinson cuando $\xi \sim 1$ en el Apéndice D (*On the Bose-Einstein Integrals*):

$$\mathrm{g}_n(\xi) = \Gamma(1-n)\,\alpha^{n-1} + \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{(-1)^\ell}{\ell!}\,\zeta(n-\ell)\,\alpha^\ell\,; \qquad \alpha \equiv -\ln\xi\,, \quad \xi \lesssim 1$$

$\zeta(\eta) \equiv \sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{1}{\ell^\eta}$ es la *función zeta de Riemann* donde $\Re\eta > 1$. $\zeta(n-\ell)$ en la expresión para $\mathrm{g}_n(\xi)$ es, en general, una continuación analítica de la función zeta de Riemann.

Dividiendo, miembro a miembro, las expresiones (5.2) y (5.3) encontramos que

$$1 = \left[\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right]^{3/2} \frac{\mathcal{I}\left(\beta_c mgL\right)}{\mathrm{g}_{3/2}\left(1\right)} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{T_c}{T_c^{(0)}} = \left[\frac{\mathcal{I}\left(\beta_c mgL\right)}{\mathrm{g}_{3/2}\left(1\right)}\right]^{-2/3}$$

donde[3]

$$\mathcal{I}\left(\Lambda\right) \equiv \frac{1}{\Lambda}\int_0^{\Lambda} \mathrm{d}z\, \mathrm{g}_{3/2}\left(\mathrm{e}^{-z}\right), \qquad \mathcal{I}\left(0\right) = \mathrm{g}_{3/2}\left(1\right)$$

Puesto que $\beta_c^{(0)} mgL \ll 1$, se cumple que $T_c \approx T_c^{(0)}$. $\beta_c^{(0)} \equiv 1/\mathrm{k_B} T_c^{(0)}$. Entonces

$$\begin{aligned}
\frac{T_c}{T_c^{(0)}} &\approx \left[\frac{\mathcal{I}\left(\beta_c^{(0)} mgL\right)}{\mathcal{I}\left(0\right)}\right]^{-2/3} = \left[1 - \frac{\mathcal{I}\left(0\right) - \mathcal{I}\left(\beta_c^{(0)} mgL\right)}{\mathcal{I}\left(0\right)}\right]^{-2/3} \\
&\approx 1 + \frac{2}{3}\frac{\mathcal{I}\left(0\right) - \mathcal{I}\left(\beta_c^{(0)} mgL\right)}{\mathcal{I}\left(0\right)}
\end{aligned}$$

Segun pie de página 2:

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}\left(\Lambda\right) &= \frac{1}{\Lambda}\int_0^{\Lambda} \mathrm{d}z\, \mathrm{g}_{3/2}\left(\mathrm{e}^{-z}\right) \approx \frac{1}{\Lambda}\int_0^{\Lambda} \mathrm{d}z \left[\zeta\left(\frac{3}{2}\right) + \overbrace{\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right)}^{=\,-2\Gamma(1/2)} z^{1/2}\right] \\
&= \zeta\left(3/2\right) - \frac{4\sqrt{\pi}}{3}\Lambda^{1/2} = \mathcal{I}\left(0\right) - \frac{4\sqrt{\pi}}{3}\Lambda^{1/2}, \qquad \Lambda \gtrsim 0
\end{aligned}$$

Por tanto

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \approx 1 + \frac{2}{3}\frac{\left(4\sqrt{\pi}\ /3\right)\left(\beta_c^{(0)} mgL\right)^{1/2}}{\zeta\left(3/2\right)}$$

---

[3] $\mathrm{g}_n\left(1\right)$ es evaluada segun ($n > 1$):

$$\begin{aligned}
\mathrm{g}_n\left(1\right) &= \frac{1}{\Gamma\left(n\right)}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^{n-1}}{\mathrm{e}^{\epsilon} - 1} = \frac{1}{\Gamma\left(n\right)}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\, \frac{\epsilon^{n-1}\,\mathrm{e}^{-\epsilon}}{1 - \mathrm{e}^{-\epsilon}} = \frac{1}{\Gamma\left(n\right)}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{n-1}\,\mathrm{e}^{-\epsilon}\sum_{\ell=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\ell\epsilon} \\
&= \frac{1}{\Gamma\left(n\right)}\sum_{\ell=0}^{\infty}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{n-1}\,\mathrm{e}^{-(\ell+1)\epsilon} = \frac{1}{\Gamma\left(n\right)}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{1}{\left(\ell+1\right)^n}\underbrace{\int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{n-1}\,\mathrm{e}^{-\epsilon}}_{=\,\Gamma(n)} \\
&= \sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{1}{\ell^n} \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\mathrm{g}_n\left(1\right) = \zeta\left(n\right)}
\end{aligned}$$

$$\boxed{T_c \approx T_c^{(0)} \left\{ 1 + \frac{8}{9} \frac{1}{\zeta(3/2)} \left[\frac{\pi m g L}{\mathrm{k_B} T_c^{(0)}} \right]^{1/2} \right\}, \qquad mgL \ll \mathrm{k_B} T_c^{(0)}} \tag{5.4}$$

2. Un gas de fermiones sin espin se encuentra en contacto con un baño térmico a la temperatura T. Su densidad de estados de energía $\mathcal{D}(E)$ viene dada por:

$$\mathcal{D}(E) \equiv \begin{cases} \mathcal{D}_V(E) \equiv \dfrac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}} \sqrt{E_V - E} \;, & \text{si} \quad 0 \le E < E_V \\ 0 \;, & \text{si} \quad E_V \le E \le E_C \quad \text{o} \quad E < 0 \\ \mathcal{D}_C(E) \equiv \dfrac{3\mathcal{N}_C}{2E_C^{3/2}} \sqrt{E - E_C} \;, & \text{si} \quad E_C < E \end{cases}$$

Suponga que $\Delta \equiv E_C - E_V \gg \mathrm{k_B} T$ y que el potencial químico μ satisface la relación $E_V < \mu < E_C$. Evalue μ y la relación entre el número de estados vacíos N_h con energías menores $\in [0, E_V]$ y el número de partículas N_e con energías mayores que E_C. **(10 puntos)**

<u>SOLUCIÓN</u>:

Este problema describe un *modelo simple de un semiconductor*. La Figura 5.1 ilustra la densidad de estados $\mathcal{D}(E)$ vs. E.

El *número total de estados con energías* $\in [0, E_V]$ viene dado por:

$$\mathrm{N_{total}}(0 \le E \le E_V) = \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \mathcal{D}_V(E) \;, \qquad \left(\begin{array}{l} \text{Número total de estados} \\ \text{con energías} \in [0, E_V]. \end{array} \right)$$

El *número de estados ocupados con energías* $\in [0, E_V]$ viene dado por:

$$\mathrm{N_{ocup.}}(0 \le E \le E_V) = \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \mathcal{D}_V(E)\, \mathrm{f}(E - \mu) \;, \qquad \left(\begin{array}{l} \text{Número de esta-} \\ \text{dos ocupados con} \\ \text{energías} \in [0, E_V]. \end{array} \right)$$

El *número de estados vacíos*[4] *con energías* $\in [0, E_V]$ viene dado

$$N_h \;\equiv\; \mathrm{N_{total}}(0 \le E \le E_V) - \mathrm{N_{ocup.}}(0 \le E \le E_V)$$

[4]Es usual la denominación *hueco* para un estado vacío. Ello provee una intuición adecuada al caso en que la región de energías en consideración está *casi llena*. en tal caso luce conveniente hablar de huecos en vez de las partículas en la región mencionada arriba.

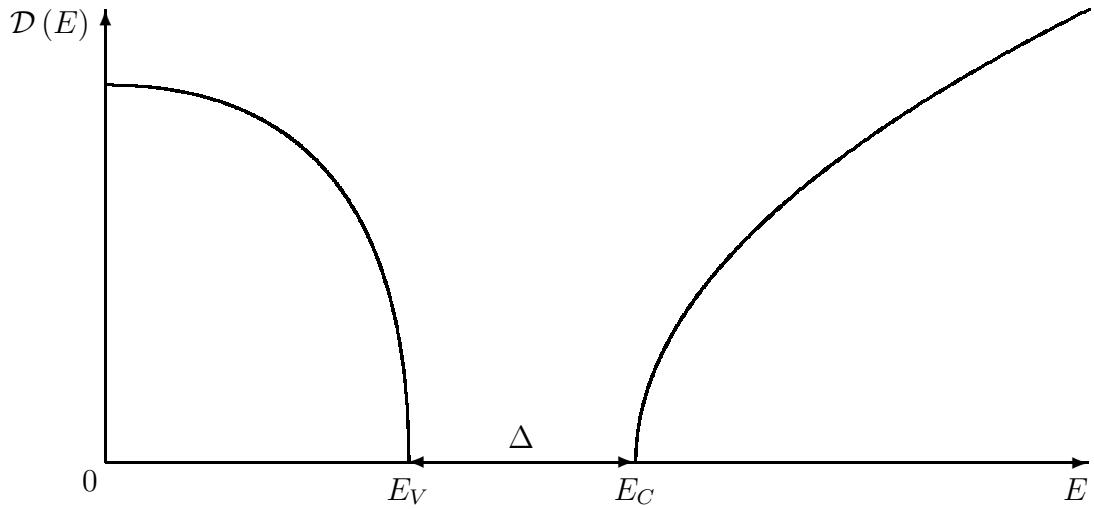


Figura 5.1: Densidad de estados del gas de fermiones sin espin. A $T = 0\,\mathrm{K}$ todos los estados con energías $\in [0, E_V]$ estan ocupados por los fermiones. Cuando se incrementa la temperatura, los fermiones realizan transiciones hacia la región con energías $\geq E_C$. Cada uno de estos fermiones *deja* un estado vacío (hueco) en la región de energías $\in [0, E_V]$ y por lo tanto $N_h = N_e$. Ver texto. Este es un modelo simple de un semiconductor.

$$
\begin{aligned}
&= \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \mathcal{D}_V(E)\,[1 - \mathrm{f}(E-\mu)] = \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \mathcal{D}_V(E)\,\mathrm{f}(\mu - E) \\
&= \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \frac{\mathcal{D}_V(E)}{\mathrm{e}^{(\mu-E)/\mathrm{k_B}T} + 1}, \qquad \left(\begin{array}{l}\text{Número de estados vacíos} \\ \text{con energías} \in [0, E_V].\end{array}\right)
\end{aligned}
$$

Puesto que

$$
\left.\frac{\mu - E}{\mathrm{k_B}T}\right|_{0 \leq E < E_V} > \frac{\mu - E_V}{\mathrm{k_B}T} \gg 1
$$

se obtiene

$$
\begin{aligned}
N_h &\approx \mathrm{e}^{-\mu/\mathrm{k_B}T} \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \mathcal{D}_V(E)\, \mathrm{e}^{E/\mathrm{k_B}T} \\
&= \frac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}}\, \mathrm{e}^{-\mu/\mathrm{k_B}T} \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \sqrt{E_V - E}\, \mathrm{e}^{E/\mathrm{k_B}T} \\
&= \frac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}}\, \mathrm{e}^{-(\mu-E_V)/\mathrm{k_B}T} \int_{-E_V}^{0} \mathrm{d}E\, \sqrt{-E}\, \mathrm{e}^{E/\mathrm{k_B}T} \\
&= \frac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}}\, \mathrm{e}^{-(\mu-E_V)/\mathrm{k_B}T} \int_0^{E_V} \mathrm{d}E\, \sqrt{E}\, \mathrm{e}^{-E/\mathrm{k_B}T}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}}\ \mathrm{e}^{-(\mu-E_V)/\mathrm{k_B}T}\,(\mathrm{k_B}T)^{3/2}\int_0^{E_V/\mathrm{k_B}T}\mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-x}x^{1/2}\\
&\approx \frac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}}\ \mathrm{e}^{-(\mu-E_V)/\mathrm{k_B}T}\,(\mathrm{k_B}T)^{3/2}\underbrace{\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-x}x^{1/2}}_{\Gamma(3/2)=\sqrt{\pi}\ /2}
\end{aligned}
$$

En conclusión

$$
\boxed{N_h \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\,\frac{\mathcal{N}_V}{E_V^{3/2}}\ \mathrm{e}^{-(\mu-E_V)/\mathrm{k_B}T}\,(\mathrm{k_B}T)^{3/2}\ ,\qquad \left(\begin{array}{l}\text{Número de estados vacíos o huecos con energías}\\ \in[0,E_V].\end{array}\right)} \tag{5.5}
$$

Similarmente, el *número de estados ocupados con energías* $\geq E_C$ viene dado por

$$
\begin{aligned}
N_e &= \int_{E_C}^{\infty}\mathrm{d}E\,\mathcal{D}_C\,(E)\,\mathrm{f}\,(E-\mu) = \int_{E_C}^{\infty}\mathrm{d}E\,\frac{\mathcal{D}_C\,(E)}{\mathrm{e}^{(E-\mu)/\mathrm{k_B}T}+1}\\
&\approx \frac{3}{2}\,\frac{\mathcal{N}_C}{E_C^{3/2}}\ \mathrm{e}^{\mu/\mathrm{k_B}T}\int_{E_C}^{\infty}\mathrm{d}E\ \sqrt{E-E_C}\ \ \mathrm{e}^{-E/\mathrm{k_B}T}\\
&= \frac{3}{2}\,\frac{\mathcal{N}_C}{E_C^{3/2}}\ \mathrm{e}^{(\mu-E_C)/\mathrm{k_B}T}\int_0^{\infty}\mathrm{d}E\ \sqrt{E}\ \ \mathrm{e}^{-E/\mathrm{k_B}T}\\
&= \frac{3}{2}\,\frac{\mathcal{N}_C}{E_C^{3/2}}\ \mathrm{e}^{(\mu-E_C)/\mathrm{k_B}T}\ (\mathrm{k_B}T)^{3/2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-x}x^{1/2}
\end{aligned}
$$

y por tanto

$$
\boxed{N_e \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\,\frac{\mathcal{N}_C}{E_C^{3/2}}\ \mathrm{e}^{(\mu-E_C)/\mathrm{k_B}T}\,(\mathrm{k_B}T)^{3/2}\ ,\qquad \left(\begin{array}{l}\text{Número de estados ocupados con}\\ \text{energías}\geq E_C.\end{array}\right)} \tag{5.6}
$$

Multiplicando N_h (ver (5.5)) por N_e (ver (5.6)) se obtiene la *ley de acción de masas*

$$
N_hN_e \approx \frac{9\pi}{16}\,\frac{\mathcal{N}_V\mathcal{N}_C}{(E_VE_C)^{3/2}}\ \mathrm{e}^{-(E_C-E_V)/\mathrm{k_B}T}\,(\mathrm{k_B}T)^3
$$

y puesto que $N_h = N_e$ (ver Figura 5.1)

$$\boxed{N_h = N_e \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\,\frac{(\mathcal{N}_V\mathcal{N}_C)^{1/2}}{(E_V E_C)^{3/4}}\,\mathrm{e}^{-\Delta/2\mathrm{k_B}T}\,(\mathrm{k_B}T)^{3/2}} \tag{5.7}$$

Así mismo, dividiendo N_h (ver (5.5)) por N_e (ver (5.6))

$$1 \approx \frac{\mathcal{N}_V}{\mathcal{N}_C}\left(\frac{E_C}{E_V}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{(-2\mu+E_V+E_C)/\mathrm{k_B}T}$$

$$\boxed{\mu \approx \frac{E_V+E_C}{2} - \mathrm{k_B}T\,\ln\left(\frac{\mathcal{N}_C}{\mathcal{N}_V}\left[\frac{E_V}{E_C}\right]^{3/2}\right)} \tag{5.8}$$

Vemos, entonces que la condición que favorece la hipótesis inicial del problema es

$$\frac{\mathcal{N}_C}{\mathcal{N}_V} \sim \left(\frac{E_C}{E_V}\right)^{3/2} > 1$$

Capítulo 6

Parcial 1

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

29 / 06 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/`
1er Examen Parcial[1]

1. Considere un gas de N partículas monoatómicas confinado a un volumen V. Cada partícula posee un momento magnético que solo puede tomar los valores $\pm\mu_B\hat{z}$. μ_B es el magnetón de Bohr. La masa de una de tales partículas es m.

   a) Evalue la *Densidad de Estados* $\mathcal{D}(E, M)$ de este gas para valores dados de la *energía* $E = \sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i^{\,2}/2m$ y la *componente z* ($M = \sum_{i=1}^{N} m_i$) *del momento magnético*. $m_i = \pm\mu_B,\ \forall i = 1, 2, \ldots, N$. **(4 puntos)**

   SOLUCIÓN:

   Usemos la identidad

$$\mathcal{D}(E, M) = \frac{\partial}{\partial M}\frac{\partial}{\partial E}\int_{-\infty}^{E} \mathrm{d}E' \int_{-\infty}^{M} \mathrm{d}M'\, \mathcal{D}(E', M')$$

   La doble integración corresponde al *número de estados del gas con energía menor que E y momento magnético*[2] *menor que M*. En efecto

$$\int_{-\infty}^{E} \mathrm{d}E' \int_{-\infty}^{M} \mathrm{d}M'\, \mathcal{D}(E', M')$$
$$= \frac{1}{N!}\sum_{\{m_i\}} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{\mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\, \mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}}{h^3}\, \Theta\left(E - \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}\right) \Theta\left(M - \sum_{i=1}^{N} m_i\right)$$

---

[1]Fecha de entrega: martes 06 de julio de 2004

[2]Por brevedad llamamos a M *momento magnético* en vez de *componente z del momento magnético* sin que ello se preste a confusiones.

Reemplazando esta en la expresión anterior y usando la identidad $\mathrm{d}\Theta(t) = \delta(t)$, se obtiene:

$$\mathcal{D}(E,M) = \mathcal{D}_{tr}(E)\,\mathcal{D}_{mag}(M) \tag{1.1}$$

$$\mathcal{D}_{tr}(E) = \frac{1}{N!}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{\mathrm{d}^3_{\vec{r}_i}\,\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}}{h^3}\,\delta\left(E-\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}\right) \tag{1.2}$$

$$\mathcal{D}_{mag}(M) = \sum_{\{m_i\}}\delta\left(M-\sum_{i=1}^{N}m_i\right) \tag{1.3}$$

$\mathcal{D}_{tr}(E)$ y $\mathcal{D}_{mag}(M)$ están asociados a los grados de libertad traslacionales y magnéticos, respectivamente, y se evaluan separadamente.
Veamos la evaluación de $\mathcal{D}_{tr}(E)$:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{tr}(E) &= \frac{V^N}{h^{3N}N!}\int\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\,\frac{1}{E}\,\delta\left(1-\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{p_i}{\sqrt{2mE}}\right]^2\right)\\ &= \frac{V^N}{h^{3N}N!}\,\frac{1}{E}\,(2mE)^{3N/2}\int\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}^3_{\vec{p}_i}\,\delta\left(1-\sum_{i=1}^{N}p_i^2\right)\end{aligned}$$

La integración sobre $\{\vec{p}_i\}$ ocurre sobre la superficie de una esfera $3N$-dimensional de radio 1:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{tr}(E) &= \frac{V^N}{h^{3N}N!}\,\frac{1}{E}\,(2mE)^{3N/2}\int_0^\infty \mathrm{d}R\;C_{3N}\,R^{3N-1}\,\overbrace{\delta\left(1-R^2\right)}^{=\,\delta(R-1)/2}\\ &= \frac{V^N}{h^{3N}N!}\,\frac{1}{E}\,(2mE)^{3N/2}\left(\frac{1}{2}\,C_{3N}\right)\end{aligned}$$

La constante C_{3N} se obtiene haciendo uso de la identidad

$$\pi^{D/2} = \prod_{i=1}^{D}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_i\;\mathrm{e}^{-x_i^2} = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-R^2}C_D R^{D-1}\,\mathrm{d}R = \frac{1}{2}\,C_D\Gamma\left(\frac{D}{2}\right)$$

$$\Longrightarrow \boxed{C_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)}}$$

$\Gamma(z)$ es la *función Gamma*. $z\in\mathbf{C}$. $z\neq 0,-1,-2,\ldots$. Por tanto

$$\mathcal{D}_{tr}(E) = \frac{1}{E}\,\frac{V^N}{\Gamma(3N/2)\,N!}\left(\frac{2\pi mE}{h^2}\right)^{3N/2}$$

Evaluemos $\mathcal{D}_{mag}(M)$: Para ello es necesario usar, por ejm..., la representación integral de Laplace de la delta de Dirac

$$\delta(t) = \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{st}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{mag}(M) &= \sum_{\{m_i\}} \delta\left(M - \sum_{i=1}^{N} m_i\right) = \sum_{\{m_i\}} \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{s\left(M-\sum_{i=1}^{N} m_i\right)} \\
&= \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{sM} \sum_{\{m_i\}} \mathrm{e}^{-s\sum_{i=1}^{N} m_i} \\
&= \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{sM} \left(\sum_{m=\pm\mu_B} \mathrm{e}^{-sm}\right)^N \\
&= \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{sM} \left(\mathrm{e}^{s\mu_B} + \mathrm{e}^{-s\mu_B}\right)^N = \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{\mathcal{F}_{mag}(s)}
\end{aligned}$$

donde

$$\mathcal{F}_{mag}(s, M) \equiv sM + N \ln\left(2\cosh\left(s\mu_B\right)\right)$$

Usando el método del descenso mas rápido en la evaluación de $\mathcal{D}_{mag}(M)$ equivale a encontrar un valor $\widetilde{s}$ de s tal que $\mathcal{F}'(\widetilde{s}, M) = 0$. Es decir

$$M + N\mu_B \tanh\left(\widetilde{s}\mu_B\right) = 0$$

Salvo factores irrelevantes, en el límite termodinámico, se obtiene

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{mag}(M) &= \mathrm{e}^{\mathcal{F}\left(\widetilde{s}, M\right)} \\
&\text{o/y} \\
\ln \mathcal{D}_{mag}(M) &= \ln \mathcal{F}(\widetilde{s}, M) = \widetilde{s}M + N \ln\left(2\cosh\left(\widetilde{s}\mu_B\right)\right)
\end{aligned}$$

En resumen

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathcal{D}(E, M) &= \mathcal{D}_{tr}(E)\, \mathcal{D}_{mag}(M) \\
\mathcal{D}_{tr}(E) &= \frac{1}{E} \frac{V^N}{\Gamma(3N/2)\, N!} \left(\frac{2\pi m E}{h^2}\right)^{3N/2} \\
\mathcal{D}_{mag}(M) &= \mathrm{e}^{\widetilde{s}M + N \ln\left(2\cosh\left(\widetilde{s}\mu_B\right)\right)} \\
&\text{con} \quad M + N\mu_B \tanh\left(\widetilde{s}\mu_B\right) = 0
\end{aligned}} \tag{1.4}$$

Note que $\mathcal{D}_{mag}(M)$ *tambien* depende implícitamente de M a traves de la dependencia de $\widetilde{s}$ en M.

b) Use los resultados encontrados en el aparte anterior para encontrar la *Energía* E, la *Presión* P y el momento M como funciones, en particular, de la temperatura absoluta T y el campo magnético H. **(4 puntos)**

SOLUCIÓN:

En equilibrio termodinámico y a la temperatura T obtendremos:

- La energía:

$$\frac{1}{\mathrm{k_B}T} = \frac{\partial \ln \mathcal{D}(E,M)}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{3}{2}N\ln E\right) = \frac{3N}{2E}$$

lo cual equivale a

$$\boxed{E = \frac{3}{2}N\mathrm{k_B}T \quad (\text{ ¡ en un campo magnético nulo ! })} \tag{1.5}$$

- La presión:

$$P = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}(E,M)}{\partial V} = \frac{\partial (N\ln V)}{\partial V} = \frac{N}{V}$$

y en resumen

$$\boxed{PV = N\mathrm{k_B}T \quad (\text{ ¡ en un campo magnético nulo ! })} \tag{1.6}$$

- El momento magnético: Si el sistema está aislado o está en contacto con un baño térmico se debe cumplir que $\ln \mathcal{D}(E,M)$ es un *extremo*. Es decir, $\partial \ln \mathcal{D}(E,M)/\partial M = 0$. Usando las relaciones (1.4) obtenemos

$$\frac{\partial \ln \mathcal{D}(E,M)}{\partial M} = \widetilde{s} = 0$$

y puesto que (ver (1.4)) $M = -N\mu_B \tanh(\widetilde{s}\mu_B)$ se deduce que

$$\boxed{M = 0 \quad (\text{ ¡ en un campo magnético nulo ! })} \tag{1.7}$$

En tal caso, $\mathcal{D}(E,M)$ se reduce (en equilibrio termodinámico y en ausencia de un campo magnético) a

$$\mathcal{D}(E,M) = \mathcal{D}_{tr}(E) \qquad \text{con } E = \frac{3}{2}N\mathrm{k_B}T \quad \text{y} \quad M = 0$$

Existe una diferencia fundamental entre esta expresión y las definiciones (1.1), (1.2) y (1.3). Tales definiciones *solo* responden la pregunta ¿ Cual es el número de estados por intervalo de energía E y por intervalo de momento magnético M ? y no guarda relación alguna con la Mecánica Estadística. Solo es un objeto con información relevante que, en este caso, es de naturaleza mecánico-clásica y magnética. La relación con la Mecánica Estadística *solo* se establece una vez que se adopta la hipótesis de Boltzmann que relaciona el *número de estados accesibles del sistema con la entropía* o, equivalentemente, con $S = \mathrm{k_B} \ln \mathcal{D}(E, M)$. En tal situación exigimos que E y M se reduzcan a valores tales que maximizan S (sistema aislado) o minimizen $F = E - TS$ (sistema en contacto con un baño térmico). Este programa es el que conduce a, que en ausencia de un campo magnético, se obtengan los resultados conocidos para un gas ideal clásico.

Efecto de un Campo Magnético:
Cuando se aplica un campo magnético H, la energía del gas, en una configuración dada, es $\sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i^{\,2}/2m - MH$ lo cual conduce a un *corrimiento* $E \to E + HM$ en la expresión (1.2): Los resultados en presencia del campo magnético se obtienen realizando este corrimiento en el cálculo anterior. Por ejm...

- Energía:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathrm{k_B}T} &= \frac{\partial \ln \mathcal{D}(E \to E + HM, M)}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E}\left[\frac{3N}{2}\ln(E + HM)\right] \\ &= \frac{3N}{2(E + HM)} \end{aligned}$$

  lo cual equivale a

$$E = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B}T - HM$$

  El cálculo se *completa* cuando determinemos el comportamiento de M en función de H y T.

- Presión: Se obtiene la ecuación de estado anterior puesto que el volumen no es afectado por el corrimiento señalado arriba. En efecto

$$P = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln \mathcal{D}(E \to E + HM, M)}{\partial V} = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial (N \ln V)}{\partial V} = \mathrm{k_B}T\,\frac{N}{V}$$

$$\boxed{PV = N\mathrm{k_B}T \quad (\text{ ¡ en un campo magnético } \textbf{NO} \text{ nulo ! })} \tag{1.8}$$

- Momento Magnético: En cualquier caso (sistema aislado o en contacto con un reservorio térmico) la solución se obtiene para un valor de M tal que la entropía $S = \mathrm{k_B} \ln \mathcal{D}(E + HM, M)$ es un *extremo*. En efecto

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial S}{\partial M} = \frac{\partial \left[\mathrm{k_B} \ln \mathcal{D}(E + HM, M)\right]}{\partial M} \\ &= \mathrm{k_B} \frac{\partial}{\partial M} \left[\frac{3N}{2} \ln (E + HM) + \widetilde{s}M + N \ln (2 \cosh (\widetilde{s}\mu_B))\right] \\ &= \underbrace{\frac{3N\mathrm{k_B}H}{2(E + HM)}}_{= H/T} + \mathrm{k_B} \underbrace{\left[M + N\mu_B \tanh (\widetilde{s}\mu_B)\right]}_{= 0} \frac{\partial \widetilde{s}}{\partial M} + \mathrm{k_B}\widetilde{s} \end{aligned}$$

lo cual equivale a $\widetilde{s} = -H/\mathrm{k_B}T$. Usando el resultado (1.4):

$$\boxed{M = N\mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)} \tag{1.9}$$

El cálculo de la energía se *completa* segun

$$\boxed{E = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B}T - MH = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B}T - N\mu_B H \tanh \left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)} \tag{1.10}$$

Es interesante observar que la *contribución magnética* a la entropía ($\mathrm{k_B} \ln \mathcal{D}_{mag}(M)$) resulta ser

$$\mathrm{k_B} \ln \mathcal{D}_{mag}(M) = -\frac{HM}{T} + N\mathrm{k_B} \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)\right)$$

tal que

$$\frac{\partial \left[\mathrm{k_B} \ln \mathcal{D}_{mag}(M)\right]}{\partial H} = 0 \quad \Longrightarrow \quad M = N\mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)$$

Ello significa que podemos considerar a M o a H como variables independientes. Así mismo

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial H} &= \frac{\partial\left[\mathrm{k_B}\ln\mathcal{D}\left(E+HM,M\right)\right]}{\partial H} \\
&= \mathrm{k_B}\frac{\partial}{\partial H}\left[\frac{3N}{2}\ln\left(E+HM\right)+\widetilde{s}M+N\ln\left(2\cosh\left(\widetilde{s}\mu_B\right)\right)\right] \\
&= \underbrace{\frac{3N\mathrm{k_B}M}{2\left(E+HM\right)}}_{=\,M/T} \quad\Longrightarrow\quad M=T\frac{\partial S}{\partial H} \qquad (1.11)
\end{aligned}$$

c) Evalue el *Calor Específico* a:

1) V y M constantes. $C_{V,M}=?$.
2) P y H constantes. $C_{P,H}=?$.
3) P y M constantes. $C_{P,M}=?$.
4) V y H constantes. $C_{V,H}=?$.

(2 puntos)

<u>SOLUCIÓN</u>:

Por definición el calor específico viene dado por

$$C\equiv\frac{đQ}{\mathrm{d}T}$$

En particular

$$\begin{aligned}
đQ &= T\mathrm{d}S=T\,đ\left(\mathrm{k_B}\ln\mathcal{D}\left(E\to E+HM,M\right)\right) \\
&= \overbrace{\mathrm{k_B}T\frac{\partial\ln\mathcal{D}\left(E\to E+HM,M\right)}{\partial E}}^{=\,1}\mathrm{d}E \\
&\quad+ \\
&\quad\overbrace{\mathrm{k_B}T\frac{\partial\ln\mathcal{D}\left(E\to E+HM,M\right)}{\partial V}}^{=\,P}\mathrm{d}V \\
&\quad+ \\
&\quad\overbrace{\mathrm{k_B}T\frac{\partial\ln\mathcal{D}\left(E\to E+HM,M\right)}{\partial H}}^{=\,M}\mathrm{d}H
\end{aligned}$$

donde hemos usado el resultado (1.11). En conclusión

$$đQ=\mathrm{d}E+P\,\mathrm{d}V+M\,\mathrm{d}H \qquad (1.12)$$

1) $C_{V,M}$: Cuando V y M son constantes la expresión (1.12) se reduce a

$$đQ = \mathrm{d}E + \mathrm{d}\left(MH\right) = \mathrm{d}\left(E + MH\right) = \mathrm{d}\left(\frac{3}{2}\,N\mathrm{k_B}T\right) = \frac{3}{2}\,N\mathrm{k_B}\,\mathrm{d}T$$

Por tanto

$$\boxed{C_{V,M} = \frac{3}{2}\,N\mathrm{k_B}} \tag{1.13}$$

2) $C_{P,H}$: Cuando P y H son constantes la expresión (1.12) se reduce a

$$\begin{aligned} đQ &= \mathrm{d}E + \mathrm{d}\left(PV\right) = \mathrm{d}\left(E + PV\right) \\ &= \mathrm{d}\left(\frac{3}{2}\,N\mathrm{k_B}T - N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right) + N\mathrm{k_B}T\right) \\ &= \left[\frac{5}{2}\,N\mathrm{k_B} - N\mu_B\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}}\left(-\frac{1}{T^2}\right)\right]\mathrm{d}T \end{aligned}$$

Por tanto

$$\boxed{C_{P,H} = \frac{5}{2}\,N\mathrm{k_B} + \frac{N\mu_B^2 H}{\mathrm{k_B}T^2}\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)} \tag{1.14}$$

3) $C_{P,M}$: Cuando P y M son constantes la expresión (1.12) se reduce a

$$\begin{aligned} đQ &= \mathrm{d}E + \mathrm{d}\left(PV\right) + \mathrm{d}\left(MH\right) = \mathrm{d}\left(E + PV + MH\right) \\ &= \mathrm{d}\left(\frac{3}{2}\,N\mathrm{k_B}T + N\mathrm{k_B}T\right) = \frac{5}{2}\,N\mathrm{k_B}\,\mathrm{d}T \end{aligned}$$

y en consecuencia

$$\boxed{C_{P,M} = \frac{5}{2}\,N\mathrm{k_B}} \tag{1.15}$$

4) $C_{V,H}$: Cuando V y H son constantes la expresión (1.12) se reduce a

$$đQ = \mathrm{d}E = \mathrm{d}\left(\frac{3}{2}\,N\mathrm{k_B}T - N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B}T}\right)\right)$$

y en consecuencia

$$\boxed{C_{V,H} = \frac{3}{2} N\mathrm{k_B} + \frac{N\mu_B^2 H}{\mathrm{k_B} T^2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\mu_B H}{\mathrm{k_B} T}\right)} \tag{1.16}$$

2. N partículas de tipo A se introducen en un recipiente de volumen V. La masa de una de tales partículas es m. Sin embargo, dos partículas de tipo A pueden combinarse para formar una molécula A_2 con energía en reposo $-\Delta$ con $\Delta > 0$.

   En equilibrio termodinámico, evalue las concentraciones $n_\mathrm{A} \equiv N_\mathrm{A}/V$ y $n_{\mathrm{A}_2} \equiv N_{\mathrm{A}_2}/V$ de partículas de tipo A y moléculas A_2, respectivamente. N_A y N_{A_2} es el número de partículas de tipo A y moléculas A_2, respectivamente. **(6 puntos)**

   Discuta los casos límites $\mathrm{k_B}T \lessgtr \Delta$. T es la temperatura absoluta. **(4 puntos)**

   <u>SOLUCIÓN</u>:

   Puesto que el número de partículas de tipo A es constante y una partícula de tipo A_2 esta formada por dos partículas de tipo A se cumple que

$$N_\mathrm{A} + 2N_{\mathrm{A}_2} = N$$

   La estados accesibles del sistema vienen dados por $\Omega_\mathrm{A}\Omega_{\mathrm{A}_2}$ tal que la entropía de los gases resulta ser

$$S = \mathrm{k_B} \ln \Omega_\mathrm{A} + \mathrm{k_B} \ln \Omega_{\mathrm{A}_2}$$

   Con respecto a la energía conviene distinguir dos casos:

   1) Si el sistema está aislado la energía se conserva ($E_\mathrm{A} + E_{\mathrm{A}_2} = \text{constante}$) y la entropía es máxima tal que

$$\frac{\partial S}{\partial E_\mathrm{A}} = 0 \implies \frac{1}{\mathrm{k_B} T_\mathrm{A}} = \frac{\partial \ln \Omega_\mathrm{A}}{\partial E_A} = \frac{\partial \ln \Omega_{\mathrm{A}_2}}{\partial E_{\mathrm{A}_2}} = \frac{1}{\mathrm{k_B} T_{\mathrm{A}_2}} \implies T_\mathrm{A} = T_{\mathrm{A}_2} \equiv T$$

   2) En caso contrario, cuando está en contacto con un baño térmico a la temperatura T, los gases adquieren la temperatura comun T.

   En ambas situaciones, el sistema se encuentra en el equilibrio termodinámico a la temperatura T.

Además, en ambos casos se debe satisfacer que

$$\frac{\partial \ln \Omega_{\rm A}}{\partial N_A} = \frac{1}{2}\frac{\partial \ln \Omega_{\rm A_2}}{\partial N_{\rm A_2}} \quad \Longrightarrow \quad -{\rm k_B}T\,\frac{\partial \ln \Omega_{\rm A}}{\partial N_A} = \frac{1}{2}\left(-{\rm k_B}T\,\frac{\partial \ln \Omega_{\rm A_2}}{\partial N_{\rm A_2}}\right)$$

$$\Longrightarrow \quad \mu_{\rm A} = \frac{1}{2}\,\mu_{\rm A_2}$$

puesto que en el primer caso la entropía debe ser máxima mientras en el segundo caso la energía libre de Helmholtz debe ser un mínimo.

En conclusión, las ecuaciones básicas que determinan el equilibrio termodinámico son

$$n_{\rm A} + 2n_{\rm A_2} = n \equiv \frac{N}{V}\,, \qquad 2\mu_{\rm A} = \mu_{\rm A_2} \tag{1.17}$$

En términos de la función de partición Z el potencial químico μ es

$$\mu = -{\rm k_B}T\,\frac{\partial \ln Z}{\partial N}\,, \qquad (\ N\text{: Número de partículas }\ )$$

La función de partición $Z_{\rm A_2}$ viene dada por

$$\begin{aligned}
Z_{\rm A_2} &= \frac{1}{N_{\rm A_2}!}\int \prod_{i=1}^{N_{\rm A_2}} \frac{{\rm d}^3\vec{r}_i\,{\rm d}^3\vec{p}_i}{h^3}\ {\rm e}^{-\beta\left\{\sum_{i=1}^{N_{\rm A_2}}\left[\vec{p}_i^{\,2}/2(2m)-\Delta\right]\right\}} \\
&= \frac{V^{N_{\rm A_2}}\,{\rm e}^{N_{\rm A_2}\beta\Delta}}{N_{\rm A_2}!}\int \prod_{i=1}^{N_{\rm A_2}} \frac{{\rm d}^3\vec{p}_i}{h^3}\ {\rm e}^{-\beta\sum_{i=1}^{N_{\rm A_2}}\vec{p}_i^{\,2}/4m} \\
&= \frac{V^{N_{\rm A_2}}\,{\rm e}^{N_{\rm A_2}\beta\Delta}}{N_{\rm A_2}!}\left(\int \frac{{\rm d}^3\vec{p}}{h^3}\ {\rm e}^{-\beta\vec{p}^{\,2}/4m}\right)^{N_{\rm A_2}} \\
&= \frac{V^{N_{\rm A_2}}\,{\rm e}^{N_{\rm A_2}\beta\Delta}}{N_{\rm A_2}!}\left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{{\rm d}p}{h}\ {\rm e}^{-\beta p^2/4m}\right)^{3N_{\rm A_2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_{\rm A_2} &= \frac{V^{N_{\rm A_2}}\,\lambda_{\rm A_2}^{-3N_{\rm A_2}}\ {\rm e}^{N_{\rm A_2}\beta\Delta}}{N_{\rm A_2}!} \\
\lambda_{\rm A_2} &\equiv \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{{\rm d}p}{h}\ {\rm e}^{-\beta p^2/4m}\right)^{-1} = \frac{h}{\sqrt{2\pi\,(2m)\,{\rm k_B}T}}
\end{aligned}$$

Entonces

$$\mu_{\rm A_2} = -{\rm k_B}T\,\frac{\partial \ln Z_{\rm A_2}}{\partial N_{\rm A_2}}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\mathrm{k_B}T\,\frac{\partial}{\partial N_{\mathrm{A}_2}}\left(N_{\mathrm{A}_2}\ln V - 3N_{\mathrm{A}_2}\ln\lambda_{\mathrm{A}_2} + N_{\mathrm{A}_2}\beta\Delta - \ln N_{\mathrm{A}_2}!\right)\\
&= -\mathrm{k_B}T\,\left(\ln V - 3\ln\lambda_{\mathrm{A}_2} + \beta\Delta - \ln N_{\mathrm{A}_2}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\mu_{\mathrm{A}_2} = \mathrm{k_B}T\,\ln\left(n_{\mathrm{A}_2}\lambda_{\mathrm{A}_2}^3\,\mathrm{e}^{-\beta\Delta}\right)
$$

El potencial químico μ_{A} se calcula en forma similar a μ_{A_2}. En particular, puede obtenerse a partir de este haciendo los cambios $\Delta \to 0$ y $m \to m/2$. En efecto

$$
\mu_{\mathrm{A}_2} = \mathrm{k_B}T\,\ln\left(n_{\mathrm{A}}\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)\,, \qquad \lambda_{\mathrm{A}} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m\mathrm{k_B}T}}
$$

Note que $\lambda_{\mathrm{A}}/\lambda_{\mathrm{A}_2} = \sqrt{2}$. Al satisfacer las condiciones (1.17) se obtiene

$$
\left(n_{\mathrm{A}}\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)^2 = n_{\mathrm{A}_2}\lambda_{\mathrm{A}_2}^3\,\mathrm{e}^{-\beta\Delta} \quad\Longrightarrow\quad n_{\mathrm{A}}^2\lambda_{\mathrm{A}}^6 = \frac{n-n_a}{2}\,\frac{\lambda_{\mathrm{A}}^3}{2\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{-\beta\Delta}
$$

la cual se reduce a $4\sqrt{2}\;\lambda_{\mathrm{A}}^3 n_{\mathrm{A}}^2 + \mathrm{e}^{-\beta\Delta}n_{\mathrm{A}} - \mathrm{e}^{-\beta\Delta}n = 0$ cuyas raices son

$$
n_{\mathrm{A}\pm} = \frac{-\,\mathrm{e}^{-\beta\Delta} \pm \sqrt{\mathrm{e}^{-2\beta\Delta} + 16\sqrt{2}\;\lambda_{\mathrm{A}}^3\,\mathrm{e}^{-\beta\Delta}\,n}}{8\sqrt{2}\;\lambda_{\mathrm{A}}^3}
$$

donde obviamente solo tiene sentido físico la solución $n_{\mathrm{A}+}$:

$$
\boxed{n_{\mathrm{A}} = \frac{2}{1+\left(1+16\sqrt{2}\;\mathrm{e}^{\beta\Delta}\,n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)^{1/2}}\,n\,, \qquad n_{\mathrm{A}_2} = \frac{1}{2}\,(n-n_{\mathrm{A}})} \tag{1.18}
$$

Cuando $\mathrm{k_B}T \ll \Delta$ se obtiene (Note que es necesario que $n\lambda_{\mathrm{A}}^3 \ll 1$ puesto que estamos considerando el régimen de un gas ideal clásico y, en consecuencia, debe cumplirse $\Delta \gg \mathrm{k_B}T \gg h^2/\left[2\pi m n^{-2/3}\right]$)

$$
n_{\mathrm{A}} \;\approx\; \frac{2}{1+\left(16\sqrt{2}\;\mathrm{e}^{\beta\Delta}\,n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)^{1/2}}\,n \approx \frac{2}{\left(16\sqrt{2}\;\mathrm{e}^{\beta\Delta}\,n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)^{1/2}}\,n
$$

$$\boxed{\begin{aligned} n_{\mathrm{A}} &\approx 2^{-5/4}\,\frac{\mathrm{e}^{-\Delta/2\mathrm{k_B}T}}{\sqrt{n\lambda_{\mathrm{A}}^3}}\,n \;\propto\; T^{-3/4}\,\mathrm{e}^{-\Delta/2\mathrm{k_B}T} \\ n_{\mathrm{A}_2} &= \frac{1}{2}\,(n-n_{\mathrm{A}}) \end{aligned} \quad , \quad \mathrm{k_B}T \ll \Delta \\ \text{Prácticamente todo el gas consiste de moléculas } \mathrm{A}_2. } \tag{1.19}$$

Cuando $\mathrm{k_B}T \gg \Delta$ se obtiene ($n\lambda_{\mathrm{A}}^3 \ll 1$ puesto que la validez de nuestro análisis corresponde al límite de un gas ideal clásico)

$$\begin{aligned} n_{\mathrm{A}} &\approx \frac{2}{1+\left(1+8\sqrt{2}\;\mathrm{e}^{\beta\Delta}\,n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)}\,n = \frac{1}{1+4\sqrt{2}\;\mathrm{e}^{\beta\Delta}\,n\lambda_{\mathrm{A}}^3}\,n \\ &\approx \left(1-4\sqrt{2}\;\mathrm{e}^{\beta\Delta}\,n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)n \end{aligned}$$

Por tanto

$$\boxed{\begin{aligned} n_{\mathrm{A}} &\approx n - 4\sqrt{2}\;\left(1+\frac{\Delta}{\mathrm{k_B}T}\right)\left(n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)n \\ n_{\mathrm{A}_2} &\approx 2\sqrt{2}\;\left(1+\frac{\Delta}{\mathrm{k_B}T}\right)\left(n\lambda_{\mathrm{A}}^3\right)n \end{aligned} \quad , \quad \mathrm{k_B}T \gg \Delta \\ \text{Prácticamente todo el gas consiste de partículas de tipo A} } \tag{1.20}$$

Capítulo 7

Parcial 2

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

15 / 07 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/`
2º Examen Parcial[1]

1. Un sistema de espines 1/2 se encuentra en contacto con un baño térmico a la temperatura T. La energía $E\{\sigma_i\}$ de una configuración $\{\sigma_i\}$ viene dada por

$$E\{\sigma_i\} \equiv -\frac{J}{2N}\sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j - H\sum_i \sigma_i\,; \qquad \sigma_\ell = \pm\frac{1}{2}\ \ \forall\ell\,, \quad J>0$$

N es el número de sitios y $H>0$ es un campo magnético.

a) Evalue el momento magnético medio por sitio $m \equiv \langle M\rangle/N$ en función de la temperatura T cuando $H=0$. $M \equiv \sum_i \sigma_i$. **(10 puntos)**

SOLUCIÓN:

La función de partición viene dada por

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{-\beta\left[-(J/2N)\sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j - HM\right]}\,, \qquad \beta \equiv \frac{1}{\mathrm{k_B}T}$$

tal que

$$\begin{aligned}\langle M\rangle &= Z^{-1}\sum_{\{\sigma_i\}}\left[\mathrm{e}^{\beta(J/2N)\sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j+\beta HM}M\right]\\ &= Z^{-1}\left[\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial H}\sum_{\{\sigma_i\}}\mathrm{e}^{\beta(J/2N)\sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j+\beta HM}\right] = \mathrm{k_B}T\,\frac{1}{Z}\,\frac{\partial Z}{\partial H}\end{aligned}$$

[1]Fecha de entrega: viernes 23 de julio de 2004

$$\langle M\rangle = \mathrm{k_B}T\,\frac{\partial \ln Z}{\partial H} = -\,\frac{\partial F}{\partial H}$$

$F \equiv -\mathrm{k_B}T\,\ln Z$ es la energía libre de Helmholtz.

La energía de una configuración particular $E\{\sigma_i\}$ puede ser expresada en términos de M. En efecto

$$M^2 = \sum_i \overbrace{\sigma_i^2}^{=\,1/4} + \sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j = \frac{1}{4}\,N + \sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j \quad\Longrightarrow\quad \sum_{i\neq j}\sigma_i\sigma_j = M^2 - \frac{1}{4}\,N$$

tal que

$$E\{\sigma_i\} = -\,\frac{J}{2N}\,M^2 + \frac{1}{8}\,J - HM$$

El factor $J/8$ no es importante puesto que solo representa un *corrimiento* de la energía aparte de que no es extensivo y, por tanto, es ignorado en el cálculo de Z:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\beta HM}\,\mathrm{e}^{\beta JM^2/2N}$$

La presencia del factor cuadrático $\propto M^2$ en la exponencial complica el cálculo y por ello es necesario recurrir a una representación integral de tal exponencial. En el integrando, de tal representación, M *aparece* linealmente en el argumento de una exponencial lo cual facilita la evaluación sobre las configuraciones posibles $\{\sigma_i\}$ a expensas de realizar una integración en el límite termodinámico ($\lim_{\substack{N\to\infty\\ V\to\infty}}(N/V)$ finito). V es el volumen del sistema. La identidad apropiada es[2]

$$\mathrm{e}^{b^2} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2+bx}$$

En consecuencia

$$Z \;=\; \sum_{\{\sigma i\}}\left(\mathrm{e}^{\beta HM}\,\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2+\sqrt{\beta J/2N}\;Mx}\right)$$

---

[2]

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2+bx} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}(x-2b)^2+b^2} = \mathrm{e}^{b^2}\int_{-\infty-2\Im b}^{\infty-2\Im b}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2} = \mathrm{e}^{b^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2}$$

$$= \;2\,\mathrm{e}^{b^2}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-x^2}}_{=\,\sqrt{\pi}} \qquad\Longrightarrow\qquad \boxed{\mathrm{e}^{b^2} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2+bx}}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2} \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{\left(\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x\right) M} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2} \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_i \mathrm{e}^{\left(\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x\right) \sigma_i} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2} \prod_i \sum_{\sigma_i = \pm 1/2} \mathrm{e}^{\left(\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x\right) \sigma_i} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2} \times \\
&\quad \left[\mathrm{e}^{\left(\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x\right)(-1/2)} + \mathrm{e}^{\left(\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x\right)(1/2)} \right]^N \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}x^2} \left[2\cosh\left(\frac{\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x}{2} \right) \right]^N \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{F}(x,H)}
\end{aligned}
$$

donde

$$
\mathcal{F}(x,H) = \frac{1}{4}\,\mathrm{k_B}\,T\,x^2 - N\mathrm{k_B}\,T\,\ln 2 - N\mathrm{k_B}\,T\,\ln\cosh\left(\frac{\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x}{2} \right)
$$

En el límite termodinámico, la contribución mas importante a la integral ocurre *alrededor* del punto de ensilladura $\left(\widetilde{x},\ \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{F}\left(\widetilde{x},H\right)}\right)$ de $\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{F}(x,H)}$:

$$
\frac{\partial\left[-\beta\mathcal{F}(\widetilde{x},H)\right]}{\partial\widetilde{x}} = 0
$$

Puesto que

$$
\frac{\partial\left[-\beta\mathcal{F}(x,H)\right]}{\partial x} = -\frac{1}{2}\,x + N\tanh\left(\frac{\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ x}{2} \right) \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\beta J}{2N}}
$$

$\widetilde{x}$ satisface

$$
\widetilde{x} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2}}\ \tanh\left(\frac{\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ \widetilde{x}}{2} \right) \tag{2.1}
$$

Esta ecuación posee dos soluciones para $\widetilde{x}$. La solución que tiene el mismo signo que H genera la contribución mas importante (en este

caso $\widetilde{x} > 0$) y en particular es la única a ser tomada en cuenta en el límite termodinámico. El lector puede convencerse de ello al estudiar el comportamiento de $\partial^2 \left[-\beta \mathcal{F}\left(\widetilde{x}, H\right)\right] / \partial \widetilde{x}^2$. Ello significa que la fase magnética ocurre cuando los límites $H \to 0^+$ y termodinámico se toman en el orden

$$\lim_{H \to 0^+} \lim_{\substack{N \to \infty \\ V \to \infty \\ (N/V)\ \text{finito}}} \qquad (\ \textsf{Genera}\ \text{fase magnética}\ )$$

Se dice, entonces, que el campo magnético *rompe* la simetría *bajo inversión temporal*[3] del hamiltoniano que describe el sistema (ver (2.9)). En la práctica, *y por brevedad*, y en ausencia del campo magnético (H = 0) se toma en cuenta arbitrariamente solo uno de los puntos de ensilladura a fin de generar la fase magnética. Sin embargo, se sobreentiende que el *delicado* proceso de límites, señalado arriba, está implícitamente involucrado. Físicamente, los sistemas magnéticos son finitos ($N \ggg 1$). Aun así, cada punto de ensilladura *actua* en forma parecida a un pozo de potencial con profundidades $\propto N$ cuando $N \ggg 1$ tal que una vez que el sistema es *atrapado* en uno de ellos la probabilidad de evolucionar hacia el otro pozo (por ejm. . . , invertir todos los espines simultaneamente) es exponencialmente pequeña y completamente despreciable. Ello establece la correspondencia con la descripción matemática señalada arriba.

Cuando los límites, señalados arriba, se toman en el orden contrario

$$\lim_{\substack{N \to \infty \\ V \to \infty \\ (N/V)\ \text{finito}}} \lim_{H \to 0^+} \qquad (\ \textsf{No}\ \textsf{genera}\ \text{fase magnética}\ )$$

[3]Sea $\mathcal{T}$ el *operador de inversión temporal*. Su efecto sobre un espin $\vec{\mathsf{S}}$ es el *cambio de signo* del espin y viene dado por

$$\mathcal{T} \vec{\mathsf{S}} \mathcal{T}^{-1} = -\vec{\mathsf{S}}$$

Clásicamente, ello corresponde a la inversión de signo del momento angular $\vec{L} \equiv \vec{r} \times (m\, \mathrm{d}\vec{r}/\mathrm{d}t)$ cuando cambia el signo del tiempo t:

$$\vec{L} = \vec{r} \times m \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} \quad \xrightarrow{t \to -t} \quad \vec{r} \times m \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}\left(-t\right)} = -\vec{r} \times m \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} = -\vec{L}$$

Es obvio que productos de espines son invariantes bajo inversión temporal. Por ejm. . .

- $\mathcal{T} \vec{\mathsf{S}}_1 \cdot \vec{\mathsf{S}}_2 \mathcal{T}^{-1} = \mathcal{T} \vec{\mathsf{S}}_1 \mathcal{T}^{-1} \cdot \mathcal{T} \vec{\mathsf{S}}_2 \mathcal{T}^{-1} = \left(-\vec{\mathsf{S}}_1\right) \cdot \left(-\vec{\mathsf{S}}_2\right) = \vec{\mathsf{S}}_1 \cdot \vec{\mathsf{S}}_2$
- $\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\vec{\mathsf{S}}_1 \cdot \vec{\mathsf{S}}_2}\, \vec{\mathsf{S}}_3\right) = \mathrm{Tr}\left(\mathcal{T}\, \mathrm{e}^{-\vec{\mathsf{S}}_1 \cdot \vec{\mathsf{S}}_2}\, \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} \vec{\mathsf{S}}_3 \mathcal{T}^{-1}\right) = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\vec{\mathsf{S}}_1 \cdot \vec{\mathsf{S}}_2}\, \left[-\vec{\mathsf{S}}_3\right]\right)$
  $\Longrightarrow \quad \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\vec{\mathsf{S}}_1 \cdot \vec{\mathsf{S}}_2}\, \vec{\mathsf{S}}_3\right) = 0$

los dos puntos de ensilladura producen contribuciones similares que dan lugar a la ausencia de la fase magnética: Ello corresponde a la invariancia bajo inversión temporal del hamiltoniano del sistema (ver (2.9)) en ausencia de campo magnético. Se dice, entonces, que tal procedimiento *restaura* la simetría bajo inversión temporal del hamiltoniano, que describe el sistema (ver (2.9)), en ausencia de campo magnético ($H = 0$).

Note que $\mathcal{F}(\widetilde{x}, H)$ es la energía libre de Helmholtz: $F = -\mathrm{k_B}\, T\, \ln Z = \mathcal{F}(\widetilde{x}, H)$. Así mismo

$$\begin{aligned}
\langle M \rangle &= -\overbrace{\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \widetilde{x}}}^{=0} \frac{\partial \widetilde{x}}{\partial H} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} \\
&= -\left[-N\mathrm{k_B}\, T \tanh\left(\frac{\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ \widetilde{x}}{2} \right) \left(\frac{\beta}{2} \right) \right]
\end{aligned}$$

tal que

$$m = \frac{\langle M \rangle}{N} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta H + \sqrt{\beta J/2N}\ \widetilde{x}}{2} \right) \tag{2.2}$$

Comparando este resultado con (2.1) se obtiene $\widetilde{x} = \sqrt{2N\beta J}\ m$ el cual se reemplaza en (2.2) para obtener una *ecuación de consistencia* para el momento magnético medio por sitio m:

$$\boxed{\begin{array}{c} \text{Modelo de Ising con Rango Infinito} \\ m = \dfrac{1}{2} \tanh\left(\dfrac{\beta\,[H + Jm]}{2} \right) \end{array}} \tag{2.3}$$

la cual puede resolverse expresando β en función de m. Algunos resultados analíticos son:

- $T = 0\,\mathrm{K} \quad \Longrightarrow \quad m = 1/2$.
- $m \to 0 \quad \Longrightarrow \quad T \to T_c = J/4\mathrm{k_B}$, cuando $H = 0$. Ello significa $m > 0$ si $T < T_c$ y $m = 0$ cuando $T \geq T_c$ en el caso $H = 0$.

lo cual reduce (2.3) a la forma adimensional

$$m = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{h + 4m}{2t} \right); \qquad t \equiv \frac{T}{T_c}, \quad h \equiv \frac{H}{\mathrm{k_B} T_c} \tag{2.4}$$

Esta equivale a

$$t = \frac{h+4m}{2\ \mathrm{arctanh}\,(2m)} = \frac{h+4m}{\ln\left(\frac{1+2m}{1-2m}\right)}\,, \qquad 0 \le t < 1$$

y la energía libre de Helmholtz en forma adimensional es

$$\overline{F} \equiv \frac{F}{N\mathrm{k_B}T_c} = 2m^2 - t\,\ln 2 - t\,\ln\cosh\left(\frac{h+4m}{2t}\right)$$

cuyo mínimo como función de m genera la ecuación de consistencia (2.4).

La Figura 7.1 muestra el comportamiento de m vs. t en ausencia del campo magnético ($h = 0$).

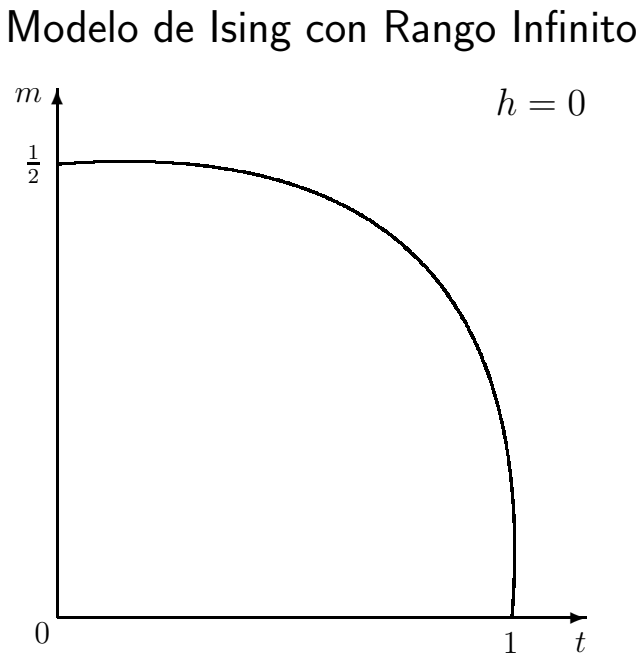


Figura 7.1: Comportamiento de m vs. t. $0 \le t \le 1$. Cuando $t > 1$, $m = 0$.

Estudiemos la ecuación $m = \dfrac{1}{2}\tanh\left(\dfrac{2m}{t}\right)$, que corresponde al caso $h = 0$, en algunos casos límites:

$$t \gtrsim 0: \qquad m \sim \frac{1}{2} - \mathrm{e}^{-2/t} \tag{2.5}$$

$$t \lesssim 1: \qquad m \approx \frac{1}{2}\left[\frac{2m}{t} - \frac{1}{3}\left(\frac{2m}{t}\right)^3\right] \approx \frac{m}{t} - \frac{4}{3}m^3$$

$$\approx \frac{\sqrt{3}}{2}\,(1-t)^{1/2} \tag{2.6}$$

b) Evalue la susceptibilidad magnética por sitio $\chi = (\partial m/\partial H)_{H=0}$.
(5 puntos)

SOLUCIÓN:
Derivando ambos miembros de (2.3) respecto de H se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial m}{\partial H} &= \frac{1}{2}\left\{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta\,[H+Jm]}{2}\right)\right\}\frac{\beta}{2}\left(1+J\,\frac{\partial m}{\partial H}\right)\\ &= \frac{1}{4}\,\beta\left(1-4m^2\right)\left(1+J\,\frac{\partial m}{\partial H}\right)\end{aligned}$$

donde hemos usado (2.3). Por tanto

$$\boxed{\begin{gathered}\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_{H=0} = \frac{\beta\,(1/4-m^2)}{1-\beta J\,(1/4-m^2)}\\ \text{con}\quad m = \frac{1}{2}\,\tanh\left(\frac{\beta J m}{2}\right)\end{gathered}} \tag{2.7}$$

Adimensionalmente, esta resulta ser

$$\boxed{\begin{gathered}\overline{\chi} \equiv \mathrm{k_B}\,T_c\,\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{h=0} = \frac{t^{-1}\,(1/4-m^2)}{1-t^{-1}+4t^{-1}m^2} = \frac{1}{4}\,\frac{1-4m^2}{4m^2-(1-t)}\\ \text{con}\quad m = \frac{1}{2}\,\tanh\left(\frac{2m}{t}\right)\end{gathered}} \tag{2.8}$$

Usando los resultados (2.5) y (2.6) se pueden obtener casos límites para $\overline{\chi}$:

$$\overline{\chi} \approx \begin{cases} \dfrac{\mathrm{e}^{-2/t}}{t}\,, & \text{si} \quad t \gtrsim 0 \\[2ex] \dfrac{1}{8}\,\dfrac{1}{1-t}\,, & \text{si} \quad t \lesssim 1 \\[2ex] \dfrac{1}{4}\,\dfrac{1}{t-1}\,, & \text{si} \quad t > 1 \qquad (\text{ Ver (2.8) con } m=0\ ) \end{cases}$$

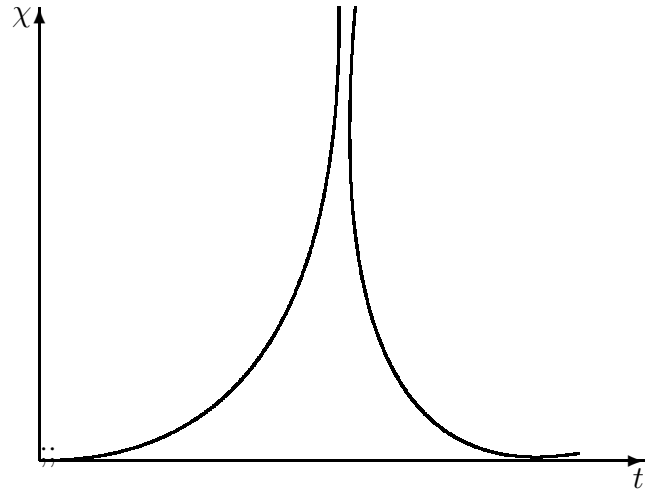


Figura 7.2: Bosquejo de χ vs. t para el Modelo de Ising con rango infinito. La divergencia cuando $t \to 1^{\pm}$ desaparece bajo la aplicación de un campo magnético (Demuéstrelo).

El gráfico (*aproximado*) de χ vs. t luce como en la Figura (7.2)

c) Demuestre que la aproximación de campo medio genera los mismos resultados. **(5 puntos)**

<u>SOLUCIÓN</u>:

Note que $E\{\sigma_i\}$ es un autovalor de

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N}\sum_{i\neq j}\mathsf{S}_{iz}\mathsf{S}_{jz} - H\sum_{i}\mathsf{S}_{iz} \tag{2.9}$$

S_{iz} es la componente z del espin 1/2 en el sitio i.

En la aproximación de campo medio se propone una *linealización* del producto $\mathsf{S}_{iz}\mathsf{S}_{jz}$ ($i \neq j$)

$$\begin{aligned}
\mathsf{S}_{iz}\mathsf{S}_{jz} &= [\langle\mathsf{S}_{iz}\rangle + (\mathsf{S}_{iz} - \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle)]\,[\langle\mathsf{S}_{jz}\rangle + (\mathsf{S}_{jz} - \langle\mathsf{S}_{jz}\rangle)] \\
&\approx \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle\langle\mathsf{S}_{jz}\rangle + \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle(\mathsf{S}_{jz} - \langle\mathsf{S}_{jz}\rangle) + (\mathsf{S}_{iz} - \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle)\langle\mathsf{S}_{jz}\rangle \\
&= -\langle\mathsf{S}_{iz}\rangle\langle\mathsf{S}_{jz}\rangle + \mathsf{S}_{jz}\langle\mathsf{S}_{iz}\rangle + \mathsf{S}_{iz}\langle\mathsf{S}_{jz}\rangle\ , \qquad i \neq j
\end{aligned}$$

el cual es consistente con la aproximación $\langle\mathsf{S}_{iz}\mathsf{S}_{jz}\rangle \approx \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle\langle\mathsf{S}_{jz}\rangle$. $i \neq j$. Al realizar la linealización, mencionada arriba, consideramos a $\langle\mathsf{S}_{\ell z}\rangle$ como un término de *orden cero* mientras términos como $(\mathsf{S}_{\ell z} - \langle\mathsf{S}_{\ell z}\rangle)$ son de *orden uno* tal que términos de *orden dos* como el producto $(\mathsf{S}_{iz} - \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle)(\mathsf{S}_{jz} - \langle\mathsf{S}_{jz}\rangle)$ son ignorados. Ello equivale a la aproximación:

$$\mathsf{S}_{iz}\left|\frac{1}{2},\sigma_i\right\rangle \approx \langle\mathsf{S}_{iz}\rangle\left|\frac{1}{2},\sigma_i\right\rangle\ , \qquad \sigma_i = \pm\frac{1}{2}$$

lo cual, a su vez, equivale a suponer que los estados *necesarios* para construir la fase magnética están *concentrados* alrededor de aquellos cuyos autovalores $\{\sigma_i\}$ no generan una *diferencia apreciable* cuando se realiza la substitución $\mathsf{S}_{iz} \to \langle \mathsf{S}_{iz} \rangle$. Por estas razones se dice que la aproximación de campo medio consiste en despreciar *fluctuaciones de espin* en el sistema en consideración.

En definitiva, la aproximación de campo medio se reduce a el reemplazo

$$\mathsf{S}_{iz}\mathsf{S}_{jz} \to -\langle \mathsf{S}_{iz} \rangle \langle \mathsf{S}_{jz} \rangle + \mathsf{S}_{jz} \langle \mathsf{S}_{iz} \rangle + \mathsf{S}_{iz} \langle \mathsf{S}_{jz} \rangle \ , \qquad i \neq j \tag{2.10}$$

$$\text{con} \qquad \langle \mathsf{S}_{iz} \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}_{CM}} \, \mathsf{S}_{iz} \right)}{\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}_{CM}} \right)}$$

donde $\mathcal{H}_{CM}$ se obtiene mediante el reemplazo de (2.10) en (2.9):

$$\mathcal{H}_{CM} \equiv \frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} \langle \mathsf{S}_{iz} \rangle \langle \mathsf{S}_{jz} \rangle - \sum_i \mathsf{S}_{iz} \left(H + \frac{J}{N} \sum_{j \neq i} \langle \mathsf{S}_{jz} \rangle \right)$$

Con $\langle \mathsf{S}_{\ell z} \rangle = m, \ \forall \ell$; $\mathcal{H}$ se reduce a

$$\mathcal{H}_{CM} \equiv \frac{1}{2} N J m^2 - \sum_i \mathsf{S}_{iz} \left(H + J m \right)$$

lo cual describe un sistema de espines (sin interacción entre ellos) en presencia de un *campo magnético efectivo* $(H + Jm)\,\hat{z}$.

$$\begin{aligned} m &= \langle \mathsf{S}_{iz} \rangle = \frac{\sum_{\sigma=\pm 1/2} \left[\mathrm{e}^{\beta(H+Jm)\sigma} \sigma \right]}{\sum_{\sigma=\pm 1/2} \mathrm{e}^{\beta(H+Jm)\sigma}} \\ &= \frac{\mathrm{e}^{\beta(H+Jm)(-1/2)} \, (-1/2) + \mathrm{e}^{\beta(H+Jm)(1/2)} \, (1/2)}{\mathrm{e}^{\beta(H+Jm)(-1/2)} + \mathrm{e}^{\beta(H+Jm)(1/2)}} \end{aligned}$$

$$\boxed{m = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta \left[H + Jm \right]}{2} \right)} \tag{2.11}$$

Este resultado es idéntico al resultado *exacto* (2.3).

Capítulo 8

Parcial 3

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

15 / 07 / 2004
Prof. Félix Marín
Mecánica Estadística
`http://fisica.ciens.ucv.ve/felix/`
TAREA[1] **Nº 5**

1. Investigue la termodinámica estadística de un gas ideal de Bose en un campo uniforme gravitacional (gravedad g). Muestre, en particular, que el fenómeno de condensación de Bose-Einstein se establece a una temperatura T_c dada por

$$T_c \approx T_c^{(0)} \left[1 + \frac{8}{9} \frac{1}{\zeta(3/2)} \left(\frac{\pi m g L}{\mathrm{k_B} T_c^{(0)}} \right)^{1/2} \right]$$

donde L es la altura del recipiente, que contiene el gas, y $mgL \ll \mathrm{k_B} T_c^{(0)}$.**(10 puntos)**

2. Un gas de fermiones sin espin se encuentra en contacto con un baño térmico a la temperatura T. Su densidad de estados de energía $\mathcal{D}(E)$ viene dada por:

$$\mathcal{D}(E) \equiv \begin{cases} \mathcal{D}_V(E) \equiv \dfrac{3\mathcal{N}_V}{2E_V^{3/2}} \sqrt{E_V - E} \ , & \text{si} \quad 0 \leq E < E_V \\ 0 \ , & \text{si} \quad E_V \leq E \leq E_C \\ \mathcal{D}_C(E) \equiv \dfrac{3\mathcal{N}_C}{2E_C^{3/2}} \sqrt{E - E_C} \ , & \text{si} \quad E_C < E \end{cases}$$

Suponga que $\Delta \equiv E_C - E_V \gg \mathrm{k_B} T$ y que el potencial químico μ satisface la relación $E_V < \mu < E_C$. Evalue μ y la relación entre el número de estados

[1] FECHA DE ENTREGA: **viernes 30 de julio de 2004.**
No se aceptarán tareas realizadas en computador.

vacíos N_h con energías menores que E_V y el número de electrones N_e con energías mayores que E_C. **(10 puntos)**

Estos problemas fueron planteados y resueltos en las tareas previas.

Parte II

Apéndices

Apéndice A

Estimaciones: Constantes y Unidades

Carga del Electrón	$-e =$	$-1{,}60210 \times 10^{-19}$ Coulomb ,	$(-e < 0)$
Constante de Boltzmann	$k_B =$	$1{,}38054 \times 10^{-6} \dfrac{\text{ergios}}{\text{K}}$	
Constante de Planck	$h =$	$6{,}62559 \times 10^{-27}$ ergios seg	
Constante *" h barra "* de Planck	$\hbar =$	$1{,}054494 \times 10^{-27}$ ergios seg ,	$\left(\hbar = \dfrac{h}{2\pi} \right)$
Constante R de los Gases	$R =$	$8{,}31434 \times 10^{7} \dfrac{\text{ergios}}{\text{K mol}}$	
	$=$	$1{,}98717 \dfrac{\text{calorías}}{\text{K mol}}$	
Masa en Reposo del Electrón	$m_e =$	$9{,}10908 \times 10^{-28}$ gr	
Masa en Reposo del Protón	$m_p =$	$1{,}67252 \times 10^{-24}$ gr ,	$\left(\begin{array}{rcl} \dfrac{m_p}{m_e} & = & 1{,}83610 \\ & \sim & 2000 \end{array} \right)$
Número de Avogadro	$N_A =$	$\dfrac{6{,}02252 \times 10^{23}}{\text{mol}}$,	$(R = N_A k_B)$
Radio de Bohr	$a_0 =$	$0{,}529$ Å ,	$\left(a_0 = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} \right)$
Energía de Ionización del Átomo de Hidrógeno	$\dfrac{e^2}{2a_0} =$	$13{,}6\ eV$,	$\left(\dfrac{e^2}{2a_0} = \dfrac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \right)$
Velocidad de la Luz en el Vacío	$c =$	$2{,}997925 \times 10^{10} \dfrac{\text{cm}}{\text{seg}}$	
Magnetón de Bohr	$\mu_B =$	$9{,}2732 \times 10^{-21} \dfrac{\text{ergios}}{\text{gauss}}$,	$\left(\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e c} \right)$
Magnetón Nuclear	$\mu_N =$	$5{,}05050 \times 10^{-24} \dfrac{\text{ergios}}{\text{gauss}}$,	
	$\sim$	$\dfrac{\mu_B}{2000}$	

Apéndice B

Herramientas Matemáticas

B.1. Fórmulas Útiles

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-t} t^{z-1}\,; \qquad z \in \mathbf{C}\,, \quad \Re z > 0 \tag{B.1}$$

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)\ , \qquad z \neq 0, -1, -2, -3, \ldots \tag{B.2}$$

$$\Gamma(z)\,\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\operatorname{sen}(\pi z)}\,, \qquad z \neq 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \tag{B.3}$$

$$\Gamma(z+1) \sim \sqrt{2\pi}\ z^{z+1/2}\,\mathrm{e}^{-z}\left(1 + \frac{12}{z} + \frac{1}{288 z^2} + \cdots\right)$$
$$|z| \gg 1\,,\ |\arg z| < \pi \tag{B.4}$$

$$\boxed{\text{La función Gamma tiene polos simples en } z = 0, -1, -2, \ldots} \tag{B.5}$$

$$\tag{B.6}$$

$$N! = \Gamma(N+1)\ , \qquad N \in \mathbf{N} \tag{B.7}$$

$$\ln N! \approx N \ln N - N\,, \qquad N \gg 1 \tag{B.8}$$

$$\frac{\mathrm{d}\ln N!}{\mathrm{d}N} \approx \ln N\,, \qquad N \gg 1 \tag{B.9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-x^2} = \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}\ \approx 1{,}7724539\ldots \tag{B.10}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\ \sigma} = 1\,, \qquad \sigma > 0 \tag{B.11}$$

$$\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x \, x \, \mathrm{e}^{-x^2} = \frac{1}{2}\,\Gamma\left(1\right) = \frac{1}{2} \tag{B.12}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, x^2 \, \mathrm{e}^{-x^2} = \frac{1}{2}\,\sqrt{\pi} \approx 0,88622693\ldots \tag{B.13}$$

$$\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x \, x^3 \, \mathrm{e}^{-x^2} = \frac{1}{2}\,\Gamma\left(2\right) = \frac{1}{2} \tag{B.14}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, x^4 \, \mathrm{e}^{-x^2} = \frac{3}{4}\,\sqrt{\pi} \approx 1{,}3293404\ldots \tag{B.15}$$

$$\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x \, x^z \, \mathrm{e}^{-x^2} = \frac{1}{2}\,\Gamma\left(\frac{z+1}{2}\right)\,, \quad \Re z > -1 \tag{B.16}$$

$$\sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{-ax^2+bx} = \mathrm{e}^{b^2/4a} \tag{B.17}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_N \ \ \mathrm{F}\left(\sqrt{\sum_{i=1}^{N} x_i^2}\right) = \int_0^R \mathrm{F}\left(R'\right) C_N R'^{N-1}\,\mathrm{d}R'$$
$$\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_N^2} \ \leq R$$

$$\text{donde } C_N \equiv \frac{2\pi^{N/2}}{\Gamma\left(N/2\right)} \tag{B.18}$$

$$\int_{t'}^{t} \mathrm{d}t_{N-1} \int_{t'}^{t_{N-1}} \mathrm{d}t_{N-2} \ldots \int_{t'}^{t_1} \mathrm{d}t_0 \, \mathrm{F}\left(t_0\right) = \frac{1}{(N-1)!} \int_{t'}^{t} \mathrm{d}t'' \ \left(t-t''\right)^{N-1} \mathrm{F}\left(t''\right)$$
$$\text{donde } \mathrm{F}\left(\xi\right) \text{ es continua en } \left[t_0, t_1\right] \text{ y } t_0 \leq t \leq t_1 \tag{B.19}$$

$$\zeta\left(z,q\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\left(n+q\right)^z}\,, \qquad \Re z > 1 \ \left(\begin{array}{l}\text{Función} \quad \textit{Zeta} \\ \textit{de Riemann}\end{array}\right) \tag{B.20}$$

$$\zeta\left(z\right) = \zeta\left(z,1\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}\,, \qquad \Re z > 1 \tag{B.21}$$

$$\tag{B.22}$$

$$\zeta\left(2\right) = \frac{\pi^2}{6} \approx 1{,}6449\,, \quad \zeta\left(4\right) = \frac{\pi^4}{90} \approx 1{,}0823\,, \quad \zeta\left(6\right) = \frac{\pi^6}{945} \approx 1{,}0173 \tag{B.23}$$

$$\zeta\left(3\right) \approx 1{,}2021\,, \qquad \zeta\left(5\right) \approx 1{,}0369 \tag{B.24}$$

$$\tag{B.25}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{x^{\nu-1}}{\mathrm{e}^{\mu x}-1} = \frac{1}{\mu^\nu}\,\Gamma(\nu)\,\zeta(\nu)\ ; \qquad \Re\mu>0\,,\quad \Re\nu>1 \tag{B.26}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{x}{\mathrm{e}^{x}-1} = \frac{\pi^2}{6} \approx 1{,}6449 \tag{B.27}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{x^3}{\mathrm{e}^{x}-1} = \frac{\pi^4}{15} \approx 6{,}4939 \tag{B.28}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{x^{\nu-1}}{\mathrm{e}^{\mu x}+1} = \frac{1}{\mu^\nu}\left(1-2^{1-\nu}\right)\Gamma(\nu)\,\zeta(\nu)\ ; \quad \Re\mu>0\,,\ \Re\nu>0 \tag{B.29}$$

B.2. Funciones *Salto* $\Theta(x)$, *Signo* $\mathrm{sgn}(x)$ y *Valor Absoluto* $|x|$

Estas se definen de acuerdo a

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0\,, & \text{si} \quad x<0 \\ \frac{1}{2}\,, & \text{si} \quad x=0 \\ 1\,, & \text{si} \quad x>0 \end{cases}\,, \qquad \mathrm{sgn}(x) = \begin{cases} -1\,, & \text{si} \quad x<0 \\ 0\,, & \text{si} \quad x=0 \\ 1\,, & \text{si} \quad x>0 \end{cases}$$

$$|x| = \begin{cases} -x\,, & \text{si} \quad x<0 \\ 0\,, & \text{si} \quad x=0 \\ x\,, & \text{si} \quad x>0 \end{cases}$$

Note que

$$\begin{aligned} \Theta(x)+\Theta(-x) &= 1 \\ \mathrm{sgn}(x) &= \Theta(x)-\Theta(-x) = 2\Theta(x)-1 \\ \Theta(x) &= \frac{1+\mathrm{sgn}(x)}{2} \\ \frac{\mathrm{d}\,|x|}{\mathrm{d}x} &= \mathrm{sgn}(x) \end{aligned}$$

Representaciones Integrales útiles de $\Theta(x)$ y $\mathrm{sgn}(x)$ vienen dadas por

$$\Theta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i}\,\frac{\mathrm{e}^{ikx}}{k-i0^+}\,, \qquad \mathrm{sgn}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i}\,\frac{2k\,\mathrm{e}^{ikx}}{(k-i0^+)\,(k+i0^+)}$$

B.3. Delta de Dirac

1. Integración:

$$\int_{x_i}^{x_f} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \delta(x-a) = \operatorname{sgn}(x_f - x_i)\, \Theta(a - x_{min})\, \Theta(x_{max} - a)\, \mathrm{f}(a)$$

$$\text{con} \quad x_{\substack{min \\ max}} = \begin{matrix} min \\ max \end{matrix} \{x_i, x_f\} \text{ y como caso particular}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \delta(x-a) = \mathrm{f}(a)$$

$$\text{o } \textit{simbólicamente } \mathrm{f}(x)\, \delta(x-a) = \mathrm{f}(a)\, \delta(x-a)$$

En general, con $\vec{r} = (x_0, x_1, \ldots, x_{d-1})$ y $\vec{a} = (a_0, a_1, \ldots, a_{d-1})$ se tiene[1]

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x_0)\, \delta(x_1) \ldots \delta(x_{d-1}) \qquad \text{y} \qquad \int \mathrm{d}^d\vec{r}\, \mathrm{f}(\vec{r})\, \delta(\vec{r} - \vec{a}) = \mathrm{f}(\vec{a})$$

2. Derivación: Se realiza usando *Integración por Partes*:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \delta'(x-a) &= -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}'(x)\, \delta(x-a) = -\mathrm{f}'(a) \\
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \delta''(x-a) &= -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}'(x)\, \delta'(x-a) = \mathrm{f}''(a) \\
\vdots \qquad & \vdots \qquad\qquad \vdots \\
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \delta^{(n)}(x-a) &= (-1)^n\, \mathrm{f}^{(n)}(a)\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots
\end{aligned}$$

3. Expresiones equivalentes o relacionadas:

$$\delta(x) = \lim_{\sigma \to 0^+} \frac{\mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\ \sigma}\,, \qquad \delta(\omega) = \lim_{\Gamma \to 0^+} \frac{\Gamma/\pi}{\omega^2 + \Gamma^2}$$

[1] En las identidades que involucran la delta de Dirac se sobreentiende que *cobran sentido bajo el signo integral*. Por ejm...

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|} \quad \text{significa} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \delta(ax) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{f}(x)\, \frac{\delta(x)}{|a|} = \frac{\mathrm{f}(0)}{|a|}$$

Por ejm..., si interpretamos $\delta(x) = 2\delta(x)$ *literalmente* llegamos a una conclusión erronea:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, [2\delta(x)] \qquad \Longrightarrow \qquad \text{¡¡¡} \quad 1 = 2 \quad \text{!!!}$$

$$\nabla^2\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta\left(\vec{r}\right)\ , \qquad \frac{\mathrm{d}\Theta\left(x\right)}{\mathrm{d}x} = \delta\left(x\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\mathrm{sgn}\left(x\right)}{\mathrm{d}x} = 2\delta\left(x\right)\ , \qquad \frac{\mathrm{d}^2\left|x\right|}{\mathrm{d}x^2} = 2\delta\left(x\right)\ ,$$

4. Descomposición en términos de las raíces del argumento:

$$\delta\left(\mathrm{f}\left(x\right)\right) = \sum_i \frac{\delta\left(x - x_i\right)}{\left|\mathrm{f}'\left(x_i\right)\right|}\,; \qquad \mathrm{f}\left(x_i\right) = 0\,,\ \forall\ i$$

La suma ($\sum_i$) es sobre el conjunto de raices reales $\{x_i\}$ de la ecuación $\mathrm{f}\left(x\right) = 0$.

Por ejm...

$$\delta\left(3x\right) = \frac{\delta\left(x\right)}{3}\,; \qquad \delta\left(x^2 - a^2\right) = \frac{\delta\left(x-a\right) + \delta\left(x+a\right)}{2\left|a\right|}\,, \quad a \in \mathbf{R}$$

5. Tres (3) dimensiones:

$$\text{Coordenadas Cartesianas:} \qquad \delta\left(\vec{r}\right) = \delta\left(x\right)\delta\left(y\right)\delta\left(z\right)$$

$$\text{Coordenadas Esféricas:} \qquad \delta\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{r^2}\,\delta\left(r\right)\delta\left(\cos\theta\right)\delta\left(\phi\right)$$

$$\text{Coordenadas Cilíndricas:} \qquad \delta\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{\rho}\,\delta\left(\rho\right)\delta\left(\theta\right)\delta\left(z\right)$$

6. Integración con polos *cercanos* al eje real:

$$\int_a^b \mathrm{d}x\,\frac{\mathrm{f}\left(x\right)}{x \pm i0^+} = \begin{cases} \mathrm{P}\displaystyle\int_a^b \mathrm{d}x\,\frac{\mathrm{f}\left(x\right)}{x} \ \mp\ i\pi\mathrm{f}\left(0\right), & a < 0 < b \\ \displaystyle\int_a^b \mathrm{d}x\,\frac{\mathrm{f}\left(x\right)}{x} \qquad , & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

la cual se *resume* simbólicamente

$$\frac{1}{x \pm i0^+} = \mathrm{P}\frac{1}{x} \ \mp\ i\pi\delta\left(x\right)$$

Algunos ejemplos son:

a)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{x - \mathrm{i}0^+} &= \mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{x} + \mathrm{i}\pi = \lim_{\epsilon\to 0^+}\left(\int_{-\infty}^{-\epsilon} \frac{\mathrm{d}x}{x} + \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{x}\right) + \mathrm{i}\pi \\ &= \lim_{\epsilon\to 0^+}\left(\int_{\infty}^{\epsilon} \frac{\mathrm{d}x}{x} + \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{x}\right) + \mathrm{i}\pi = \boxed{\mathrm{i}\pi} \end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{\operatorname{sen}(kx)}{k-k_0-\mathrm{i}0^+} &= \mathrm{P}\!\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{\operatorname{sen}(kx)}{k-k_0} + \mathrm{i}\pi \operatorname{sen}(k_0 x) \\
&= \mathrm{P}\!\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{\operatorname{sen}(kx)\cos(k_0x)+\cos(kx)\operatorname{sen}(k_0x)}{k} + \mathrm{i}\pi \operatorname{sen}(k_0 x) \\
&= \cos(k_0x)\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{\operatorname{sen}(kx)}{k} + \mathrm{i}\pi \operatorname{sen}(k_0 x) \\
&= \cos(k_0x)\ \operatorname{sgn}(x)\overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{\operatorname{sen}(k)}{k}}^{\pi} + \mathrm{i}\pi \operatorname{sen}(k_0 x) \\
&= \boxed{\pi \operatorname{sgn}(x)\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0|x|}}
\end{aligned}$$

7. Representación Integral

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

y en general con $\vec{r} = (x_0, x_1, \ldots, x_{d-1})$

$$\delta(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^d\vec{k}}{(2\pi)^d}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Dada una función $\mathrm{f}:\ \mathbf{R^d} \to \mathbf{R}$:

$$\mathrm{f}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}^d_{\vec{r}'}\ \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)\mathrm{f}\left(\vec{r}'\right) = \int \mathrm{d}^d_{\vec{r}'}\left[\int \frac{\mathrm{d}^d\vec{k}}{(2\pi)^d}\ \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)}\right]\mathrm{f}\left(\vec{r}'\right)$$

Entonces

$$\mathrm{f}(\vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^d\vec{k}}{(2\pi)^d}\ \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\ \widetilde{\mathrm{f}}\left(\vec{k}\right) \quad\Longleftrightarrow\quad \widetilde{\mathrm{f}}\left(\vec{k}\right) = \int \mathrm{d}^d_{\vec{r}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\ \mathrm{f}(\vec{r})\ , \quad (\text{ Fourier })$$

Así mismo

$$\mathrm{f}_{\mathcal{L}}(s) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-st}\mathrm{f}(t) \quad\Longleftrightarrow\quad \mathrm{f}(t) = \int_{0^+-\mathrm{i}\infty}^{0^++\mathrm{i}\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\ \mathrm{e}^{st}\mathrm{f}_{\mathcal{L}}(s)\ , \quad (\text{ Laplace })$$

y usando ambas expresiones

$$\begin{aligned}
\mathrm{f}(t) &= \int_{0^+-\mathrm{i}\infty}^{0^++\mathrm{i}\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\ \mathrm{e}^{st}\mathrm{f}_{\mathcal{L}}(s) = \int_{0^+-\mathrm{i}\infty}^{0^++\mathrm{i}\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi \mathrm{i}}\ \mathrm{e}^{st}\int_0^{\infty} \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{-st'}\mathrm{f}(t') \\
&= \int_0^{\infty} \mathrm{d}t'\,\mathrm{f}(t')\int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\ \mathrm{e}^{s(t-t')}
\end{aligned}$$

Por tanto

$$\delta(t) = \int_{0^+-i\infty}^{0^++i\infty} \frac{\mathrm{d}s}{2\pi i}\, \mathrm{e}^{st}$$

Ejercicio B.1

Resuelva la ecuación diferencial $\mathrm{y}''(x) = 2\delta(x)$ donde $\mathrm{y}(x)$ cumple las condiciones $\mathrm{y}(0) = 0$ e $\mathrm{y}'(0^-) = -1$.

SOLUCIÓN: Integremos, ambos miembros de la ecuación, en un *entorno* de $x = 0$. Es decir

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\, \mathrm{y}''(x) = \lim_{\epsilon\to 0^+} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\, 2\delta(x) \implies \mathrm{y}'\left(0^+\right) - \mathrm{y}'\left(0^-\right) = 2 \implies \mathrm{y}'\left(0^+\right) = 1$$

La solución general que se anula en el origen es de la forma

$$\mathrm{y}(x) = \begin{cases} Ax & \text{si} \quad x \leq 0 \\ Bx & \text{si} \quad x \geq 0 \end{cases}, \qquad (\ A \text{ y } B \text{ son constantes independientes de } x\ )$$

Además, $\mathrm{y}'(0^-) = A = -1$ e $\mathrm{y}'(0^+) = B = 1$. Por lo tanto

$$\boxed{\mathrm{y}(x) = |x|}$$

■

Ejercicio B.2

Use el método de la *Función de Green* para resolver el problema del oscilador armónico simple (masa m y frecuencia ω_0) en presencia de una fuerza externa $\mathrm{F}(t)$:

$$\ddot{\mathrm{x}}(t) + \omega_0^2 \mathrm{x}(t) = \frac{\mathrm{F}(t)}{m}; \qquad \mathrm{x}\left(0^+\right) = x_0, \quad \dot{\mathrm{x}}\left(0^+\right) = v_0$$

SOLUCIÓN: Escribamos la solución en la forma

$$\mathrm{x}(t) = \frac{v_0}{\omega_0}\, \mathrm{sen}(\omega_0 t) + x_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{1}{m} \int_0^\infty \mathrm{d}t'\, \mathrm{F}(t')\, \mathrm{G}(t, t')$$

donde $\mathrm{G}(t, t')$ es la función de Green.

La expresión anterior para $\mathrm{x}(t)$ debe satisfacer la ecuación de movimiento y las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned}
\ddot{\mathrm{x}}(t)+\omega_0^2\mathrm{x}(t) &= \overbrace{\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}+\omega_0^2\right)\left[\frac{v_0}{\omega_0}\operatorname{sen}(\omega_0 t)+x_0\cos(\omega_0 t)\right]}^{=\,0} \\
&+ \\
&\frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\,\mathrm{F}(t')\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\omega_0^2\right)\mathrm{G}(t,t')=\frac{\mathrm{F}(t)}{m}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{x}\left(0^+\right) &= x_0+\frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\,\mathrm{F}(t')\,\mathrm{G}\left(0^+,t'\right)=x_0 \\
\dot{\mathrm{x}}\left(0^+\right) &= v_0+\frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\,\mathrm{F}(t')\left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=0^+}=v_0
\end{aligned}$$

Estas expresiones se satisfacen idénticamente si se escoge

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\omega_0^2\right)\mathrm{G}(t,t')=\delta(t-t')\;;\;\mathrm{G}\left(0^+,t'\right)=0\,,\quad \left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=0^+}=0\,,\quad \forall t'>0$$

$\mathrm{G}(t,t')$ es continua en $t=t'$ pero su derivada es discontinua:

$$\begin{aligned}
1 &= \lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon}\mathrm{d}t\,\delta(t-t')=\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon}\mathrm{d}t\,\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\omega_0^2\right)\mathrm{G}(t,t') \\
&= \left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=t'^+}-\left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=t'^-}\equiv\left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=t'^-}^{t=t'^+},\quad \forall t'>0
\end{aligned}$$

Ello significa que el problema puede replantearse, en forma equivalente, segun

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\omega_0^2\right)\mathrm{G}(t,t')=0\,,\quad t\neq t'\,; && \left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=t'^-}^{t=t'^+}=1\,,\quad \forall t'>0 \\
&\mathrm{G}\left(0^+,t'\right)=0\,, && \left.\frac{\partial\mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=0^+}=0\,,\quad \forall t'>0
\end{aligned}$$

Obviamente, cuando $t\neq t'$ la solución es una combinación lineal de soluciones linealmente independientes del oscilador armónico simple:

$$\mathrm{G}(t,t')=\begin{cases} A\operatorname{sen}(\omega_0[t-t'])+B\cos(\omega_0[t-t'])\,, & \text{si} \quad 0<t\leq t' \\ C\operatorname{sen}(\omega_0[t-t'])+D\cos(\omega_0[t-t'])\,, & \text{si} \quad t\geq t'>0 \end{cases}$$

A, B, C y D son constantes independientes de t. Puesto que $\mathrm{G}(t,t')$ y $\partial_t \mathrm{G}(t,t')$ se anulan en $t = 0^+$, $\forall t'$, se obtiene $A = B = 0$ lo cual significa $\mathrm{G}(t,t') = 0$ cuando $0 < t \leq t'$. Puesto que $\mathrm{G}(t,t')$ es continua en $t = t'$, $\forall t' > 0$; la forma de la solución es

$$\mathrm{G}(t,t') = \Theta(t-t')\, C \operatorname{sen}(\omega_0 [t-t'])$$

Además

$$1 = \left.\frac{\partial \mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=t'^+} - \overbrace{\left.\frac{\partial \mathrm{G}(t,t')}{\partial t}\right|_{t=t'^-}}^{=\,0} = C\omega_0 \implies C = \frac{1}{\omega_0}$$

y por tanto

$$\mathrm{G}(t,t') = \Theta(t-t')\, \frac{\operatorname{sen}(\omega_0 [t-t'])}{\omega_0}$$

La solución para $\mathrm{x}(t)$ se reduce a

$$\boxed{\mathrm{x}(t) = \frac{v_0}{\omega_0} \operatorname{sen}(\omega_0 t) + x_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{1}{m\omega_0} \int_0^t \mathrm{d}t'\, \mathrm{F}(t') \operatorname{sen}(\omega_0 [t-t'])}$$

Como *ejercicio adicional* verifiquemos explícitamente que la función de Green

$$\mathrm{G}(t) \equiv \mathrm{G}(t,0) = \Theta(t)\, \frac{\operatorname{sen}(\omega_0 t)}{\omega_0}$$

satisface *su* ecuación diferencial $\ddot{\mathrm{G}}(t) + \omega_0^2 \mathrm{G}(t) = \delta(t)$:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathrm{G}}(t) &= \delta(t)\, \frac{\operatorname{sen}(\omega_0 t)}{\omega_0} + \Theta(t)\, \frac{\cos(\omega_0 t)\,\omega_0}{\omega_0} = \Theta(t) \cos(\omega_0 t) \\
\ddot{\mathrm{G}}(t) &= \delta(t) \cos(\omega_0 t) + \Theta(t)\, [-\operatorname{sen}(\omega_0 t)]\, \omega_0 = \delta(t) - \Theta(t)\, \omega_0 \operatorname{sen}(\omega_0 t) \\
\omega_0^2 \mathrm{G}(t) &= \Theta(t)\, \omega_0 \operatorname{sen}(\omega_0 t)
\end{aligned}$$

tal que se cumple $\ddot{\mathrm{G}}(t) + \omega_0^2 \mathrm{G}(t) = \delta(t)$. Así mismo, note que

$$\begin{aligned}
\mathrm{G}\left(0^+\right) &= \Theta\left(0^+\right) \frac{\operatorname{sen}(\omega_0 0^+)}{\omega_0} = 0 \\
\dot{\mathrm{G}}\left(0^-\right) &= \Theta\left(0^-\right) \cos\left(\omega_0 0^-\right) = 0 \\
\dot{\mathrm{G}}\left(0^+\right) &= \Theta\left(0^+\right) \cos\left(\omega_0 0^+\right) = 1
\end{aligned}$$

■

Ejercicio B.3

Evalue la integral

$$S_1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen} x}{x}$$

SOLUCIÓN:

$$\begin{aligned} S_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \overbrace{\frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}k \, \cos(kx)}^{= \operatorname{sen}(x)/x} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \mathrm{d}k \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \\ &= \pi \int_{-1}^{1} \mathrm{d}k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{2\pi} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} = \pi \underbrace{\int_{-1}^{1} \mathrm{d}k \, \delta(k)}_{= 1} \end{aligned}$$

$$\boxed{S_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \pi} \tag{B.30}$$

■

Ejercicio B.4

Evalue la integral

$$S_2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2}$$

SOLUCIÓN: Definamos

$$\mathrm{S}_2(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2(\alpha x)}{x^2}, \qquad \mathrm{S}_2(0) = 0, \qquad \mathrm{S}_2(1) = S_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2}$$

Además

$$\begin{aligned} \mathrm{S}_2'(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{2 \operatorname{sen}(\alpha x) \cos(\alpha x) \, x}{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}(2\alpha x)}{x} \\ &= \operatorname{sgn}(\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \pi \, \frac{\mathrm{d}\,|\alpha|}{\mathrm{d}\alpha} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\left\{\mathrm{S}_2(\alpha) - \pi\,|\alpha|\right\}}{\mathrm{d}\alpha} = 0 \end{aligned}$$

donde hemos usado el resultado (B.30). Por tanto

$$\mathrm{S}_2(\alpha) - \pi\,|\alpha| = \text{constante}$$

La constante es nula para satisfacer $\mathrm{S}_2(0) = 0$. Entonces, $\mathrm{S}_2(\alpha) = \pi\,|\alpha|$ y, en consecuencia, $\mathrm{S}_2(1) = \pi$.

$$\boxed{S_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2} = \pi} \tag{B.31}$$

■

Ejercicio B.5

Evalue la integral

$$S_3 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^3 x}{x^3}$$

SOLUCIÓN: Definamos

$$\mathrm{S}_3(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^3(\alpha x)}{x^3}, \qquad \mathrm{S}_3(0) = 0, \qquad \mathrm{S}_3(1) = S_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^3 x}{x^3}$$

Además

$$\begin{aligned}
\mathrm{S}_3'(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{3\operatorname{sen}^2(\alpha x)\cos(\alpha x)\, x}{x^3} = \frac{3}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}(\alpha x)\operatorname{sen}(2\alpha x)}{x^2} \\
&= \frac{3}{4}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\cos(\alpha x) - \cos(3\alpha x)}{x^2} \\
&= \frac{3}{4}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{[1 - 2\operatorname{sen}^2(\alpha x/2)] - [1 - 2\operatorname{sen}^2(3\alpha x/2)]}{x^2} \\
&= \frac{3}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2(3\alpha x/2)}{x^2} - \frac{3}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2(\alpha x/2)}{x^2} \\
&= \frac{9}{4}\,|\alpha|\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2} - \frac{3}{4}\,|\alpha|\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2} = \frac{3}{2}\,|\alpha|\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2} \\
&= \frac{3}{4}\,\pi\,\frac{\mathrm{d}\,(\alpha\,|\alpha|)}{\mathrm{d}\alpha} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\left\{\mathrm{S}_3(\alpha) - \frac{3}{4}\,\pi\alpha\,|\alpha|\right\} = 0
\end{aligned}$$

donde hemos usado el resultado (B.31). Por tanto

$$\mathrm{S}_3(\alpha) - \frac{3}{4}\,\pi\alpha\,|\alpha| = \text{constante}$$

La constante es nula para satisfacer $\mathrm{S}_3(0) = 0$. Entonces, $\mathrm{S}_3(\alpha) = 3\pi\alpha\,|\alpha|/4$ y, en consecuencia, $\mathrm{S}_3(1) = 3\pi/4$.

$$\boxed{S_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{\operatorname{sen}^3 x}{x^3} = \frac{3}{4}\,\pi} \tag{B.32}$$

■

Ejercicio B.6

Evalue la transformada de Fourier de la función $\mathrm{F}_{>}(t) \equiv \Theta(t)\,\mathrm{F}(t)$ y las integrales

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\ \mathrm{sen}\,x\,, \qquad \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r}$$

<u>SOLUCIÓN</u>:

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathrm{F}}_{>}(\omega) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\Theta(t)\,\mathrm{F}(t) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\ \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega' t}}{\omega' - i0^+}}^{\Theta(\omega)}\ \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega''}{2\pi}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega'' t}\ \widetilde{\mathrm{F}}(\omega'')}^{\mathrm{F}(t)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'\mathrm{d}\omega''}{2\pi\mathrm{i}}\,\frac{\widetilde{\mathrm{F}}(\omega'')}{\omega' - i0^+}\ \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}t}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega+\omega'-\omega'')t}}^{\delta(\omega+\omega'-\omega'')} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega''}{2\pi\mathrm{i}}\,\frac{\widetilde{\mathrm{F}}(\omega'')}{\omega'' - \omega - i0^+}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\widetilde{\mathrm{F}}_{>}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\Theta(t)\,\mathrm{F}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi\mathrm{i}}\,\frac{\widetilde{\mathrm{F}}(\omega')}{\omega' - \omega - i0^+}} \tag{B.33}$$

La transformada de Fourier de $\mathrm{sen}\,x$ viene dada por

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{sen}\,x &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}}{2\mathrm{i}} \\
&= -\pi\mathrm{i}\left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}x(k+1)} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}x(k-1)}\right) \\
&= \pi\mathrm{i}\left[\delta(k-1) - \delta(k+1)\right]
\end{aligned}$$

Por tanto

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \mathrm{d}x\ \mathrm{sen}\,x &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi\mathrm{i}}\,\frac{\pi\mathrm{i}\left[\delta(k-1) - \delta(k+1)\right]}{k - i0^+} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{1 - i0^+} - \frac{1}{-1 - i0^+}\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{1 - i0^+} + \frac{1}{1 + i0^+}\right) = \frac{1}{2} \times 2\Re\left(\frac{1}{1 - i0^+}\right) = 1
\end{aligned}$$

Otra forma equivalente es

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{1 - i0^+} - \frac{1}{-1 - i0^+}\right) = \frac{1}{2}\left[\mathrm{P}\!\left(\frac{1}{1}\right) + i\pi\delta(1) - \mathrm{P}\!\left(\frac{1}{-1}\right) - i\pi\delta(-1)\right] = 1$$

$$\boxed{\begin{array}{c}\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x\ \mathrm{sen}\, x = 1 \\ \\ (\text{ ¿ Comentarios ? })\end{array}} \tag{B.34}$$

En forma análoga

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}^3_{\vec{r}}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r} &= \int_0^\infty 4\pi r^2 \overbrace{\left(\frac{1}{4\pi}\int_{\Omega_{\vec{r}}} \mathrm{d}\Omega_{\vec{r}}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)}^{sen(kr)/(kr)} \frac{1}{r}\,\mathrm{d}r = \frac{4\pi}{k}\int_0^\infty \mathrm{d}r\ \mathrm{sgn}\,(k)\,\mathrm{sen}\,(|k|\,r) \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\int_0^\infty \mathrm{d}r\ \mathrm{sen}\, r\end{aligned}$$

$$\boxed{\int \mathrm{d}^3_{\vec{r}}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r} = \frac{4\pi}{k^2}\,, \qquad k \equiv \left|\vec{k}\right|} \tag{B.35}$$

■

B.4. Expansiones Asintóticas

En esta sección nos limitamos a sugerir algunos tópicos (siguiendo la presentación del libro de texto de A. Erdélyi[2]):

- `Series Asintóticas`.
- `Integración Asintótica`:
  - Integración por partes.
  - Método de Laplace.
  - El método del descenso mas rápido.
  - Integrales de Fourier.
  - El método de la fase estacionaria.
- `Ecuaciones Diferenciales con un parâmetro` ***`muy grande`***.

[2] Asymptotic Expansions, A. Erdélyi, Dover Publications, Inc., New York 1956.

Ver además, Curso en Métodos de la Física Teórica, P. L. Torres 2000. Puede ser adquirido en la Dirección de la Escuela de Física (`dirfis@fisica.ciens.ucv.ve`). Telf. (Phone): (+058) 212 6051187, 6051102, 6051188.

Apéndice C

Probabilidades y Simulaciones Simples

C.1. Probabilidades

En esta sección suponemos que el lector está familiarizado con la teoría elemental de probabilidades en la forma presentada en el curso de Física Estadística del pregrado. El propósito de la misma es mostrar algunos *problemas tipos* que permiten ejemplificar algunas herramientas matemáticas adicionales.

Ejercicio C.1

Los elementos del conjunto de números reales $\{x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}\}$ se han generado con una distribución uniforme de probabilidades en el intervalo $[-1/2, 1/2)$.

1. Evalue la probabilidad de que la suma $\sum_{n=0}^{N-1} x_n$ sea menor que un valor dado s.
2. Evalue la probabilidad de que la suma (mencionada en el aparte anterior) sea menor que 3 al generar 10 números.

SOLUCIÓN:

1. Sea $\mathrm{P}(s)$ la solución al problema planteado. Esta viene dada por

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}(s) &= \prod_{n=0}^{N-1} \int_{-1/2}^{1/2} \mathrm{d}x_n = \prod_{n=0}^{N-1} \int_{-1/2}^{1/2} \mathrm{d}x_n \, \Theta\left(s - \sum_{n=0}^{N-1} x_n\right) \\
&\quad \textstyle\sum_{n=0}^{N-1} x_n < s \\
&= \prod_{n=0}^{N-1} \int_{-1/2}^{1/2} \mathrm{d}x_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{ik\left(s - \sum_{n=0}^{N-1} x_n\right)}}{k - i0^+}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{iks}}{k - i0^+} \left(\int_{-1/2}^{1/2} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-ikx} \right)^N \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{iks}}{k - i0^+} \left(\frac{\mathrm{e}^{-ik/2} - \mathrm{e}^{ik/2}}{-ik} \right)^N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{iks}}{k - i0^+} \left[\frac{\operatorname{sen}(k/2)}{k/2} \right]^N \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{2iks}}{k - i0^+} \left(\frac{\operatorname{sen} k}{k} \right)^N = \frac{1}{2} + \mathrm{P}\!\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi i} \frac{\mathrm{e}^{2iks}}{k} \left(\frac{\operatorname{sen} k}{k} \right)^N
\end{aligned}
$$

donde hemos usado resultados de la sección B.3. El símbolo P antes del signo integral significa *Parte Principal de la Integral*[1]

$$
\boxed{
\begin{aligned}
&\mathrm{P}(s) = 0\,, \qquad \left(\text{si} \quad s < -\frac{N}{2} \quad \text{o} \quad s \geq \frac{N}{2} \right) \\
&\mathrm{P}(s) = \frac{1}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \frac{\operatorname{sen}(2ks)}{k} \left(\frac{\operatorname{sen} k}{k} \right)^N \\
&\qquad = 1 - \frac{1}{2^N\, N!} \sum_{\substack{\ell \\ 0 \leq \ell < N/2 - s}} (-1)^\ell \binom{N}{\ell} (N - 2s - 2\ell)^N \\
&\qquad\qquad \left(\text{si} \quad -\frac{N}{2} \leq s < \frac{N}{2} \right)
\end{aligned}
}
\tag{C.1}
$$

La serie finita (para el caso $-N/2 \leq s < N/2$) es obtenida en tablas de integrales[2].

[1]Por ejm. . . :

$$
\mathrm{P}\!\int_{-5}^{2} \mathrm{d}x \, \frac{1}{x-1} \quad \text{significa} \quad \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\int_{-5}^{1-\epsilon} \mathrm{d}x \, \frac{1}{x-1} + \int_{1+\epsilon}^{2} \mathrm{d}x \, \frac{1}{x-1} \right)
$$

En particular, por ejm. . .

$$
\mathrm{P}\!\int_{-5}^{2} \mathrm{d}x \, \frac{1}{x-1} = \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\ln \left| \frac{-\epsilon}{-6} \right| + \ln \left| \frac{1}{\epsilon} \right| \right) = -\ln 6
$$

mientras que

$$
\int_{-5}^{2} \mathrm{d}x \, \frac{1}{x-1} \qquad \text{diverge } \textit{logarítmicamente}.
$$

[2]Ver, por ejm. . . , **3.836.4** en Table of Integrals, Series and Products, I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik, Academic Press 1965.

2.

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}\left(-1\right)\big|_{N=10} &= 1-\frac{1}{2^{10}\,10!}\sum_{\substack{\ell\\ 0\leq\ell<10/2-(-1)}}\left(-1\right)^{\ell}\binom{10}{\ell}\left(10-2\times\left(-1\right)-2\ell\right)^{10}\\
&= 1-\sum_{\ell=0}^{5}\left(-1\right)^{\ell}\frac{\left(6-\ell\right)^{10}}{\ell!\,\left(10-\ell\right)!}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\mathrm{P}\left(-1\right)\big|_{N=10}\approx 0{,}1389015651} \tag{C.2}$$

■

Ejercicio C.2

Los elementos del conjunto de números reales $\{s_0, s_1, \ldots, s_{N-1}\}$ son generados con la distribución de probabilidades $\mathrm{P}\left(s\right)$. $s\in\mathbf{R}$.

- Evalue la distribución de probabilidades $\mathcal{P}\left(x\right)$ de la suma $x=s_0+s_1+\cdots+s_{N-1}$.
- Construya una *aproximación Gaussiana* para $\mathcal{P}\left(x\right)$.

<u>SOLUCIÓN</u>:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}\left(x\right) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\int_{-\infty}^{x}\mathrm{d}x'\,\mathcal{P}\left(x'\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\prod_{\substack{n=0\\ \sum_{n=0}^{N-1}s_n<x}}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s_n\,\mathrm{P}\left(s_n\right)\right]\\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\prod_{n=0}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s_n\,\mathrm{P}\left(s_n\right)\Theta\left(x-\sum_{n=0}^{N-1}s_n\right)\\
&= \prod_{n=0}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s_n\,\mathrm{P}\left(s_n\right)\,\frac{\mathrm{d}\Theta\left(x-\sum_{n=0}^{N-1}s_n\right)}{\mathrm{d}x}\\
&= \prod_{n=0}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s_n\,\mathrm{P}\left(s_n\right)\,\delta\left(x-\sum_{n=0}^{N-1}s_n\right)\\
&= \prod_{n=0}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s_n\,\mathrm{P}\left(s_n\right)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\mathrm{e}^{ik\left(x-\sum_{n=0}^{N-1}s_n\right)}\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\mathrm{e}^{ikx}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s\;\mathrm{e}^{-iks}\mathrm{P}\left(s\right)\right]^{N}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\mathcal{P}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\, \mathrm{e}^{ikx}\, \widetilde{\mathrm{P}}^N(k)\ , \qquad \widetilde{\mathrm{P}}(k) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}s\ \mathrm{e}^{-iks}\, \mathrm{P}(s)} \tag{C.3}$$

Reescribamos $\mathcal{P}(x)$ en la forma

$$\mathcal{P}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\, \mathrm{e}^{ikx + N \ln \widetilde{\mathrm{P}}(k)}$$

y estudiemos el argumento de la exponencial hasta orden k^2:

$$\begin{aligned}
ikx + N \ln \widetilde{\mathrm{P}}(k) &= ikx + N \ln \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}s\ \mathrm{e}^{-iks}\, \mathrm{P}(s) \\
&\approx ikx + N \ln \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}s\ \left(1 - iks - \frac{1}{2}\, s^2 k^2\right) \mathrm{P}(s) \\
&= ikx + N \ln \left(1 - ik \langle s \rangle - \frac{1}{2}\, k^2 \left\langle s^2 \right\rangle\right) \\
&\approx ikx \\
&\quad + \\
&\quad N \left[\left(-i \langle s \rangle k - \frac{1}{2} \left\langle s^2 \right\rangle k^2\right) - \frac{1}{2} \left(-i \langle s \rangle k - \frac{1}{2} \left\langle s^2 \right\rangle k^2\right)^2\right] \\
&\approx ikx + N \left(-i \langle s \rangle k - \frac{1}{2} \left\langle s^2 \right\rangle k^2 + \frac{1}{2} \langle s \rangle^2 k^2\right) \\
&= i\left(x - N \langle s \rangle\right) k - \frac{1}{2} N \left(\left\langle s^2 \right\rangle - \langle s \rangle^2\right) k^2
\end{aligned}$$

Con $\sigma \equiv \sqrt{N}\ \Delta s$ y $\Delta s \equiv \sqrt{\left\langle (s - \langle s \rangle)^2 \right\rangle} = \sqrt{\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2}$ se obtiene:

$$\begin{aligned}
ikx + N \ln \widetilde{\mathrm{P}}(k) &\approx i\left(x - N \langle s \rangle\right) k - \frac{1}{2}\, \sigma^2 k^2 = -\frac{1}{2}\, \sigma^2 \left(k^2 - 2i\, \frac{x - N \langle s \rangle}{\sigma^2}\, k\right) \\
&= -\frac{1}{2}\, \sigma^2 \left[k^2 - 2i\, \frac{x - N \langle s \rangle}{\sigma^2}\, k - \frac{\left(x - N \langle s \rangle\right)^2}{\sigma^4}\right] \\
&\quad - \\
&\quad \frac{\left(x - N \langle s \rangle\right)^2}{2\sigma^2} \\
&= -\frac{1}{2}\, \sigma^2 \left(k - \frac{x - N \langle s \rangle}{\sigma^2}\, i\right)^2 - \frac{\left(x - N \langle s \rangle\right)^2}{2\sigma^2}
\end{aligned}$$

En consecuencia

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(x) &\propto \mathrm{e}^{-(x-N\langle s\rangle)^2/2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\ \mathrm{e}^{-\sigma^2\left[k-i(x-N\langle s\rangle)/\sigma^2\right]^2/2} \\
&= \mathrm{e}^{-(x-N\langle s\rangle)^2/2\sigma^2} \int_{-\infty-i(x-N\langle s\rangle)/\sigma^2}^{\infty-i(x-N\langle s\rangle)/\sigma^2} \mathrm{d}k\ \mathrm{e}^{-\sigma^2k^2/2} \\
&= \mathrm{e}^{-(x-N\langle s\rangle)^2/2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\ \mathrm{e}^{-\sigma^2k^2/2} \propto \mathrm{e}^{-(x-N\langle s\rangle)^2/2\sigma^2}
\end{aligned}$$

Puesto que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-(x-N\langle s\rangle)^2/2\sigma^2} = \sqrt{2\pi}\ \sigma$$

se obtiene entonces la *Aproximación Gaussiana*

Aproximación Gaussiana

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(x) &= \frac{\mathrm{e}^{-(x-N\langle s\rangle)^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\ \sigma} \\
\sigma &= \sqrt{N}\ \Delta s
\end{aligned} \tag{C.4}$$

Note que la validez de esta aproximación requiere $N \gg 1$ y/o una *variación suave de* $\mathrm{P}(s)$ que permita la propiedad $\Delta s \gtrsim 0$. En particular, es necesaria la existencia de *momentos* $\langle s^n\rangle$ de la distribución $\mathrm{P}(s)$. En realidad, estas condiciones no se cumplen necesariamente para un $\mathrm{P}(s)$ dado como puede verse en el `Ejercicio` C.3.

Usualmente se considera que la aparición de la aproximación Gaussiana en diversas disciplinas se debe a que esta puede construirse, salvo excepciones notables, en forma independiente de la estructura de la distribución de probabilidad individual subyacente. ■

Ejercicio C.3

Use el resultado C.3 para evaluar $\mathcal{P}(x)$ cuando

$$\mathrm{P}(s) = \frac{\Gamma/\pi}{(s-s_0)^2+\Gamma^2}\,, \qquad \Gamma > 0$$

SOLUCIÓN:

$$\widetilde{\mathrm{P}}\,(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}s\ \mathrm{e}^{-iks}\,\frac{\Gamma/\pi}{(s-s_0)^2+\Gamma^2} = \mathrm{e}^{-iks_0}\,\frac{\Gamma}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s\,\frac{\mathrm{e}^{-iks}}{(s-i\Gamma)\,(s+i\Gamma)}$$

La integración puede *completarse* en el plano complejo

$$\widetilde{\mathrm{P}}\,(k) = \mathrm{e}^{-iks_0}\,\frac{\Gamma}{\pi}\left[\Theta\,(-k)\,(2\pi i)\,\frac{\mathrm{e}^{-ik(i\Gamma)}}{i\Gamma+i\Gamma} + \Theta\,(k)\,(-2\pi i)\,\frac{\mathrm{e}^{-ik(-i\Gamma)}}{-i\Gamma-i\Gamma}\right] = \mathrm{e}^{-iks_0-|k|\Gamma}$$

En consecuencia

$$\mathcal{P}\,(x) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\mathrm{e}^{ik(x-Ns_0)-|k|N\Gamma}$$

El resultado final es obvio puesto que las transformadas de Fourier de $\mathcal{P}\,(x)$ y $\mathrm{P}\,(s)$ son *similares*:

$$\boxed{\mathcal{P}\,(x) = \frac{N\Gamma/\pi}{(x-Ns_0)^2+(N\Gamma)^2}} \tag{C.5}$$

■

Ejercicio C.4

En cierto experimento, la probabilidad P_n ($n = 0, 1, 2, \ldots$) de que se observen n eventos independientes satisface la relación de recurrencia

$$(n+1)\,\mathrm{P}_{n+1} = \lambda P_n\,, \qquad n \geq 0\,, \quad \lambda \geq 0 \tag{C.6}$$

Determine P_n, $\forall n \geq 0$.

SOLUCIÓN: Introduzcamos la función generatriz $\Psi\,(z)$

$$\Psi\,(z) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n z^n\,, \qquad z \in \mathbf{C}\,, \qquad |z| < 1$$

donde

$$P_n = \frac{1}{n!}\,\frac{\mathrm{d}^n\Psi\,(z)}{\mathrm{d}z^n}\bigg|_{z=0}$$

Multipliquemos ambos miembros de la relación de recurrencia por el factor z^n y sumemos $\forall\ n \geq 0$:

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)\,\mathrm{P}_{n+1}\,z^n = \lambda\sum_{n=0}^{\infty}P_n\,z^n \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_{n=1}^{\infty}n\mathrm{P}_n\,z^{n-1} = \lambda\sum_{n=0}^{\infty}P_n\,z^n$$

la cual equivale a

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{P}_n\, z^n = \lambda\sum_{n=0}^{\infty}P_n\, z^n$$

Por tanto, $\Psi(z)$ satisface

$$\frac{\mathrm{d}\Psi(z)}{\mathrm{d}z} = \lambda\Psi(z) \quad \text{la cual conduce a} \quad \Psi(z) = A\,\mathrm{e}^{\lambda z}\,, \qquad A = \text{constante}$$

Puesto que $\lim_{z\to 1^-}\Psi(z) = \sum_{n=0}^{\infty}P_n = 1$ se concluye que $A = \mathrm{e}^{-\lambda}$. Por tanto

$$\Psi(z) = \mathrm{e}^{-\lambda}\,\mathrm{e}^{\lambda z} = \mathrm{e}^{-\lambda}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\,z^n$$

y en consecuencia

$$\boxed{P_n = \frac{\mathrm{e}^{-\lambda}\lambda^n}{n!}\,, \qquad n = 0,1,2,\ldots\,, \quad \lambda \geq 0} \tag{C.7}$$

Esta es la conocida *distribución de Poisson*. ■

Ejercicio C.5

Suponga que se lanzan N_d dados (de 6 caras) simultaneamente donde $N_d \geq 1$. Evalue la probabilidad $\mathrm{P}_{N_d}(S)$ de obtener un valor dado S de la *" suma de las caras "*: $S = \sum_{n=0}^{N_d-1} d_n$ donde $d_n = 1,2,\ldots,6$ es el valor obtenido con el dado n–ésimo. Use el resultado obtenido para evaluar $\mathrm{P}_{N_d}(S)$ cuando $N_d = 1,2,3$.

SOLUCIÓN: Trabajaremos con la suposición *razonable* de que la probabilidad de obtener cualquiera de las caras de un dado es 1/6. Al realizar cada lanzamiento la probabilidad de obtener *cualquiera* de las 6^{N_d} posibles configuraciones (*¡ los dados son distinguibles !*) es

$$\overbrace{\frac{1}{6}\times\frac{1}{6}\times\frac{1}{6}\cdots\frac{1}{6}}^{N_d\ veces} = \frac{1}{6^{N_d}}$$

Por tanto[3]

$$\mathrm{P}_{N_d}(S) = \sum_{\substack{\{d_n\}\\ \sum_{n=0}^{N_d-1} d_n = S}}\frac{1}{6^{N_d}} = \frac{1}{6^{N_d}}\sum_{\{d_n\}}\delta_{\left(S-\sum_{n=0}^{N_d-1} d_n\right),0}$$

[3]Cada lanzamiento es *independiente* de cualquier otro lanzamiento.

Esta se lee como *" la suma sobre todas las configuraciones $\{d_n\}$, tales que la suma de las caras de los dados lanzados es exactamente S, de la probabilidad 6^{-N_d} de obtener una configuración dada "*. Obviamente, $\mathrm{P}_{N_d}(S) = 0$ si $S < N_d$ o $S > 6N_d$ de manera tal que solo es necesario evaluar $\mathrm{P}_{N_d}(S)$ cuando $N_d \leq S \leq 6N_d$.

Para realizar explícitamente la suma es conveniente usar la identidad (una integración en el plano complejo)

$$\delta_{n0} \equiv \oint_{|z|=1^-} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}} \frac{1}{z^{n+1}} \tag{C.8}$$

$\mathrm{P}_{N_d}(S)$ se reduce a

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}_{N_d}(S) &= \frac{1}{6^{N_d}} \sum_{\{d_n\}} \oint_{|z|=1^-} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}} \frac{1}{z^{\left(S-\sum_{n=0}^{N_d-1} d_n\right)+1}} \\
&= \frac{1}{6^{N_d}} \oint_{|z|=1^-} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}} \frac{1}{z^{S+1}} \left(\sum_{d=1}^{6} z^d\right)^{N_d} \\
&= \frac{1}{6^{N_d}} \oint_{|z|=1^-} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}} \frac{1}{z^{S+1}} \left[\frac{z\left(z^6-1\right)}{z-1}\right]^{N_d} \\
&= \frac{1}{6^{N_d}} \oint_{|z|=1^-} \frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}} \frac{1}{z^{S-N_d+1}} \left(1-z^6\right)^{N_d} (1-z)^{-N_d}
\end{aligned} \tag{C.9}$$

Al realizar la integración, mediante el uso del *Teorema de los Residuos*, es obvio que la única contribución a la integral proviene del coeficiente de z^{S-N_d} en el producto $\left(1-z^6\right)^{N_d}(1-z)^{-N_d}$.

$(1-z)^{-N_d}$ puede desarrollarse en serie de potencias de z en la forma siguiente:

$$(1-z)^{-N_d} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma\left(-N_d+1\right)}{n!\,\Gamma\left(-N_d-n+1\right)} (-z)^n$$

donde $\Gamma(z)$ es la *función Gamma* ($z \in \mathbf{C}$). Usando repetidamente la identidad $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ obtendremos:

$$\begin{aligned}
(1-z)^{-N_d} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-N_d\right)\left(-N_d-1\right)\left(-N_d-2\right)\ldots\left(-N_d-n+1\right)}{n!} (-z)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N_d\left(N_d+1\right)\left(N_d+2\right)\ldots\left(N_d+n-1\right)}{n!} z^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(N_d+n-1\right)!}{n!\left(N_d-1\right)!} z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{N_d+n-1}{N_d-1} z^n
\end{aligned}$$

donde

$$\binom{N}{n} \equiv \begin{cases} \dfrac{N!}{n!\,(N-n)!}\,, & \text{si} \quad 0 \leq n \leq N \\ 0 \qquad\qquad\quad , & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad ; \qquad n, N \in \mathbf{Z}$$

Con estos resultados se obtiene

$$\begin{aligned} \left(1-z^6\right)^{N_d}(1-z)^{-N_d} &= \sum_{n=0}^{\infty}\binom{N_d}{n}\left(-z^6\right)^n \sum_{n'=0}^{\infty}\binom{N_d+n'-1}{N_d-1} z^{n'} \\ &= \sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{N_d+n'-1}{N_d-1} z^{n'+6n} \end{aligned}$$

Al reemplazar este resultado en la expresión (C.9) se obtiene

$$\begin{aligned} \mathrm{P}_{N_d}(S) &= \frac{1}{6^{N_d}}\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{N_d+n'-1}{N_d-1}\oint_{|z|=1^-}\frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\,\frac{1}{z^{S-N_d-n'-6n+1}} \\ &= \frac{1}{6^{N_d}}\sum_{n'=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{N_d+n'-1}{N_d-1}\delta_{n',S-N_d-6n} \\ &= \frac{1}{6^{N_d}}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{S-6n-1}{N_d-1}\sum_{n'=0}^{\infty}\delta_{n',S-N_d-6n} \\ &= \frac{1}{6^{N_d}}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{S-6n-1}{N_d-1} \end{aligned}$$

$$\text{donde } N_{máx} \equiv \text{mín}\left\{N_d, \left\lfloor\frac{S-N_d}{6}\right\rfloor\right\}$$

En realidad, cuando $N_d \leq S \leq 6N_d$ se cumple que $N_{máx} = \lfloor (S-N_d)/6 \rfloor < N_d$. Por tanto

$$\boxed{\begin{aligned} &\mathrm{P}_{N_d}(S) = \frac{1}{6^{N_d}}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{S-6n-1}{N_d-1} \\ &\text{si} \quad N_d \leq S \leq 6N_d \quad \text{o } 0 \text{ (} \textit{cero} \text{) en cualquier otro caso.} \\ &\qquad\qquad N_{máx} = \left\lfloor\frac{S-N_d}{6}\right\rfloor < N_d \end{aligned}} \tag{C.10}$$

Se puede demostrar que la suma en (C.10) se anula cuando se reemplaza $N_{máx}$ por N_d (lo cual ocurre cuando $S > 6N_d$). En efecto, note que

$$\binom{S-6n-1}{N_d-1} = \binom{S-6n}{N_d} - \binom{S-6n-1}{N_d}$$

y la suma en (C.10) se reduce a

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{N_d}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{S-6n-1}{N_d-1} &= \sum_{n=0}^{N_d}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{S-6n}{N_d} \\ &- \\ &\sum_{n=0}^{N_d}(-1)^n\binom{N_d}{n}\binom{S-6n-1}{N_d} = 0\end{aligned}$$

Las dos sumas en el segundo miembro son independientes de S e iguales a 6^{N_d} en virtud de la identidad[4]

$$\sum_k \binom{r}{k}\binom{s-kt}{r}(-1)^k = t^r\,, \qquad r \text{ entero} \geq 0$$

<u>$\mathrm{P}_1(S)$</u>: En este caso la evaluación se reduce al caso $1 \leq S \leq 6$. Por tanto, $N_{máx} = \lfloor (S-1)/6 \rfloor = 0$:

$$\mathrm{P}_1(S) = \frac{1}{6^1}\,(-1)^0\binom{1}{0}\binom{S-6\times 0-1}{1-1}$$

$$\boxed{\begin{array}{c}\mathrm{P}_1(S)|_{1\leq S\leq 6} = \dfrac{1}{6} \\ 0 \text{ en cualquier otro caso}\end{array}} \tag{C.11}$$

<u>$\mathrm{P}_2(S)$</u>: En este caso la evaluación se reduce al caso $2 \leq S \leq 12$ y

$$N_{máx} = \left\lfloor \frac{S-2}{6} \right\rfloor = \begin{cases} 0\,, & \text{si} \quad 2 \leq S \leq 7 \\ 1\,, & \text{si} \quad 8 \leq S \leq 12 \end{cases}$$

[4]Ver Capítulo 1 de Algoritmos Fundamentales, Vol. I, D. E. Knuth, editorial Reverté S. A. 1986.

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}_2(S) &= \frac{1}{6^2}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\binom{2}{n}\binom{S-6n-1}{2-1} \\
&= \frac{1}{36}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\binom{2}{n}(S-6n-1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}_2(S)|_{2\leq S\leq 7} &= \frac{S-1}{36} \\
\mathrm{P}_2(S)|_{8\leq S\leq 12} &= \frac{1}{36}\left[S-1-2(S-7)\right] = \frac{13-S}{36}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\begin{array}{c}\mathrm{P}_2(S)|_{2\leq S\leq 12} = \dfrac{1}{6} - \dfrac{|S-7|}{36} \\ \text{0 en cualquier otro caso}\end{array}} \tag{C.12}$$

<u>$\mathrm{P}_3(S)$</u>: En este caso la evaluación se reduce al caso $3 \leq S \leq 18$ y

$$N_{máx} = \left\lfloor \frac{S-3}{6} \right\rfloor = \begin{cases} 0\,, & \text{si} \quad 3 \leq S \leq 8 \\ 1\,, & \text{si} \quad 9 \leq S \leq 14 \\ 2\,, & \text{si} \quad 15 \leq S \leq 18 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}_3(S) &= \frac{1}{6^3}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\binom{3}{n}\binom{S-6n-1}{3-1} \\
&= \frac{1}{216}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\binom{3}{n}\frac{(S-6n-1)(S-6n-2)}{2} \\
&= \frac{1}{72}\sum_{n=0}^{N_{máx}}(-1)^n\,\frac{(S-6n-1)(S-6n-2)}{n!\,(3-n)!}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}_3(S)|_{3\leq S\leq 8} &= \frac{(S-1)(S-2)}{432} \\
\mathrm{P}_3(S)|_{9\leq S\leq 14} &= \frac{1}{72}\left[\frac{(S-1)(S-2)}{6} - \frac{(S-7)(S-8)}{2}\right] \\
\mathrm{P}_3(S)|_{15\leq S\leq 18} &= \frac{1}{72}\left[\frac{(S-1)(S-2)}{6} - \frac{(S-7)(S-8)}{2}\right.
\end{aligned} \tag{C.13}$$

$$+ \frac{(S-13)\,(S-14)}{2}\Bigg]$$

(0 en cualquier otro caso)

■

Ejercicio C.6

El lanzador L decide *determinar* la distribución[5] de probabilidades de cierto bateador B o, en otras palabras, cuan eficiente es B al batear una pelota con rapidez v. Para ello diseña un experimento que consiste en efectuar N_L lanzamientos, con rapidez v, al bateador B. Sin embargo, por razones obvias, la pelota es lanzada en el i–ésimo lanzamiento con rapidez v_i (no necesariamente igual a v) determinada por la probabilidad $P^{(\mathtt{L})}_{v-v_i}$. $P^{(\mathtt{B})}_{v'}$ es la probabilidad de que B batee la pelota que recibe con rapidez v'. v o/y v' son *valores discretos* que pertenececen a un conjunto específico de valores escogido por el lanzador L al diseñar su experimento[6].

Obviamente se cumple

$$\sum_v P^{(\mathtt{B})}_v = 1\,, \qquad \sum_v P^{(\mathtt{L})}_v = 1$$

1. Evalue la número medio $\langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}}$ de pelotas *" bateadas "* promediadas con la probabilidad de batear una pelota que es recibida con cierta rapidez por el bateador B.
2. Evalue la número medio $\Big\langle\langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}}\Big\rangle_{\mathtt{L}}$ de pelotas *" bateadas "* promediadas, además, con la probabilidad que caracteriza al lanzador L.
3. Basándose en los resultados obtenidos: ¿ Cual es la probabilidad (de que B batee una pelota que L cree que aquel recibe con rapidez v) $\mathcal{P}^{(\mathtt{B})}_v$ inferida por el lanzador L ?. Discuta algunos casos límites.

   Note que $\mathcal{P}^{(B)}_v$ puede considerase como " la medida " realizada en el experimento propuesto por L.

[5]Note que usamos *probabilidad* para caracterizar el caso discreto mientras *distribución de probabilidades* caracteriza el caso continuo.

[6]Note que $\vec{v}$ y $\vec{v}\,'$ tienen la misma dirección y el mismo sentido tal que, de acuerdo a la Figura C.1, la rapidez ($v \equiv |\vec{v}|$) y la componente x de la velocidad coinciden y son positivas.

Figura C.1: El lanzador L realiza un experimento para determinar la respuesta del bateador B a una pelota lanzada (a lo largo de N_{L} lanzamientos) con velocidad $v\hat{x}$. Sin embargo, y por razones obvias, la pelota es lanzada con velocidad $\vec{v}\,'$ tal que v' es, en el mejor de los casos, un valor cercano a v. Las distribuciones de velocidad, en consecuencia, se refieren a componentes de $\vec{v}$ y $\vec{v}\,'$ positivas aunque la inclusión de valores negativos muy improbables (*¡ el lanzador no lanza hacia atras !*) puede hacerse por conveniencia. Es conveniente retornar a esta figura después de leer el recuadro de la pág. 117.

4. ¿ Cual es la *rapidez media* medida $\langle v \rangle$?. ¿ Cual es la desviación standard o *ancho de la probabilidad medida* ?
5. Explique como puede inferirse, a partir de los resultados anteriores, la probabilidad *real* $P_v^{(\mathsf{B})}$ que describe al bateador.
6. En atención a los resultados anteriores, discuta el límite continuo ($v \in \mathbf{R}$).

<u>SOLUCIÓN</u>:

1. El número de pelotas bateadas viene dado por

$$N_{\mathsf{B}} = \sum_{i=0}^{N_{\mathsf{L}}-1} n_i$$

donde, en el i-ésimo lanzamiento, $n_i = 0$ si el bateador B falló o $n_i = 1$ en caso contrario (la pelota fue bateada). La rapidez de la pelota recibida en el i-ésimo lanzamiento es v_i la cual es determinada por el lanzador L. Por tanto

$$\langle N_{\mathsf{B}} \rangle_{\mathsf{B}} = \sum_{i=0}^{N_{\mathsf{L}}-1} \langle n_i \rangle_{\mathsf{B}} = \sum_{i=0}^{N_{\mathsf{L}}-1} \left\{ P_{v_i}^{(\mathsf{B})} \times 1 + \left[1 - P_{v_i}^{(\mathsf{B})} \right] \times 0 \right\}$$

$$\boxed{\langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}} = \sum_{i=0}^{N_{\mathtt{L}}-1} P_{v_i}^{(\mathtt{B})}} \tag{C.14}$$

2. $\left\langle \langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}} \right\rangle_{\mathtt{L}}$ viene dado por

$$\left\langle \langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}} \right\rangle_{\mathtt{L}} = \sum_{i=0}^{N_{\mathtt{L}}-1} \left\langle P_{v_i}^{(\mathtt{B})} \right\rangle_{\mathtt{L}} = \sum_{i=0}^{N_{\mathtt{L}}-1} \left(\sum_{v'} P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \right)$$

$$\boxed{\left\langle \langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}} \right\rangle_{\mathtt{L}} = N_{\mathtt{L}} \sum_{v'} P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} P_{v'}^{(\mathtt{B})}} \tag{C.15}$$

3. Puesto que $\left\langle \langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}} \right\rangle_{\mathtt{L}}$ puede *considerarse* como el número medio de pelotas bateadas o, lo que es lo mismo, *una medida realizada en el experimento de* `L`, este infiere que $\left\langle \langle N_{\mathtt{B}}\rangle_{\mathtt{B}} \right\rangle_{\mathtt{L}} / N_{\mathtt{L}}$ *" corresponde "* a la *probabilidad medida* $\mathcal{P}_v^{(\mathtt{B})}$ de que el bateador `B` batee una pelota con rapidez v (registrada por el lanzador `L`):

$$\boxed{\mathcal{P}_v^{(\mathtt{B})} = \sum_{v'} P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} P_{v'}^{(\mathtt{B})}, \qquad \left(\text{Convolución} \right)} \tag{C.16}$$

Basándonos en este resultado consideramos algunos casos límites:

- *El lanzador siempre lanza la pelota con una rapidez definida* v: Esto significa que

  $$P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} = \delta_{vv'}$$

  Usando el resultado (C.16) se obtiene

  $$\mathcal{P}_v^{(\mathtt{B})} = P_v^{(\mathtt{B})}$$

  lo cual significa que el resultado medido corresponde efectivamente a la probabilidad de batear una pelota con rapidez v.

- *El lanzador lanza la pelota de acuerdo a una probabilidad que es independiente de la rapidez*: Esto significa que

$$P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} = \frac{1}{\Omega}$$

donde Ω es el número de posibles valores seleccionados de la rapidez. Usando el resultado (C.16) se obtiene

$$\mathcal{P}_{v}^{(\mathtt{B})} = \frac{1}{\Omega}$$

lo cual significa que el resultado medido no suministra información alguna sobre las virtudes del bateador B.

- *El bateador repele la pelota de acuerdo a una probabilidad que es independiente de la rapidez*: Esto significa que

$$P_{v'}^{(\mathtt{B})} = \frac{1}{\Omega}$$

donde Ω es el número de posibles valores seleccionados de la rapidez. Usando el resultado (C.16) se obtiene

$$\mathcal{P}_{v}^{(\mathtt{B})} = \frac{1}{\Omega} = P_{v}^{(\mathtt{B})}$$

lo cual significa que el resultado medido corresponde exactamente a la probabilidad *actual* de bateo. Es notable que el resultado es independiente de las destrezas del lanzador.

- *El bateador* solo *puede batear las pelotas que recibe con cierta rapidez* v_0: Esto significa que

$$P_{v'}^{(\mathtt{B})} = \delta_{v'v_0}$$

Usando el resultado (C.16) se obtiene

$$\mathcal{P}_{v}^{(\mathtt{B})} = P_{v-v_0}^{(\mathtt{L})}$$

En este caso, el lanzador detecta la condición de bateo de B al notar que el resultado medido es una traslación de su *propia* probabilidad de lanzamiento.

4. $\langle v \rangle$ viene dada por (ver (C.16))

$$\begin{aligned}
\langle v \rangle &\equiv \sum_v \mathcal{P}_v^{(\mathtt{B})} v = \sum_v \left[\sum_{v'} P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \right] v = \sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \sum_v P_v^{(\mathtt{L})} (v + v') \\
&= \sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \left\{ \underbrace{\sum_v P_v^{(\mathtt{L})} v}_{\langle v \rangle_{\mathtt{L}}} + \underbrace{\left[\sum_v P_v^{(\mathtt{L})} \right]}_{1} v' \right\} \\
&= \underbrace{\left(\sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \right)}_{1} \langle v \rangle_{\mathtt{L}} + \underbrace{\sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} v'}_{\langle v \rangle_{\mathtt{B}}}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\langle v \rangle = \langle v \rangle_{\mathtt{L}} + \langle v \rangle_{\mathtt{B}}} \tag{C.17}$$

Procediendo en forma similar, a los resultados de arriba, obtendremos $\langle v^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
\left\langle v^2 \right\rangle &\equiv \sum_v \mathcal{P}_v^{(\mathtt{B})} v^2 = \sum_v \left[\sum_{v'} P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \right] v^2 = \sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \sum_v P_v^{(\mathtt{L})} (v + v')^2 \\
&= \sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \left(\left\langle v^2 \right\rangle_{\mathtt{L}} + 2 \langle v \rangle_{\mathtt{L}} v' + v'^2 \right) = \left\langle v^2 \right\rangle_{\mathtt{L}} + 2 \langle v \rangle_{\mathtt{L}} \langle v \rangle_{\mathtt{B}} + \left\langle v^2 \right\rangle_{\mathtt{B}}
\end{aligned}$$

La desviación standard (ancho de la distribución) viene dada por el resultado *medido* $\Delta v = \sqrt{\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2}$:

$$\boxed{\begin{aligned}
\Delta v &= \sqrt{(\Delta v_{\mathtt{B}})^2 + (\Delta v_{\mathtt{L}})^2} \quad \geq \quad \Delta v_{\mathtt{B}} \\
\Delta v_{\mathtt{B}} &= \sqrt{(\Delta v)^2 - (\Delta v_{\mathtt{L}})^2} \quad \leq \quad \Delta v
\end{aligned}} \tag{C.18}$$

Note que estos resultados son válidos cuando los momentos $\langle v^n \rangle$ (con $n = 1, 2$) existen. Por ejm... el resultado es inválido para distribuciones de probabilidad Lorentzianas.

5. En la expresión (C.16), multipliquemos ambos miembros por el factor z^v ($z \in \mathbf{C}, |z| < 1$) y sumemos sobre v:

$$\sum_v \mathcal{P}_v^{(\mathtt{B})} z^v = \sum_v \left[\sum_{v'} P_{v-v'}^{(\mathtt{L})} P_{v'}^{(\mathtt{B})} \right] z^v = \left[\sum_v P_v^{(\mathtt{L})} z^v \right] \left[\sum_{v'} P_{v'}^{(\mathtt{B})} z^{v'} \right]$$

Por tanto

$$\sum_v P_v^{(\mathsf{B})} z^v = \frac{\sum_v \mathcal{P}_v^{(\mathsf{B})} z^v}{\sum_v P_v^{(\mathsf{L})} z^v}$$

y en consecuencia

$$\boxed{P_v^{(\mathsf{B})} = \frac{1}{v!} \frac{\mathrm{d}^v}{\mathrm{d}z^v} \left\{ \frac{\sum_v \mathcal{P}_v^{(\mathsf{B})} z^v}{\sum_v P_v^{(\mathsf{L})} z^v} \right\}\Bigg|_{z=0}, \qquad \Big(\text{ Deconvolución } \Big)} \tag{C.19}$$

Puesto que $\mathcal{P}_v^{(\mathsf{B})}$ es el resultado *" medido "* y $P_v^{(\mathsf{L})}$ se presume conocido, la expresión anterior[7] *descubre* como batea B.

6. Introduzcamos las notaciones:

   $\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v)$: Distribución de probabilidades *medida* del bateador B.

   $\mathrm{P}_{\mathsf{B}}(v)$: Distribución de probabilidades *real* del bateador B.

   $\mathrm{P}_{\mathsf{L}}(v)$: Distribución de probabilidades del lanzador L.

   Las definiciones de $\mathrm{P}_{\substack{\mathsf{B}\\ \mathsf{L}}}(v)$ se precisan mas abajo.

   Usemos la identidad

$$\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \int_{-\infty}^{v} \mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v')\, \mathrm{d}v' \tag{C.20}$$

   La integración[8] representa la *probabilidad medida* de que el bateador batee pelotas que recibe con *rapidez* $< v$ lo cual equivale a

$$\int_{-\infty}^{v} \mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v')\, \mathrm{d}v' = \sum_{\substack{v' \\ v'<v}} \mathcal{P}_{v'}^{(\mathsf{B})} = \sum_{v'} \mathcal{P}_{v'}^{(\mathsf{B})} \Theta(v - v')$$

   Insertando este resultado en (C.20) y usando la identidad $\mathrm{d}\Theta(t)/\mathrm{d}t = \delta(t)$ se obtiene:

$$\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v) = \sum_{v'} \mathcal{P}_{v'}^{(\mathsf{B})} \delta(v - v')$$

[7] Cuando v forma parte de un conjunto de valores *discretos* (pero no necesariamente enteros) v resulta ser una función de $n \in \mathbf{N}$ $\Big($ por ejm... $v \equiv \phi_n, P_n^{(\cdots)} \equiv P_{\phi_n}^{(\cdots)} \Big)$, ($n = 0, 1, 2, \ldots$), y podremos usar el índice entero n en forma similar.

[8] Note que incluímos la posibilidad de que v sea negativo (el lanzador lanza hacia atras) lo cual es *prácticamente* improbable. Ello puede tomarse en cuenta, a posteriori, en las definiciones particulares de las distribuciones de probabilidad. Por ejm... $\mathrm{P}(v) \propto \Theta(v - 20)\, \mathrm{e}^{-v^2/25}$.

Reemplazando, en esta expresión, la convolución (C.16):

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v) &= \sum_{v'}\left[\sum_{v''} P^{(\mathsf{L})}_{v'-v''} P^{(\mathsf{B})}_{v''}\right]\delta(v-v') \\ &= \sum_{v''}\left\{\sum_{v'} P^{(\mathsf{L})}_{v'}\delta([v-v'']-v')\right\} P^{(\mathsf{B})}_{v''}\end{aligned}$$

e introduciendo la distribución de probabilidades del lanzador

$$\mathrm{P}_{\mathsf{L}}(v) \equiv \sum_{v'} P^{(\mathsf{L})}_{v'}\delta(v-v')$$

se obtiene

$$\boxed{\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v) = \sum_{v'} \mathrm{P}_{\mathsf{L}}(v-v')\, P^{(\mathsf{B})}_{v'}, \qquad \left(\ \textsf{Convolución}\ \right)} \tag{C.21}$$

En este resultado, cada término de la suma puede ser multiplicado, sin alterarlo, por el factor

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(v''-v')\ \mathrm{d}v''$$

lo cual conduce a

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v) &= \sum_{v'} \mathrm{P}_{\mathsf{L}}(v-v')\, P^{(\mathsf{B})}_{v'} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(v''-v')\ \mathrm{d}v'' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{P}_{\mathsf{L}}(v-v'')\left[\sum_{v'} P^{(\mathsf{B})}_{v'}\delta(v''-v')\right]\mathrm{d}v''\end{aligned}$$

La expresión entre corchetes es la distribución de probabiliades *real* del bateador:

$$\mathrm{P}_{\mathsf{B}}(v) \equiv \sum_{v'} P^{(\mathsf{B})}_{v'}\delta(v-v')$$

tal que

$$\boxed{\mathcal{P}_{\mathsf{B}}(v) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{P}_{\mathsf{L}}(v-v')\,\mathrm{P}_{\mathsf{B}}(v')\ \mathrm{d}v', \qquad \left(\ \textsf{Convolución}\ \right)} \tag{C.22}$$

Note que esta expresión (y sus variantes anteriores) es similar a la obtenida en algunos métodos espectroscópicos; entre ellos notablemente el *efecto Mössbauer*[9]: Una fuente de radiación que es caracterizada por una distribución, alrededor de cierta energía E, de probabilidades $\mathrm{I}(E)$ es colocada de manera tal que una muestra (análoga a $\mathtt{B}$) puede *capturar*, la radiación emitida por $\mathtt{L}$, con cierta distribución de probabilidades $\mathrm{I}(E')$. La fuente $\mathtt{L}$es modulada por efecto Dopler ($\mathrm{I}(E) \to \mathrm{I}(E - E')$) con lo cual es posible realizar *barridos o " muestreos "* para diferentes valores de E los cuales al registrarse permiten construir un histograma o distribución medida lo cual permite extraer información relacionada a la muestra. La técnica Mössbauer usa un multicanal sincronizado con la velocidad de la fuente $\mathtt{L}$ de la misma forma que el receptor (sincronizado por señas con el lanzador $\mathtt{L}$) colocado detras del bateador puede llevar su registro de pelotas bateadas o no bateadas. Ver Figura C.1.

$\mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v)$ es obtenida tomando transformadas de Fourier en ambos miembros de esta expresión:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-ikv}\, \mathcal{P}_{\mathtt{B}}(v) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-ikv} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{P}_{\mathtt{L}}(v - v')\, \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v')\ \mathrm{d}v' \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v')\ \mathrm{d}v' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-ikv}\, \mathrm{P}_{\mathtt{L}}(v - v') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v')\ \mathrm{d}v' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-ik(v+v')}\, \mathrm{P}_{\mathtt{L}}(v) \\
&= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ikv'} \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v')\ \mathrm{d}v'\right] \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-ikv}\, \mathrm{P}_{\mathtt{L}}(v)\right]
\end{aligned}$$

Con la notación:

$$\phi(v) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\ \mathrm{e}^{ikv}\, \widetilde{\phi}(k) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \widetilde{\phi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-ikv}\, \phi(v)$$

obtenemos

$$\boxed{\widetilde{\mathrm{P}}_{\mathtt{B}}(k) = \frac{\widetilde{\mathcal{P}}_{\mathtt{B}}(k)}{\widetilde{\mathrm{P}}_{\mathtt{L}}(k)}} \tag{C.23}$$

[9]Ver The Mössbauer effect: A review, with a collection of reprints, Hans Frauenfelder, W. A. Benjamin 1962.

tal que

$$\boxed{\mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\, \mathrm{e}^{ikv}\, \frac{\widetilde{\mathcal{P}}_{\mathtt{B}}(k)}{\widetilde{\mathrm{P}}_{\mathtt{L}}(k)}} \tag{C.24}$$

A manera de ejemplo, consideremos el caso

$$\begin{aligned} \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v) &= \frac{\Gamma_{\mathtt{B}}/\pi}{(v - v_{\mathtt{B}})^2 + \Gamma_{\mathtt{B}}^2}, \qquad \Gamma_{\mathtt{B}} > 0 \\ \mathrm{P}_{\mathtt{L}}(v) &= \frac{\Gamma_{\mathtt{L}}/\pi}{(v - v_{\mathtt{L}})^2 + \Gamma_{\mathtt{L}}^2}, \qquad \Gamma_{\mathtt{L}} > 0 \end{aligned}$$

La distribución de probabilidades medida $\mathcal{P}_{\mathtt{B}}(v)$ viene dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mathtt{B}}(v) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{P}_{\mathtt{L}}(v - v')\, \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v')\, \mathrm{d}v' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_{\mathtt{L}}/\pi}{(v - v' - v_{\mathtt{L}})^2 + \Gamma_{\mathtt{L}}^2}\, \frac{\Gamma_{\mathtt{B}}/\pi}{(v' - v_{\mathtt{B}})^2 + \Gamma_{\mathtt{B}}^2}\, \mathrm{d}v' \end{aligned}$$

Definamos $\mathrm{G}(z) \equiv 1/z$, $z \in \mathbf{C}$, $z \neq 0$; tal que

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mathtt{B}}(v) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(-\frac{1}{\pi}\right) \Im \mathrm{G}(v' - v + v_{\mathtt{L}} + i\Gamma_{\mathtt{L}})\right] \times \\ &\qquad \left[\left(-\frac{1}{\pi}\right) \Im \mathrm{G}(v' - v_{\mathtt{B}} + i\Gamma_{\mathtt{B}})\right] \mathrm{d}v' \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v'\, \frac{\mathrm{G}(v' - v + v_{\mathtt{L}} + i\Gamma_{\mathtt{L}}) - \mathrm{G}(v' - v + v_{\mathtt{L}} - i\Gamma_{\mathtt{L}})}{2i} \times \\ &\qquad \frac{\mathrm{G}(v' - v_{\mathtt{B}} + i\Gamma_{\mathtt{B}}) - \mathrm{G}(v' - v_{\mathtt{B}} - i\Gamma_{\mathtt{B}})}{2i} \end{aligned}$$

$\mathrm{G}(\omega \pm i\Gamma)$, con $\Gamma > 0$, tiene un polo en el semiplano inferior o superior del plano complejo, respectivamente. Por tanto, al usar el Teorema de los Residuos la única contribución a la integral proviene del producto de los *términos cruzados* en el integrando. Es decir

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mathtt{B}}(v) &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v'\, [-\mathrm{G}(v' - v + v_{\mathtt{L}} + i\Gamma_{\mathtt{L}})\, \mathrm{G}(v' - v_{\mathtt{B}} - i\Gamma_{\mathtt{B}}) \\ &\qquad - \\ &\qquad \mathrm{G}(v' - v + v_{\mathtt{L}} - i\Gamma_{\mathtt{L}})\, \mathrm{G}(v' - v_{\mathtt{B}} + i\Gamma_{\mathtt{B}})] \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi^2}\Re\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}v'\,\mathrm{G}\left(v'-v+v_{\mathtt{L}}+i\Gamma_{\mathtt{L}}\right)\mathrm{G}\left(v'-v_{\mathtt{B}}-i\Gamma_{\mathtt{B}}\right)\\
&= \frac{1}{2\pi^2}\Re\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}v'\,\frac{1}{v'-v+v_{\mathtt{L}}+i\Gamma_{\mathtt{L}}}\,\frac{1}{v'-v_{\mathtt{B}}-i\Gamma_{\mathtt{B}}}\\
&= \frac{1}{2\pi^2}\Re\left[2\pi\mathrm{i}\,\frac{1}{(v_{\mathtt{B}}+i\Gamma_{\mathtt{B}})-v+v_{\mathtt{L}}+i\Gamma_{\mathtt{L}}}\right]\\
&= -\frac{1}{\pi}\Im\frac{1}{(v_{\mathtt{B}}+v_{\mathtt{L}}-v)+i\left(\Gamma_{\mathtt{B}}+\Gamma_{\mathtt{L}}\right)}
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{\mathcal{P}_{\mathtt{B}}\left(v\right)=\frac{\left(\Gamma_{\mathtt{B}}+\Gamma_{\mathtt{L}}\right)/\pi}{\left[v-\left(v_{\mathtt{B}}+v_{\mathtt{L}}\right)\right]^2+\left[\Gamma_{\mathtt{B}}+\Gamma_{\mathtt{L}}\right]^2}} \tag{C.25}
$$

Con este resultado *" medido "* simple (*¡ Todas las distribuciones de probabilidad involucradas tienen la misma forma Lorentziana !*) se pueden inferir los valores de $v_{\mathtt{B}}$ y $\Gamma_{\mathtt{B}}$ lo cual equivale a determinar la *distribución de probabilidades real de bateo* del bateador `B`. Por ejm. . . , siguiendo la analogía con la técnica Mössbauer, mencionada arriba (ver recuadro en pág. 117), ello determina *algunas* de las características de la muestra `B`.

Ver expresión (C.18) y comentario subsiguiente para entender por qué se obtiene el factor $\Gamma_{\mathtt{B}}+\Gamma_{\mathtt{L}}$ en vez de $\sqrt{\Gamma_{\mathtt{B}}^2+\Gamma_{\mathtt{L}}^2}$.

La Figura C.2 ejemplifica los resultados, asociadas a las distribuciones Lorentzianas, que se han explicado arriba.

Una simulación basada en los resultados de este ejercicio se presenta en el `Ejercicio C.17`.

■

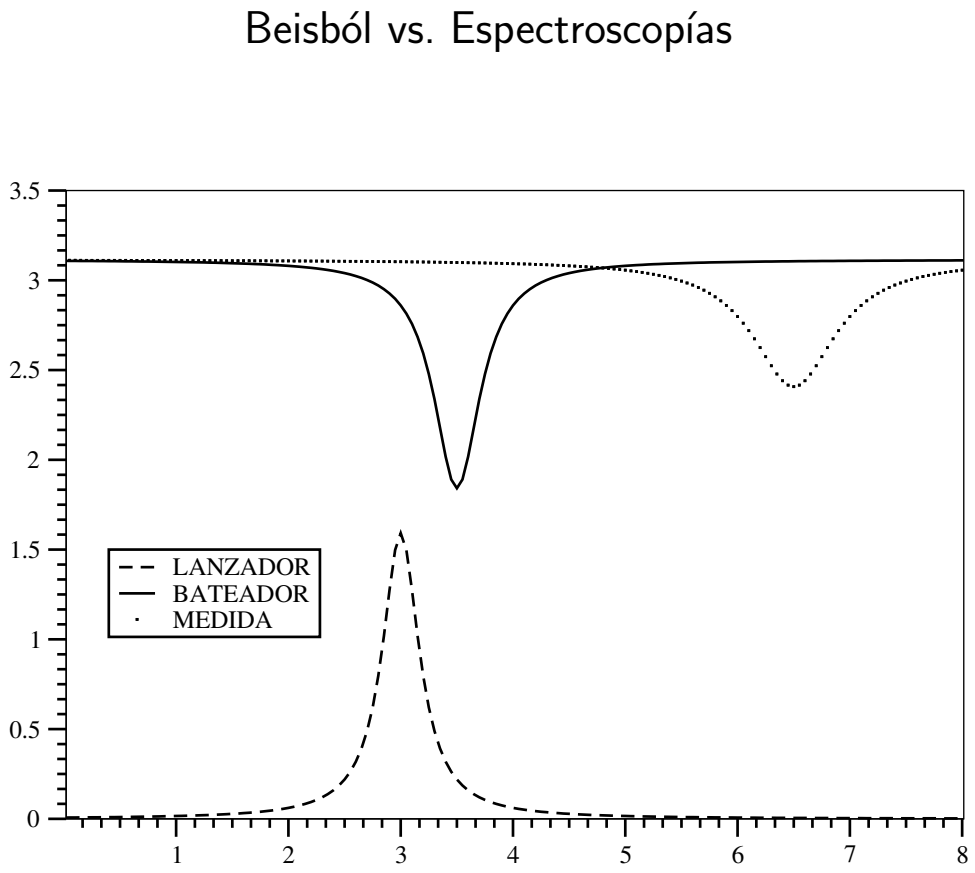


Figura C.2: Las distribuciones de probabilidad *medida* (símbolos +) y *real* (linea continua), del bateador, se muestran invertidas en la parte superior para enfatizar que las pelotas lanzadas (*emisión*) y las pelotas bateadas (*absorción*) se mueven en sentidos opuestos. Note que la medición se desplaza a la derecha con un *ancho* mayor que los respectivos *anchos* del lanzador (linea de segmentos) y el bateador (linea continua). Ver texto.

C.2. Simulaciones Simples[10]

Suponga que decide realizar el lanzamiento de una moneda un millón de veces. Por ejm..., si el número de `CARA`s N_C es mayor que el número de `SELLO`s N_S ($N_C > N_S$) podemos decidir que la opción `CARA` es la triunfadora entre dos eventos posibles (por ejm..., ser o no ser, bueno y malo, arriba o abajo, apagado o encendido, te pago o no te pago, etc...). La realización manual de este experimento resulta ser, en verdad, bastante aburrida entre otras cosas. La primera opción que se nos ocurre para evitar el lanzamiento manual es delegar en una máquina el lanzamiento de la moneda con todas las complicaciones (diseño, costos, etc...) que esto acarrea.

Otra opción consiste en usar algun sistema que decida en base a una colección de números $\{\xi_n\}$ *generados uniformemente al azar* en el intervalo $[0, 1)$.

Denotando con ξ a uno de estos números:

1. Se escoge la opción `CARA` si ξ satisface $0 \leq \xi < 1/2$: $\xi \in [0, 1)$.
2. Se escoge la opción `SELLO` si ξ satisface $1/2 \leq \xi < 1$: $\xi \in [1/2, 1)$.

   Esto se justifica notando que la probabilidad de generar un número $\xi \in [a, b)$ (con $0 \leq a \leq b < 1$) con una distribución uniforme de probabilidades en el intervalo $[0, 1)$, viene dada por $b - a$:

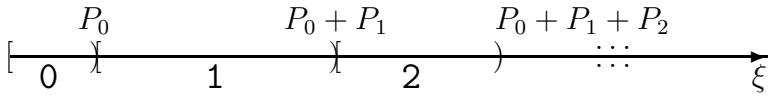
$$\int_a^b \mathrm{d}\xi = b - a\,, \qquad\qquad 0 \leq a \leq b < 1$$

En particular, ello significa que en el caso mas general, que incluye la posibilidad de *monedas sesgadas*, se escoge la opción `CARA` si $\xi < p_{\texttt{CARA}}$ o `SELLO` en caso contrario. $p_{\texttt{CARA}}$ es la probabilidad de obtener `CARA`. El lector podrá notar que hemos reemplazado la moneda por un mecanismo (no especificado por el momento) que genera números al azar y decimos, en este sentido, que estamos realizando una *Simulación del Lanzamiento de Monedas*. Obviamente, podemos imaginar que algunas características del lanzamiento de monedas han sido obviadas. En la práctica ello puede remediarse, al menos parcialmente, incorporando a la simulación otros elementos que no discutiremos aquí debido al propósito simple de esta sección. En cualquier caso, una simulación puede ser muy simple o extremadamente complicada de acuerdo a las características del sistema en estudio.

La moneda solo sirve al propósito de ilustrar el ejemplo pero el análisis es relevante a cualquier situación con dos eventos posibles. Si tenemos que decidir entre varios eventos ($n = 0, 1, 2, \ldots$), que ocurren con probabilidades $P_0, P_1, P_2, \ldots$, la generalización es evidente:

[10] De acuerdo al DRAE (`http://www.asixinformatica.com/servicios/drae.php`), *simular* significa *" Representar algo, fingiendo o imitando lo que no es "*.

1. Dividamos el intervalo $[0,1)$ en segmentos de longitud $P_0, P_1, P_2, \ldots$ como se indica a continuación:



2. Si $\quad 0 \leq \xi < P_0 \quad$ escoga la opción 0.

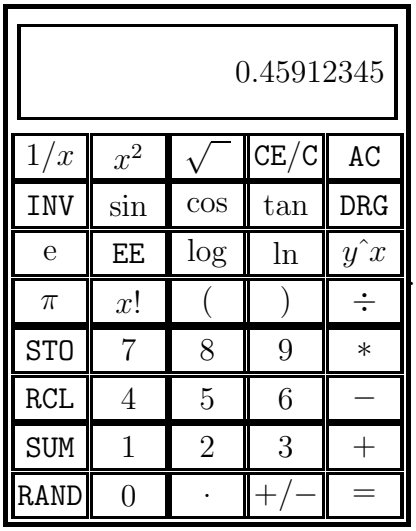
   Si $\quad P_0 \leq \xi < P_0 + P_1 \quad$ escoga la opción 1.

   Si $\quad P_0 + P_1 \leq \xi < P_0 + P_1 + P_2 \quad$ escoga la opción 2.

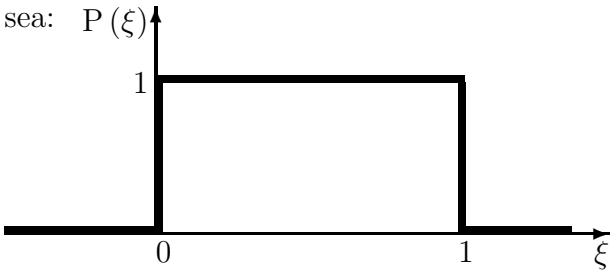
   etc...

A propósito: ¿ Como se generan *números al azar* uniformemente distribuídos en el intervalo $[0,1)$?. A continuación nos referiremos brevemente a este tópico pero el lector interesado en el tema puede consultar la inmensa literatura sobre el tema. Uno de nuestros propósito es mantener un nivel tan simple como se pueda *" pero no mas simple "*.

En esta sección mostramos una serie de simulaciones simples. En realidad son tan extremadamente simples que, con un poco de paciencia, algunas de ellas pueden realizarse con una *calculadora de bolsillo* como la que se muestra a continuación:



La tecla `RAND` genera números pseudoaleatorios distribuídos uniformemente en el intervalo $[0,1)$. Ello significa que la distribución de probabilidades que genera tales números es de la forma $\mathrm{P}(\xi) \equiv \Theta(\xi)\,\Theta(1-\xi)$. En particular, esta es la única distribución que necesitamos para generar cualquier otra por complicada que ella sea:



En un computador equipado con el lenguaje `C++` disponemos, entre otras posibilidades, de varios recursos que nos permiten generar una variedad de números al azar:

`int rand()`: Esta función retorna, en cada uso de ella (*llamada*), números enteros al azar (pseudoaleatorios) en el intervalo $[0, \texttt{RAND_MAX}]$

`void srand(size_t semilla)`: Esta función inicializa el generador de números al azar con el valor `semilla`.

`time_t time(time_t *)`: Esta función permite hacer uso del reloj del computador para generar valores de la semilla de inicialización. Es útil para reinicializar el generador con semillas independientes de la voluntad del usuario.

Las funciones `int rand()` y `void srand(size_t)` y el identificador `RAND_MAX` se definen en la biblioteca `<cstdlib>`. La función `time_t time(time_t *)` se define en la biblioteca `<ctime>`. Ambas bibliotecas forman parte de la distribución usual de `C++`. En realidad, no estamos interesados en entender el mecanismo de generación de números al azar. Estamos interesados *solo* en el uso de ellos para generar simulaciones simples.

Los siguientes son algunos casos usuales que el lector encontrará en ejemplos posteriores:

- Cada *llamada* a una línea de código como, por ejm. . . ,

  ```
  double(rand())/(RAND_MAX + 1.0);
  ```

  genera números equiparables a los reales, en el sentido matemático, en el intervalo $[0, 1)$. En realidad genera *números discretos* con " paso pequeño " los cuales son de enorme utilidad en multitud de aplicaciones.

- Cada *llamada* a una línea de código como (`ni` y `dn` son números enteros de tipo `size_t`)

  ```
  ni + size_t(dn*(double(rand())/(RAND_MAX + 1.0)));
  ```

  genera *números enteros al azar* $\{n\}$ (de tipo `size_t`) tal que $\texttt{ni} \leq n < \texttt{ni} + \texttt{dn}$.

El código siguiente (programa en `C++`) ejemplifica el uso de los recursos mencionados arriba:

Imprime 10000 números al azar en el intervalo $[0, 1)$.

```
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);


inline double rand01() // Retorna un numero de tipo
                       // double ( "real" ) en [0,1).
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


int main()
{
 // Inicializa el generador. Esta linea no es obligatoria.
 srand(size_t(time((time_t *)0)));

 // Imprime 10000 numeros al azar en [0,1).
 for ( size_t i=0 ; i<10000U ; ++i ) cout<<rand01()<<endl;

 return 0;
}
```

Ejercicio C.7

Simule 1000 lanzamientos de una moneda. El programa debe reportar a) el número de `caras` y `sellos` obtenidos y b) la probabilidad de obtener `cara` "*mediante el uso*" de la información obtenida en a).

SOLUCIÓN: : El programa `moneda0.cc` supone que la probabilidad de obtener `cara` o de obtener `sello` es $1/2$ aunque el resultado que se infiere de la simulación no es necesariamente así. Note que esperamos que el número de caras tome valores en el rango $4950 \lesssim n_{CARAS} \lesssim 5050$ puesto que la desviación standard viene dada por $\Delta n_{CARAS} = \sqrt{10000 \times 1/2 \times 1/2} = 50$.

```
// moneda0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iostream>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t LANZAMIENTOS=10000U;


int main()
{
 size_t cara=0;

 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 for ( size_t n=0 ; n<LANZAMIENTOS ; ++n )
     if (  (rand()/RANDMAX1)<0.5 ) ++cara;

 cout<<"\n Caras = "<<cara<<endl;
 cout<<"Sellos = "<<(LANZAMIENTOS - cara)<<endl;
 cout<<"Probabilidad CARA = "<<(double(cara)/LANZAMIENTOS)<<endl;

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado:

```
 Caras = 5027
Sellos = 4973
Probabilidad CARA = 0.5027
```

■

Ejercicio C.8

Este `Ejercicio` es similar al anterior salvo que el usuario decide con que probabilidad *cree o presume* que se obtendrá `CARA`. La simulación es realizada por el programa `moneda1.cc`, en `C++`, a continuación

SOLUCIÓN:

```
// moneda1.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iostream>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t LANZAMIENTOS=10000U;


int main()
{
 double pCara;
 do {
     cout<<"Probabilidad de CARA ?: ";
     cin>>pCara;
 } while (  ( pCara<0 ) || ( pCara>1 )  );

 size_t cara=0;
 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 for ( size_t n=0 ; n<LANZAMIENTOS ; ++n )
     if (  (rand()/RANDMAX1)<pCara ) ++cara;

 cout<<"\n Caras = "<<cara<<endl;
 cout<<"Sellos = "<<(LANZAMIENTOS - cara)<<endl;
 cout<<"Probabilidad CARA propuesta = "<<pCara<<endl;
 cout<<"Probabilidad CARA \"simulada\" = ";
 cout<<(double(cara)/LANZAMIENTOS)<<endl;

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado:

```
Probabilidad de CARA ?: 0.2

 Caras = 2039
Sellos = 7961
Probabilidad CARA propuesta = 0.2
Probabilidad CARA "simulada" = 0.2039
```

Note que la desviación standard *" teórica "* viene dada por

$$\Delta n_{CARAS} = \sqrt{10000 \times 0{,}2 \times 0{,}8} = 40$$

por lo que es razonable esperar $1960 \lesssim n_{CARAS} \lesssim 2040$. ■

Ejercicio C.9

Este es similar al `Ejercicio C.7` salvo que llevaremos *" una contabilidad "* al n-ésimo lanzamiento. En este sentido, consideramos el resultado de la simulación como un experimento y obtenemos la *probabilidad simulada o medida* como un *ajuste* a través del *Método de Mínimos Cuadrados*.

En efecto, denotemos con:

C_n: Número de caras al ejecutar n lanzamientos.

p_C: Probabilidad de obtener CARA la cual se obtiene como resultado del ajuste mencionado arriba.

N: Número total de lanzamientos de la moneda.

p_C se obtiene como aquel valor de p que minimiza la función $\mathcal{F}(p)$:

$$\mathcal{F}(p) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(np - C_n)^2 \ , \qquad \begin{cases} \mathcal{F}'(p) &= \left(\sum_{n=1}^{N} n^2\right) p - \sum_{n=1}^{N} nC_n \\ \mathcal{F}''(p) &= \sum_{n=1}^{N} n^2 = \dfrac{N(N+1)(2N+1)}{6} \end{cases}$$

el cual resulta ser[11], con $\mathcal{F}'(p_C) = 0$,

$$p_C = \frac{\sum_{n=1}^{N} nC_n}{\sum_{n=1}^{N} n^2} = \frac{\left[3\sum_{n=1}^{N}(n/N)(C_n/N)\right]/N}{[1+1/N][1+(1/2)/N]} \tag{C.26}$$

Por tanto

$$\mathcal{F}(p) = \mathcal{F}(p_C) + \frac{1}{2}\left(\sum_{n=1}^{N} n^2\right)(p - p_C)^2$$

lo cual permite interpretar a la *probabilidad* $\mathcal{P}(p)$ *de " medir "* el valor p como

$$\mathcal{P}(p) \propto \mathrm{e}^{-\mathcal{F}(p)} \propto \mathrm{e}^{-\frac{(p-p_C)^2}{2\sigma^2}} \ , \qquad \sigma \equiv \frac{1}{\sqrt{\sum_{n=1}^{N} n^2}}$$

[11] Otra posibilidad es definir $\mathcal{F}(p)$ en la forma

$$\mathcal{F}(p) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left\{[np - C_n]^2 + \left[npq - (\Delta_n)^2\right]^2\right\} \ , \qquad q = 1 - p$$

donde Δ_n es la desviación standard al n-ésimo lanzamiento. Dejamos, esta posibilidad, como ejercicio para el lector.

cuando se ejecuta un número de lanzamientos dados lo cual es consistente con la situación de experimentos reales donde, en principio, se obtienen valores *ligeramente* diferentes al repetirlos en condiciones idénticas *aparentes*.

Note que el caso del `Ejercicio C.7` equivale a considerar la minimización de

$$\frac{1}{2}\left(Np - C_N\right)^2 = \frac{\left(p - C_N/N\right)^2}{2\left(1/N\right)^2}$$

tal que el método usado en este ejercicio es mas eficiente puesto que (cuando $N \gg 1$) $\sigma \sim N^{-3/2}$ en vez de $\sim N^{-1}$.

Elabore un programa en `C++` que

- evalue la propuesta discutida arriba para el caso de 1000 lanzamientos de la moneda
- y discuta las virtudes de este método en comparación con resultados *del tipo fracción* `CARAS/LANZAMIENTOS`.

SOLUCIÓN: El programa, en `C++`, que se muestra a continuación (`moneda2.cc`) implementa el resultado (C.26) (método de mínimos cuadrados) y posteriormente hacemos uso de un recurso gráfico (ver Figura C.3) para discutir las virtudes del método discutido arriba.

```
// moneda2.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iostream>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t N=1000U; // Numero de lanzamientos


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
int main()
{
 double pC=0;
 size_t cara=0,n=0;
 for ( srand(size_t(time((time_t *)0))) ; n<N ; ++n ) {
       if ( rand01()<0.5 ) ++cara;
       pC+=(double(n)/N)*(double(cara)/N);
 }

 pC=(3.0*pC/N)/((1.0 + 1.0/N)*(1.0 + 0.5/N));
 cout<<"                 pC = "<<pC<<endl;
 cout<<"CARAS/LANZAMIENTOS = "<<(double(cara)/N)<<endl;

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado

```
                pC = 0.482921
CARAS/LANZAMIENTOS = 0.487
```

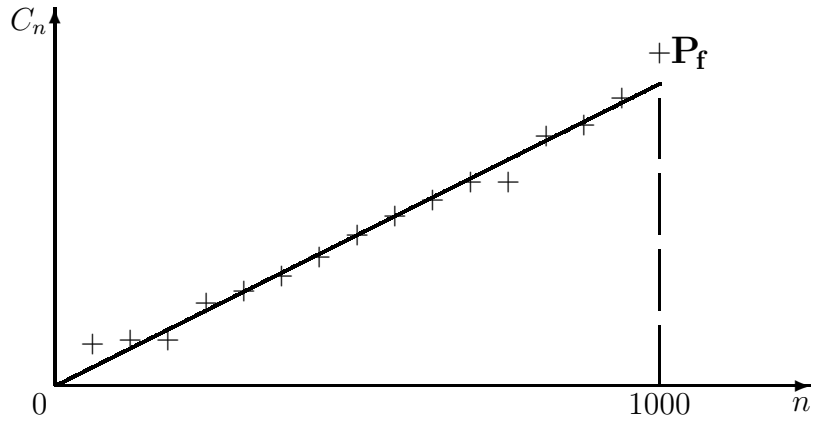


Figura C.3: Los símbolos + representan algunos (por simplicidad) de los 1000 valores generados mientras la línea continua es el ajuste de mínimos cuadrados de acuerdo a la expresión (C.26). Ambos resultados son solo un bosquejo (con escala arbitraria) del resultado simulado por el programa, en `C++`, `moneda2.cc`.

En la Figura C.3, `CARAS/LANZAMIENTOS` corresponde a la pendiente de la recta que une el origen con el punto final $\mathbf{P_f}$ mientras la linea *sólida* corresponde al ajuste de mínimos cuadrados (ver resultado (C.26)) la cual representa una " *especie*

de muestreo " a lo largo de la simulación y permite interpretar esta como un *experimento numérico*. ■

Ejercicio C.10

Cierto personaje $\mathcal{P}$ realiza 10^6 (un millón) lanzamientos de una moneda. Como resultado obtiene 6×10^5 caras y 4×10^5 sellos. A continuación comunica sus resultados a cuatro personas $\mathcal{P}_1$, $\mathcal{P}_2$, $\mathcal{P}_3$ y $\mathcal{P}_4$ con la particularidad de que ello resulta en tres preguntas completamente diferentes y con diferentes grados de información:

1. A $\mathcal{P}_1$: *Solo te informo que realizé lanzamientos de una moneda*. ¿ Cual es la probabilidad de obtener cara segun el experimento que acabo de realizar ?
2. A $\mathcal{P}_2$: ¿ Cual es la probabilidad de obtener cara si realizé $N = 10^6$ lanzamientos y obtuve $n_c = 6 \times 10^5$ caras ?
3. A $\mathcal{P}_3$: ¿ Cual es la probabilidad de obtener cara si se realizaron $N = 10^6$ lanzamientos con desviación standard (para las caras) $\Delta_c = 200\sqrt{6}$?
4. A $\mathcal{P}_4$: Si asigno -1 al valor sello y 1 al valor cara puedo afirmar que obtuve el valor medio $P_{cara} \times (1) + P_{sello} \times (-1) = 0{,}2$ donde $P_{\substack{cara \\ sello}}$ son las probabilidades de obtener $cara$ o $sello$ respectivamente y si además consideré la posibilidad de obtener " *monedas de canto* " a las cuales les asigno el valor 0 (cero). ¿ Cuales son las probabilidades de obtener cara, sello y " de canto " ?

<u>SOLUCIÓN</u>:

1. $\mathcal{P}_1$ responde que $\boxed{\text{la probabilidad de obtener cara es } 1/2}$ puesto que en ausencia de cualquier información es " *razonable* " suponer que la probabilidad de obtener cara o sello debe ser la misma.

   Este tipo de razonamiento (enarbolado por $\mathcal{P}_0$) se conoció desde hace algunos siglos como el *Principio de la Razón Insuficiente*[12] y fue establecido por Bernoulli en 1713.

2. $\mathcal{P}_2$ adopta la " *actitud frecuentista* " que interpreta la probabilidad como la fracción de caras que aparecen a lo largo del total de lanzamientos y afirma que $\boxed{\text{la probabilidad de obtener cara es } 600000/1000000 = 0{,}6}$.

[12] Ver por ejm..., `WHERE DO WE STAND ON MAXIMUM ENTROPY ?`, E. T. Jaynes. April 1978. Presentado en " Maximum Entropy Formalism Conference ", MIT, May 2-4, 1978. Accesible en: `http://bayes.wustl.edu/etj/node1.html`

3. $\mathcal{P}_3$ argumenta que si los *lanzamientos son independientes entre si*, entonces se puede recurrir a la conocida distribución binomial de los resultados tal que

$$\Delta_c = \sqrt{NP_{cara}\left(1 - P_{cara}\right)} \qquad \Longrightarrow \qquad P_{cara} = \frac{1}{2} \pm \overbrace{\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\left(\Delta_c\right)^2}{N}}}^{=\,0{,}1}$$

En consecuencia, con la información suministrada $\mathcal{P}_3$ afirma que

$$\boxed{P_{cara} = 0{,}4 \quad \text{o} \quad P_{cara} = 0{,}6}$$

4. Si no se introducen las monedas " de canto " la solución es obviamente $P_{cara} = 0{,}6$ y $P_{sello} = 0{,}4$. La introducción de monedas " de canto " crea una incertidumbre en el problema (*" mas variables que ecuaciones "*). Sin embargo, $\mathcal{P}_4$ se plantea la siguiente reflexión: Si $\mathcal{P}_0$ fue capaz de dar una respuesta sin haber obtenido información apreciable alguna, ¿ Como es posible que yo no pueda dar ninguna respuesta si al menos se me ha proporcionado *una* información ?. $\mathcal{P}_0$, en realidad, optó por la solución que corresponde a su *ignorancia* del asunto o a la sorpresa que experimentaría ante la eventualidad de observar uno de los dos eventos (cara o sello). $\mathcal{P}_4$ especula que debe haber una manera de cuantificar su ignorancia (o en cuanto se ha reducido esta) una vez que posee una información sobre el experimento y en completa analogía con el razonamiento de $\mathcal{P}_0$.

   En lo que sigue elaboramos el razonamiento posterior de $\mathcal{P}_4$. Si un evento es *muy improbable* yo experimentaría una sorpresa mayúscula si este ocurre. Por ejm..., me sorprendería mucho que un rayo caiga sobre la laptop en este momento. En tal caso, cuantificaría mi sorpresa como infinita (∞). Si un evento luce muy probable no me sorprendería si este ocurre. Por ejm..., no nos sorprendemos en absoluto de que el sol salga todos los días y en situaciones análogas cuantifico la sorpresa como nula (cero). Es obvio que valores s tales que $0 < s < \infty$ especifican diferentes grados de sorpresa o/e ignorancia entre los límites elaborados arriba. Por ejm..., no me sorprendería tanto que llueva hoy si hace dos dias llovió a pesar de que somos ignorantes de los factores que determinan este fenómeno. $\mathcal{P}_4$ impone (lo cual le luce razonable) que la sorpresa causada por dos eventos independientes sea aditiva (la suma de las sorpresas individuales atribuídas a cada evento). Por ejm..., la sorpresa 1) que causa la lluvia de hoy y 2) que se acabe el queso en Francia debe ser mayor que la sorpresa causada por cada uno de estos eventos por separado. Por tanto la *hipótesis de aditividad de la sorpresa o ignorancia* es la mas simple posible.

Resumiendo, $\mathcal{P}_4$ introduce una función s que permite cuantificar la sorpresa o ignorancia $\mathrm{s} : (0,1] \to [0,\infty)$ tal que a un evento que ocurre con probabilidad p se le asigna la sorpresa o medida de la ignorancia $\mathrm{s}(p)$ la cual satisface[13]:

$$\lim_{p\to 0^+} \mathrm{s}(p) = \infty\,, \qquad \lim_{p\to 1^-} \mathrm{s}(p) = 0 \tag{C.27}$$

$$\mathrm{s}(p_1 p_2) = \mathrm{s}(p_1) + \mathrm{s}(p_2)$$

donde p_1 y p_2 son probabilidades de dos eventos independientes. Derivando ambos miembros de la segunda ecuación respecto de p_2 se obtiene

$$p_1\, \mathrm{s}'(p_1 p_2) = \mathrm{s}'(p_2) \quad \Longrightarrow \quad p\, \mathrm{s}'(p) = \mathrm{s}'(1)$$

tal que

$$\mathrm{s}(p) = \mathrm{s}'(1)\, \ln p + A\,, \qquad A = \text{constante}$$

A se anula ($A = 0$) y $\mathrm{s}'(1)$ debe ser negativa ($\mathrm{s}'(1) < 0$) para satisfacer las condiciones de frontera (C.27). La elección mas simple es $\mathrm{s}'(1) = -1$ tal que[14]

$$\boxed{\mathrm{s}(p) = -\ln p} \tag{C.28}$$

Si un experimento dado puede generar Ω resultados posibles y cada uno de ellos ocurre con probabilidad P_n ($n = 1, 2, \ldots, \Omega$); entonces, al n-ésimo de los posibles resultados del experimento se le asigna la sorpresa o medida de la ignorancia $-\ln P_n$ tal que la *sorpresa media* o *ignorancia media* viene dada por:

$$\boxed{\mathcal{S} = \sum_{n=1}^{\Omega} P_n\,(-\ln P_n) = -\sum_{n=1}^{\Omega} P_n \ln P_n} \tag{C.29}$$

Por ejm. . . , en ausencia de cualquier información (salvo la condición de normalización $\sum_{n=1}^{\Omega} P_n = 1$) la máxima sorpresa o ignorancia corresponde al

[13]En este contexto, la probabilidad es considerada como una medida de la factibilidad de un evento e independiente de un argumento que *" cuenta eventos "*. En particular, en el caso de eventos no repetibles, esta posibilidad luce mas intuitiva. Animados por el propósito de enfatizar esta situación, algunos autores han sugerido los nombres *presunción* o *factibilidad* en vez del genérico *probabilidad*.

[14]Frecuentemente, $\mathrm{s}'(1)$ es elegida de tal manera que permita el uso del logaritmo en bases diferentes con resultados que lucen mas intuitivos. Por ejm. . . , para un conjunto de espines 1/2 el logaritmo en base 2 es mas adecuado.

valor máximo de $\mathcal{S}$ el cual se obtiene usando el *método de los multiplicadores de Lagrange* con la expresión:

$$\mathcal{S}-\mu\sum_{n=1}^{\Omega}P_n=-\sum_{n=1}^{\Omega}P_n\ln P_n-\mu\sum_{n=1}^{\Omega}P_n\,,\quad (\ \mu:\ \text{multiplicador de Lagrange}\ )$$

$$0=\frac{\partial}{\partial P_m}\left(-\sum_{n=1}^{\Omega}P_n\ln P_n-\mu\sum_{n=1}^{\Omega}P_n\right)=-\ln P_m-1-\mu\,,\qquad \forall m$$

Por tanto, P_n es independiente de n: $P_n=1/\Omega$. Este es el resultado que ha invocado $\mathcal{P}_0$. La medida de la sorpresa o ignorancia, en este caso, se reduce a

$$\mathcal{S}=-\sum_{n=1}^{\Omega}\frac{1}{\Omega}\ln\left(\frac{1}{\Omega}\right)=\ln\Omega$$

Ahora que $\mathcal{P}_4$ ha introducido una *versión cuantitativa* de la sorpresa o ignorancia puede abordar el problema planteado con la condición adicional del valor dado de $\langle n\rangle$:

$$\langle n\rangle=\sum_{n=-1}^{1}P_n\,n\,,\qquad\begin{cases}P_{-1}\text{: Probabilidad de obtener } \textit{sello}.\\ P_0\text{: Probabilidad de obtener } \textit{canto}.\\ P_1\text{: Probabilidad de obtener } \textit{cara}.\end{cases}\tag{C.30}$$

Estudiemos la expresión $\mathcal{S}-\beta\sum_{n=-1}^{1}P_n\,n-\mu\sum_{n=-1}^{1}P_n$ donde β y μ son multiplicadores de Lagrange:

$$\begin{aligned}0&=\frac{\partial}{\partial P_m}\left(-\sum_{n=-1}^{1}P_n\ln P_n-\beta\sum_{n=-1}^{1}P_n\,n-\mu\sum_{n=-1}^{1}P_n\right)\\&=-\ln P_m-1-\beta m-\mu\,,\qquad\qquad m=-1,0,1\end{aligned}$$

lo cual significa que $P_n=Z^{-1}\,\mathrm{e}^{-\beta n}$ donde $Z=\sum_{n=-1}^{1}\mathrm{e}^{-\beta n}$ garantiza la condición de normalización. β se determina imponiendo que se cumpla la condición (C.30):

$$\begin{aligned}\langle n\rangle&=\frac{\mathrm{e}^{-\beta(-1)}\,(-1)+\mathrm{e}^{-\beta(0)}\,(0)+\mathrm{e}^{-\beta(1)}\,(1)}{\mathrm{e}^{-\beta(-1)}+\mathrm{e}^{-\beta(0)}+\mathrm{e}^{-\beta(1)}}=\frac{-\,\mathrm{e}^{\beta}+\mathrm{e}^{-\beta}}{\mathrm{e}^{\beta}+1+\mathrm{e}^{-\beta}}\\&=\frac{\mathrm{e}^{-2\beta}-1}{\mathrm{e}^{-2\beta}+\mathrm{e}^{-\beta}+1}\end{aligned}$$

la cual equivale a:

$$(1-\langle n\rangle)\,\mathrm{e}^{-2\beta}-\langle n\rangle\,\mathrm{e}^{-\beta}-(1+\langle n\rangle)=0\implies\mathrm{e}^{-\beta}=\frac{\langle n\rangle+\sqrt{4-3\,\langle n\rangle^2}}{2\,(1-\langle n\rangle)}$$

Con el valor $\langle n \rangle = 0{,}2$ se obtiene $\mathrm{e}^{-\beta} \approx 1{,}356107225$: y por lo tanto $\mathcal{P}_4$ afirma que:

$$
\begin{aligned}
P_{sello}\big|_{n=-1} &= \frac{\mathrm{e}^{\beta}}{\mathrm{e}^{\beta}+1+\mathrm{e}^{-\beta}} \approx \boxed{0{,}2383714067} \qquad (\ SELLO\ ) \\
P_{canto}\big|_{n=0} &= \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta}+1+\mathrm{e}^{-\beta}} \approx \boxed{0{,}3232571868} \qquad (\ CANTO\ ) \\
P_{cara}\big|_{n=1} &= \frac{\mathrm{e}^{-\beta}}{\mathrm{e}^{\beta}+1+\mathrm{e}^{-\beta}} \approx \boxed{0{,}4383714065} \qquad (\ CARA\ )
\end{aligned}
$$

La sorpresa media o ignorancia media obtenida con estos valores resulta ser:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{S} &= -P_{sello}\ln P_{sello} - P_{canto}\ln P_{canto} - P_{cara}\ln P_{cara} \\
&\approx 1{,}068383376 < \ln 3 \approx 1{,}098612289
\end{aligned}
$$

lo cual muestra la reducción de la ignorancia con respecto a la situación donde no se dispone de información sobre el valor medio $\langle n \rangle$.

La exposición elaborada en este aparte provee una introducción extremadamente breve a los rudimentos de la Teoría de la Información. El lector interesado en el tema puede empezar consultando la bibliografía mencionada en el pie de pág. 12 (ver pág. 130).

■

Ejercicio C.11

Simule 60000 lanzamientos de un dado de seis caras. Cada cara "*aparece*" con probabilidad $1/6$.

SOLUCIÓN: El programa `dados0.cc`, en `C++`, ejemplifica este caso:

```
// dados0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <iomanip>
#include <iostream>
#include <vector>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t LANZAMIENTOS=60000U;
```

```
inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline size_t dado() // Retorna un numero ENTERO 1 <= n <= 6
{
 return 1U + size_t(6.0*rand01())%6U;
}


int main()
{
 size_t i;
 vector<size_t> cara(6U,0); // Las 6 caras de un dado.

 for ( i=0 ; i<LANZAMIENTOS ; ++i ) ++cara[dado() - 1U];

 size_t j=1U;
 for ( i=0 ; i<cara.size() ; ++i,++j )
     cout<<j<<" ---> "<<setw(5)<<cara[i]<<endl;

 return 0;
}
```

Al ejecutar este programa se obtiene:

```
1 ---> 10040
2 ---> 10074
3 ---> 10046
4 --->  9995
5 --->  9893
6 --->  9952
```

■

Ejercicio C.12

Simule 60000 lanzamientos de un dado *sesgado* de seis caras. La probabilidad P_n de obtener el valor n en un lanzamiento del dado viene dada

por:

$$P_1 = 0.03, \quad P_2 = 0.09 \quad P_3 = 0.13$$

$$P_4 = 0.2\ , \quad P_5 = 0.25 \quad P_6 = 0.3$$

SOLUCIÓN:

```
// dados1.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <iomanip>
#include <iostream>
#include <vector>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t LANZAMIENTOS=60000U;
size_t dado();


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


int main()
{
 size_t i;
 vector<size_t> cara(6U,0); // Las 6 caras de un dado.

 for ( i=0 ; i<LANZAMIENTOS ; ++i ) ++cara[dado() - 1U];

 size_t j=1U;
 for ( i=0 ; i<cara.size() ; ++i,++j )
     cout<<j<<" ---> "<<setw(5)<<cara[i]<<endl;

 return 0;
}
```

```
size_t dado()
{
 static const double sp[5]={0.03,0.12,0.25,0.45,0.7};
 static double r;

 r=rand01();
 if ( r<sp[0] ) return 1U;
 if ( r<sp[1] ) return 2U;
 if ( r<sp[2] ) return 3U;
 if ( r<sp[3] ) return 4U;
 if ( r<sp[4] ) return 5U;
                return 6U;
}
```

Al ejecutar este programa se obtiene:

```
1 --->  1738
2 --->  5528
3 --->  7819
4 ---> 12119
5 ---> 14937
6 ---> 17859
```

■

Ejercicio C.13

Simule 240000 lanzamientos de un dado *sesgado* de veinte y cuatro (24) caras. La probabilidad P_n de obtener el valor n ($n = 1, 2, 3, \ldots, 24$) en un lanzamiento del dado viene dada por $P_n \propto \mathrm{e}^{-(n-24)/24}$:

$$P_n = \frac{1 - \mathrm{e}^{-1/24}}{1 - \mathrm{e}^{-1}} \, \mathrm{e}^{-(24-n)/24}$$

SOLUCIÓN:

```
// dados2.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
#include <vector>
using namespace std;
const double E_1=1.0/M_E;
const double FACTOR=(1.0 - pow(E_1,1.0/24.0))/(1.0 - E_1);
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t LANZAMIENTOS=240000U;
const size_t& dado();


inline double p(const size_t &n)
{
 return FACTOR*exp(-(24.0 - n)/24.0);
}


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
int main()
{
 vector<size_t> cara(24U,0); // Las 24 caras del dado.

 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 size_t i=0;
 while ( i<LANZAMIENTOS ) ++cara[dado() - 1U],++i;

 size_t j=1U;
 unsigned char k;
 for ( i=0 ;;) {
     cout<<setw(2)<<j<<" ---> "<<setw(5)<<cara[i]<<';';
     if ( ++i<cara.size() ) ++j; else break;
     for ( k = 0 ; k<3 ; ++k ) {
         cout<<"  "<<setw(2)<<j<<" ---> "<<setw(5)<<cara[i]<<';';
         if ( ++i<cara.size() ) ++j; else break;
     }
     cout<<endl;
     if ( i>=cara.size() ) break;
 }

 return 0;
}


const size_t& dado()
{
 static double r,suma;
 static size_t n;
 static vector<double> sp;

 if ( sp.size()==0 ) {
    n=(sp.resize(24U),0);
    for ( size_t i=0 ; i<sp.size() ; ++i ) sp[i]=p(++n);
 }

 r=(suma=sp[0],rand01());
 for ( n=1U ; ( n<sp.size() ) && ( suma<r ) ; ++n ) suma+=sp[n];

 return n;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado:

```
 1 --->  5976;   2 --->  6222;   3 --->  6552;   4 --->  6635;
 5 --->  6894;   6 --->  7238;   7 --->  7515;   8 --->  7919;
 9 --->  8382;  10 --->  8589;  11 --->  9152;  12 --->  9344;
13 --->  9694;  14 ---> 10297;  15 ---> 10591;  16 ---> 11034;
17 ---> 11463;  18 ---> 12244;  19 ---> 12481;  20 ---> 13093;
21 ---> 13790;  22 ---> 14517;  23 ---> 14878;  24 ---> 15500;
```

■

Una generalización posterior ocurre en la elección de una variable x que es generada por una distribución continua de probabilidades $\mathrm{P}(x)$. Podemos imaginar que un intervalo de valores $[\xi, \xi + \Delta\xi)$ (con $0 \leq \xi \leq \xi + \Delta\xi < 1$) generados con una distribución de probabilidades uniforme en el intervalo $[0, 1)$ corresponde a un intervalo de valores $[x, x + \Delta x)$ generados por $\mathrm{P}(x)$. Ello significa que consideramos a x como función de ξ y tal que se satisface:

$$\mathrm{P}(x)\,\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\xi} = 1 \qquad \text{con} \qquad x(\xi_0) = x_0 \tag{C.31}$$

x es determinado por la ecuación

$$\int_{x_0}^{x} \mathrm{P}(x')\,\mathrm{d}x' = \xi - \xi_0$$

Ejercicio C.14

Explique como se generan valores aleatorios de θ ($0 \leq \theta < \pi$) distribuídos de acuerdo a $\mathrm{sen}(\theta)/2$. Elabore un programa, en C++, que genere 30 de tales números. Compare el valor medio de ellos y su desviación standard con los valores teóricos.

SOLUCIÓN: Resolvamos la ecuación

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{sen}(\theta)\,\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\xi} = 1 \qquad \text{con} \qquad (\ \xi = 0 \quad \Longrightarrow \quad \theta = 0\ )$$

Esta conduce a

$$\begin{aligned}\xi &= -\frac{1}{2}\cos(\theta) + \frac{1}{2}\cos(0) = \frac{1}{2}(1 - \cos\theta) = \frac{1}{2}\left[2\,\mathrm{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right] \\ &= \mathrm{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

$$\boxed{\theta = 2\ \mathrm{arc\,sen}\left(\sqrt{\xi}\ \right), \qquad 0 \leq \xi < 1} \tag{C.32}$$

Con la generación de sucesivos valores, uniformemente distribuídos en el intervalo $[0,1)$, de ξ se obtienen valores de θ distribuídos de acuerdo a $\mathrm{sen}\,(\theta)\,/2$ con $0 \leq \theta < \pi$.

Valores *teóricos* de $\langle\theta\rangle_t$, $\langle\theta^2\rangle_t$ y $\Delta\theta_t$ vienen dados por:

$$\langle\theta\rangle_t \equiv \int_0^\pi \frac{1}{2}\,\mathrm{sen}\,(\theta)\,\theta\,\mathrm{d}\theta = -\frac{1}{2}\,\theta\cos\theta\Big|_0^\pi + \frac{1}{2}\int_0^\pi \cos(\theta)\ \mathrm{d}\theta = \frac{\pi}{2} \approx 1{,}5707963$$

$$\begin{aligned}\left\langle\theta^2\right\rangle_t &\equiv \int_0^\pi \frac{1}{2}\,\mathrm{sen}\,(\theta)\,\theta^2\,\mathrm{d}\theta = -\frac{1}{2}\,\theta^2\cos\theta\Big|_0^\pi + \int_0^\pi \cos(\theta)\,\theta\,\mathrm{d}\theta \\ &= \frac{\pi^2}{2} + \theta\,\mathrm{sen}\,\theta|_0^\pi - \int_0^\pi \mathrm{sen}\,(\theta)\ \mathrm{d}\theta = \frac{\pi^2}{2} + \cos\theta|_0^\pi = \frac{\pi^2}{2} - 2 \approx 2{,}9348022\end{aligned}$$

$$\Delta\theta_t \equiv \sqrt{\langle\theta^2\rangle_t - \langle\theta\rangle_t^2} = \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{2} - 2\right) - \left(\frac{\pi}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{\pi^2 - 8}}{2} \approx 0{,}68366739$$

El siguiente programa, en `C++`, `senTheta0.cc` implementa numéricamente el presente ejercicio:

```
// senTheta0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <iostream>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t N=30U; // Cantidad de numeros generados.
double R;
double delta(double p1,double p2);


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
// Genera numeros, al azar, distribuidos segun sen(theta)/2 con
// 0 <= theta < M_PI
inline double randSen2()
{
 R=rand01();
 if (  ( 0<R ) && ( R<1.0 )  ) {
    if (  ( 0<(R=sqrt(R)) ) && ( R<1.0 )  ) return 2.0*asin(R);
 }
 return ( R<0.5 ) ? 0:M_PI;
}


int main()
{
 double prom1=0,prom2=0,theta;

 for ( size_t i=0 ; i<N ; ++i ) {
     theta=randSen2();
     prom1+=theta;
     prom2+=theta*theta;
 }

 cout<<"  Promedia theta = "<<(prom1/=N)<<endl;
 cout<<"Promedia theta^2 = "<<(prom2/=N)<<endl;
 cout<<"     Delta_theta = "<<delta(prom1,prom2)<<endl;

 return 0;
}
```

```
double delta(double p1,double p2) // Equivale a sqrt(|p2| - p1*p1)
{
 p2=sqrt(abs(p2));

 if ( p2>abs(p1) ) {
    p1/=p2;
    p1=1.0 - p1*p1;
    if ( p1>0 ) return p2*sqrt(p1);
 }

 return 0;
}
```

Al ejecutar este programa se obtienen los resultados:

```
  Promedia theta = 1.58415
Promedia theta^2 = 2.9957
     Delta_theta = 0.697248
```

los cuales el lector podrá comparar con los resultados teóricos de la pág. 141.

Suponga que se generan, por ejm..., 10^{10} números en vez de una pequeña cantidad como 30: ¿ Que precauciones (o modificaciones) tomaría el lector al ejecutar `senTheta0.cc` ?.

■

Ejercicio C.15

Explique como pueden generarse valores de x distribuídos de acuerdo a *una Gaussiana*:

$$\mathcal{G}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \sigma}\ \mathrm{e}^{-(x-\overline{x})^2/2\sigma^2}\ ; \qquad x, \overline{x}, \sigma \in \mathbf{R}\,, \quad \sigma > 0$$

Construya un programa, en C++, que genere 10 números distribuídos de acuerdo a la Gaussiana:

$$\frac{\mathrm{e}^{-(x-10)^2/32}}{4\sqrt{2\pi}}$$

SOLUCIÓN: En este caso, el uso directo del resultado (C.31) es inconveniente puesto que ello conduce a una ecuación trascendente para x como función de ξ (ver expresión (C.31)).

En realidad existe una forma mas simple de abordar el presente problema la cual explicamos a continuación. Imagine que deseamos generar simultaneamente dos de tales distribuciónes Gaussianas las cuales vienen dadas por:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_x(x) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \sigma_x}\ \mathrm{e}^{-(x-\overline{x})^2/2\sigma_x^2}\\ \mathcal{G}_y(y) &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \sigma_y}\ \mathrm{e}^{-(y-\overline{y})^2/2\sigma_y^2}\,;\end{aligned}$$

La condición de normalizacíon puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned}1 &= \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\mathcal{G}_x(x)}^{=1}\ \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\,\mathcal{G}_y(y)}^{=1}\\ &= \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\ \mathrm{e}^{-(x-\overline{x})^2/2\sigma_x^2-(y-\overline{y})^2/2\sigma_y^2}\end{aligned}$$

En la integral realizamos el cambio de variables $(x,y)\to(r,\theta)$ donde $r\geq 0$ y $0\leq\theta<2\pi$:

$$x = \overline{x}+\sqrt{2}\ \sigma_x r\cos\theta \tag{C.33}$$

$$y = \overline{y}+\sqrt{2}\ \sigma_y r\,\mathrm{sen}\,\theta \tag{C.34}$$

$$\frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)} = \begin{vmatrix}\sqrt{2}\ \sigma_x\cos\theta & -\sqrt{2}\ \sigma_x r\,\mathrm{sen}\,\theta\\ \sqrt{2}\ \sigma_y\,\mathrm{sen}\,\theta & \sqrt{2}\ \sigma_y r\cos\theta\end{vmatrix} = 2\sigma_x\sigma_y r$$

La condción de normalización se reduce a

$$1=\frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-r^2}\,(2\sigma_x\sigma_y r)\ \mathrm{d}r=\overbrace{\int_0^{2\pi}\frac{1}{2\pi}\,\mathrm{d}\theta}^{=1}\ \overbrace{\int_0^{\infty}2r\,\mathrm{e}^{-r^2}\,\mathrm{d}r}^{=1}$$

$(2\pi)^{-1}$ y $2r\,\mathrm{e}^{-r^2}$ son distribuciones de probabilidad para θ y r respectivamente. Una vez conocidos los valores r y θ podemos usar (C.33) o/y (C.34) para determinar una cantidad generada por una distribución Gaussiana.

Para determinar r y θ resolvemos el par de ecuaciones diferenciales (ver (C.31)):

$$\begin{aligned}2r\,\mathrm{e}^{-r^2}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\xi_r} &= 1\,, \qquad (\ \xi_r=0 \implies r=0\ )\\ \frac{1}{2\pi}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\xi_\theta} &= 1\,, \qquad (\ \xi_\theta=0 \implies \theta=0\ )\end{aligned}$$

donde ξ_r y ξ_θ son, en general, números al azar que se generan con una distribución de probabilidades uniforme en el intervalo $[0,1)$. Las soluciones de las ecuaciones para r y θ son:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{-\ln(1-\xi_r)} \\ \theta &= 2\pi\xi_\theta \end{aligned}$$

$$\boxed{x = \overline{x} + \sigma\sqrt{-2\ln(1-\xi_r)}\ \cos(2\pi\xi_\theta)}$$

es una cantidad generada por la distribución Gaussiana

$$\mathcal{G}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \sigma}\ \mathrm{e}^{-(x-\overline{x})^2/2\sigma^2}\ ; \qquad x, \overline{x}, \sigma \in \mathbf{R}\,, \quad \sigma > 0 \tag{C.35}$$

donde ξ_r y ξ_θ son generados por una distribución uniforme de probabilidades en el intervalo $[0,1)$.

```
// Gauss0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
```

```
template<class T>
class Gauss
{
      private:
              T xBar;  // valor medio
              T sigma; // Desviacion Standard

              static const T DOSPI,RAIZ2PI,RANDMAX1;
              static T R;
      public:
             // Constructores
             Gauss(T xbar=0,T sig=0): xBar(xbar), sigma(sig) {}

             // Metodos
             T& desviacion() { return sigma; }
             T desviacion() const { return sigma; }
             static T Rand01();
             T randGauss() const;
             T& valorMedio() { return xBar;}
             T valorMedio() const { return xBar;}
};
template<class T>
const T Gauss<T>::DOSPI=static_cast<T>(2.0L*M_PIl);
//
template<class T>
const T Gauss<T>::RAIZ2PI=sqrt(DOSPI);
//
template<class T>
const T Gauss<T>::RANDMAX1=static_cast<T>(floor(RAND_MAX + 1.5L));
//
template<class T> T Gauss<T>::R;
```

```
template<class T>
inline T Gauss<T>::Rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


template<class T>
T Gauss<T>::randGauss() const
{
 if ( abs(sigma)>0 ) {
    do R=1.0 - Rand01(); while ( R<=0 );
    R=(-2.0)*log(R);
    if (  ( R>0 ) && ( (R=sqrt(R))>0 )  )
       return xBar + sigma*R*cos(DOSPI*Rand01());
 }
 return xBar;
}


int main()
{
 Gauss<long double> g(10.0,4.0);

 for ( size_t i=1 ; i<=10U ; ++i )
     cout<<setw(2)<<i<<" --> "<<setw(8)<<g.randGauss()<<endl;

 return 0;
}
```

Este programa generó el resultado:

```
 1 -->  3.96543
 2 -->  12.0958
 3 -->  12.8516
 4 -->  10.4131
 5 -->  6.95679
 6 -->  6.85706
 7 -->  6.20282
 8 -->  18.5289
 9 -->  8.84015
10 -->  8.27031
```

■

Ejercicio C.16

Dos partículas parten del origen de coordenadas y se mueven a lo largo del eje x realizandos saltos distribuídos de acuerdo a

$$\mathcal{G}(x) \equiv \frac{\mathrm{e}^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$$

Demuestre que la *distancia media* $\langle d_N \rangle$ entre las dos partículas despues de N saltos satisface $\langle d_N \rangle \leq 2N/\sqrt{\pi}$.

Realize una simulación de 1000 saltos repitiendo este proceso 1000 veces.

SOLUCIÓN: La distancia d_N entre las partículas despues de N saltos viene dada por:

$$d_N \equiv \left| \sum_{i=1}^{N} \ell_{1i} - \sum_{i=1}^{N} \ell_{2i} \right| = \left| \sum_{i=1}^{N} (\ell_{1i} - \ell_{2i}) \right|$$

donde ℓ_{pi} es el desplazamiento i-ésimo ($i = 1, 2, \ldots, N$) de la partícula p-ésima ($p = 1, 2$).

$$\begin{aligned}
\langle d_N \rangle &= \prod_{i=1}^{N} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{1i} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{2i} \right) \left[\frac{\mathrm{e}^{-\sum_{i=1}^{N} \left(\ell_{1i}^2 + \ell_{2i}^2 \right)/2}}{(2\pi)^N} \right] \left| \sum_{i=1}^{N} (\ell_{1i} - \ell_{2i}) \right| \\
&= \prod_{i=1}^{N} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{1i} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{2i} \right) \left\{ \frac{\mathrm{e}^{-\sum_{i=1}^{N} \left[\ell_{1i}^2/2 + 2(\ell_{2i} + \ell_{1i}/2)^2 \right]/2}}{(2\pi)^N} \right\} \left| \sum_{i=1}^{N} \ell_{1i} \right| \\
&= \prod_{i=1}^{N} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{1i} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{2i} \right) \left[\frac{\mathrm{e}^{-\sum_{i=1}^{N} \left(\ell_{1i}^2/2 + 2\ell_{2i}^2 \right)/2}}{(2\pi)^N} \right] \left| \sum_{i=1}^{N} \ell_{1i} \right| \\
&= \left(\prod_{i=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{1i} \right) \frac{\mathrm{e}^{-\sum_{i=1}^{N} \ell_{1i}^2/4}}{(2\pi^{1/2})^N} \left| \sum_{i=1}^{N} \ell_{1i} \right| \times \left(\underbrace{\prod_{i=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_{2i} \frac{\mathrm{e}^{-\ell_{2i}^2}}{\sqrt{\pi}}}_{=\,1} \right)
\end{aligned}$$

$$\langle d_N \rangle = \left(\prod_{i=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell_i \right) \frac{\mathrm{e}^{-\sum_{i=1}^{N} \ell_i^2/4}}{(2\pi^{1/2})^N} \left| \sum_{i=1}^{N} \ell_i \right|$$

Puesto que $\left| \sum_{i=1}^{N} \ell_i \right| \leq \sum_{i=1}^{N} |\ell_i|$, es obvio que:

$$|\langle d_N \rangle| = \langle d_N \rangle \leq N \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\ell \, \frac{\mathrm{e}^{-\ell^2/4}}{2\sqrt{\pi}} \, |\ell| = 2N \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\ell \, \frac{\mathrm{e}^{-\ell^2/4}}{2\sqrt{\pi}} \, \ell = 2N \left. \frac{-2\,\mathrm{e}^{-\ell^2/4}}{2\sqrt{\pi}} \right|_{0}^{\infty}$$

Por tanto

$$\boxed{\langle d_N \rangle \leq \frac{2N}{\sqrt{\pi}}} \tag{C.36}$$

El programa, en `C++`, `dosGauss0.cc` realiza la simulación, propuesta arriba, de 1000 saltos repitiendo el proceso 1000 veces:

```
// dosGauss0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iostream>
using namespace std;
const double DOSPI=2.0*M_PI,RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t INTENTOS=1000U,SALTOS=1000U;
size_t Semilla=size_t(time((time_t *)0));
double distancia(),Gauss();


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


int main()
{
 double dMedia=0;
 for ( size_t i=0 ; i<INTENTOS ; ++i ) dMedia+=distancia();
 dMedia/=INTENTOS;

 cout<<"Distancia media (teorica) <= "<<(M_2_SQRTPI*SALTOS)<<endl;
 cout<<"Distancia media (simulada) = "<<dMedia<<endl;

 return 0;
}
```

```
double distancia() // distancia en cada intento
{
 static double p1,p2;
 static size_t i;

 srand(Semilla--);
 for ( i=((p1=0),0) ; i<SALTOS ; ++i ) p1+=Gauss();
 srand(Semilla--);
 for ( i=((p2=0),0) ; i<SALTOS ; ++i ) p2+=Gauss();

 return abs(p1 - p2);
}


double Gauss() // xMedio = 0, sigma = 1.
{
 static double temp;

 do temp=1.0 - rand01(); while ( temp<=0 );

 temp=(-2.0)*log(temp);
 if ( temp>0 ) return sqrt(temp)*cos(DOSPI*rand01());
               return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado:

```
Distancia media (teorica) <= 1128.38
Distancia media (simulada) = 35.2008
```

■

Ejercicio C.17

El presente ejercicio está basado en la discusión presentada en el `Ejercicio C.6`.

El lanzador `L` decide estudiar el comportamiento, al batear, del bateador `B`. Para ello, *pretende* realizar lanzamientos con valores de la rapidez $v_0, v_1, \ldots, v_{N-1}$ tales que $v_{n+1} = v_n + \Delta v$ con $\Delta v > 0$. La información pertinente a estos valores (pelotas bateadas a cada rapidez dada)

son almacenados, con la ayuda del receptor, en registros numerados como $0, 1, \ldots, N-1$ como se indica en la Figura C.4.

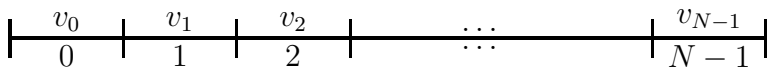


Figura C.4: El intervalo n-ésimo (llamado *registro* en el texto) almacena información sobre el número de pelotas, bateadas por B, las cuales el lanzador L *pretende* haber lanzado con rapidez $v_n = v_0 + n\Delta v$. $\Delta v > 0$. $n = 0, 1, 2, \ldots, N-1$.

La distribución de probabilidades de la rapidez v' con que el lanzador L lanza una pelota cuando se está actualizando el registro n-ésimo viene dada por:

$$\mathrm{P}_{\mathtt{L}}^{(n)}(v') \equiv \frac{\Gamma_{\mathtt{L}}/\pi}{(v'-v_n)^2 + \Gamma_{\mathtt{L}}^2}, \qquad \Gamma_{\mathtt{L}} > 0$$

Obviamente, esta distribución puede generar valores de v' tales que $v' \leq 0$ lo cual corresponde a *pelotas lanzadas hacia atras*. Estos valores se descartan simplemente en el conteo de pelotas lanzadas o/y bateadas.

La distribución de probabilidades de la rapidez v' con que el bateador B batea una pelota viene dada por:

$$\mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v') \equiv \frac{1}{2}\left\{\frac{\Gamma_{\mathtt{B}}/\pi}{(v'-v_<)^2 + \Gamma_{\mathtt{B}}^2} + \frac{\Gamma_{\mathtt{B}}/\pi}{(v'-v_>)^2 + \Gamma_{\mathtt{B}}^2}\right\}; \qquad \Gamma_{\mathtt{B}} > 0$$

Debido a la incertidumbre Δv introducida en el experimento, la probabilidad $p_{v'}^{(\mathtt{B})}$ de que B batee una pelota con rapidez v' viene dada por:

$$\begin{aligned} p_{v'}^{(\mathtt{B})} &\equiv \int_{v'-\Delta v/2}^{v'+\Delta v/2} \mathrm{d}v''\, \mathrm{P}_{\mathtt{B}}(v'') = \int_{v'-\Delta v/2}^{v'+\Delta v/2} \mathrm{d}v''\, \frac{1}{2} \sum_{\ell=<,>} \frac{\Gamma_{\mathtt{B}}/\pi}{(v''-v_\ell)^2 + \Gamma_{\mathtt{B}}^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell=<,>} \left[\arctan\left(\frac{v'-v_\ell+\Delta v/2}{\Gamma_{\mathtt{B}}}\right)\right. \\ &\qquad - \\ &\qquad \left.\arctan\left(\frac{v'-v_\ell-\Delta v/2}{\Gamma_{\mathtt{B}}}\right)\right] \end{aligned}$$

En el presente ejercicio, el programa `espectro0.cc` presenta una simu-

lación con los siguientes parámetros:

$$\texttt{LANZADOR:} \quad \begin{cases} \Gamma_{\mathsf{L}} = 0{,}1 \\ v_0 = 55 \\ N = 111 \\ \Delta v = 1\,, \quad \Longrightarrow \quad v_{N-1} = 66 \end{cases}$$

$$\texttt{BATEADOR:} \quad \begin{cases} \Gamma_{\mathsf{B}} = 1 \\ v_< = 58 \\ v_> = 62 \end{cases}$$

y el conjunto de $N = 111$ registros es "*barrido*" 10^5 veces.

<u>SOLUCIÓN</u>:

```
// espectro0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
#include <stdexcept>
#include <vector>
using namespace std;
typedef unsigned long long ullong;
const double DELTAV=0.1;
const double DELTAV2=DELTAV/2.0;
const double GAMMAB=1.0,GAMMAL=0.1;
const double VME=58.0,VMA=62.0,V0=55.0;
const size_t NREG=111U;
const ullong BARRIDOS=ullong(10.0E4 + 0.5);
```

```
/*****************************************************/
struct Jugador
{
       double gamma;
       static const double RANDMAX1;
       static double Lorentz(double w,double g);
       static double Rand01();

       explicit Jugador(double g): gamma(abs(g)) {}
};
const double Jugador::RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);


inline double Jugador::Rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
/*****************************************************/
```

```
/****************************************************/
struct Bateador: public Jugador
{
       double vMe,vMa;
       static double F(double v,double g)
       {
        return (atan((v + DELTAV2)/g)
                -
                atan((v - DELTAV2)/g))/M_PI;
       }

       Bateador(double vme,double vma,double g)
       : Jugador(g), vMe(vme), vMa(vma) {}

       double dist(double v) const
       {
        try {
             return (Lorentz(v - vMe,gamma)
                     +
                     Lorentz(v - vMa,gamma))/2.0;
        }
        catch(overflow_error) {
        throw overflow_error("double Bateador::dist(double) const");
        }
       }


       double prob(double vPrima) const
       {
        return (F(vPrima - vMe,gamma) + F(vPrima - vMa,gamma))/2.0;
       }
};
/****************************************************/
```

```
/****************************************************/
struct Lanzador: public Jugador
{
       static double R,VPrima;

       explicit Lanzador(double g): Jugador(g) {}
       double rand(double vn);
};
double Lanzador::R,Lanzador::VPrima;
/****************************************************/


int main()
{
 Bateador bat(VME,VMA,GAMMAB);
 Lanzador lan(GAMMAL);
 vector<ullong> reg(NREG);

 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 double v;
 size_t n;
 for ( ullong b=0 ; b<BARRIDOS ; ++b ) {
     for ( n=((v=V0),0) ; n<reg.size() ; v+=((++n),DELTAV) )
         if ( Jugador::Rand01()<bat.prob(lan.rand(v)) ) ++reg[n];
 }
 try {
      for ( n=((v=V0),0) ; n<reg.size() ; v+=((++n),DELTAV) ) {
          cout<<setw(5)<<v<<' ';
          cout<<(0.05 - double(reg[n])/BARRIDOS)<<' ';
          cout<<(0.1*bat.dist(v))<<endl;
      }
 }catch(overflow_error &oe) {
       cerr<<"Division por cero en "<<oe.what()<<endl;
 }
 return 0;
}
```

```
double Jugador::Lorentz(double w,double g)
{
        if ( (w=abs(w))<g ) {
           w/=g;
           w=((1/g)/M_PI)/(1 + w*w);
 } else if ( w>0 ) {
           g/=w;
           w=(g/M_PI)/(w*(1 + g*g));
 } else throw overflow_error("double Lorentz(double,double)");

 return w;
}


double Lanzador::rand(double vn)
{
 do {
     VPrima=vn;
     do R=M_PI*Rand01(); while (  ( R<=0 ) || ( R>=M_PI )  );
     if (  ( R<M_PI_2 ) || ( R>M_PI_2 )  ) VPrima-=gamma/tan(R);
 } while ( VPrima<=0 );

 return VPrima;
}
```

■

Ejercicio C.18

Explicación del método conocido como integración de Montecarlo.

SOLUCIÓN: Considere la suma

$$S_N = \sum_{n=1}^{N} \mathrm{f}\left(x_n\right)$$

donde $\{x_n\}$ son generados por una distribución de probabilidades $\mathrm{P}\left(x\right)$. El valor medio $\langle S_N \rangle$ se reduce a:

$$\langle S_N \rangle = \sum_{n=1}^{N} \langle \mathrm{f} \rangle = \sum_{n=1}^{N} \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{P}\left(x\right) \mathrm{f}\left(x\right)}^{=\ \langle \mathrm{f} \rangle} = N \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{P}\left(x\right) \mathrm{f}\left(x\right)$$

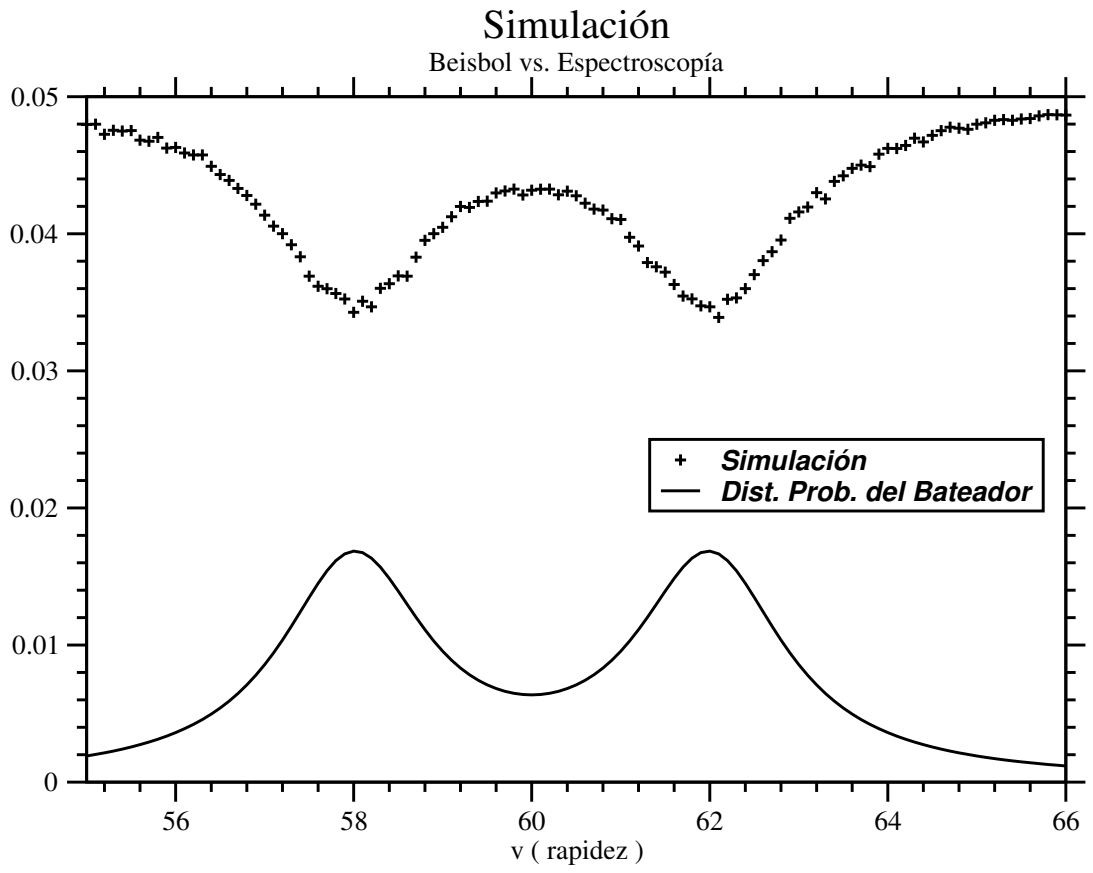


Figura C.5: La Figura ilustra la simulación generada por `espectro0.cc` con el propósito de *" inferir "* la estructura de bateo del bateador.

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{P}\,(x)\, \mathrm{f}\,(x) = \frac{\langle S_N \rangle}{N} = \lim_{\mathcal{N}\to\infty} \frac{\langle S_{\mathcal{N}} \rangle}{\mathcal{N}}} \tag{C.37}$$

En la práctica, y por razones obvias, usamos

$$\boxed{\begin{array}{c} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \mathrm{P}\,(x)\, \mathrm{f}\,(x) \approx \frac{S_N}{N}\,, \qquad\qquad N \gg 1 \\ \text{¡ Este resultado es exacto cuando f es la función constante !} \end{array}} \tag{C.38}$$

Algunos ejemplos típicos son:

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\ \mathrm{sen}\,(\pi x) \approx \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \mathrm{sen}\,(\pi x_n)\ , \qquad \mathrm{P}\,(x) = \Theta\,(x)\,\Theta\,(1-x)$$

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{\mathrm{e}^{-x}}{x^{7/3}+1} \approx \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \frac{1}{x_n^{7/3}+1}\,, \qquad \mathrm{P}\,(x) = \Theta\,(x)\ \mathrm{e}^{-x}$$

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \frac{\mathrm{sen}\,\theta}{\theta \ln\theta + \cos\theta} \approx \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \frac{2}{\theta_n \ln\theta_n + \cos\theta_n}\,, \qquad \mathrm{P}\,(\theta) = \Theta\,(\theta)\,\Theta\,(\pi-\theta)\ \frac{1}{2}\ \mathrm{sen}\,\theta$$

Para tener una idea de lo *" grueso "* del error cometido y/o aprender a usar la técnica al momento de minimizar errores es conveniente estudiar la conducta de la desviación standard $\Delta\,(S_N/N) = \sqrt{\left\langle (S_N/N)^2 \right\rangle - \langle S_N/N \rangle^2}$:

$$\frac{\Delta S_N}{\langle S_N \rangle} = \frac{\Delta\,(S_N/N)}{\langle S_N/N \rangle} = \frac{\sqrt{\langle S_N^2 \rangle - \langle S_N \rangle^2}}{\langle S_N \rangle}$$

$$\begin{aligned} \left\langle S_N^2 \right\rangle &= \left\langle \left[\sum_{n=1}^{N} \mathrm{f}\,(x_n) \right]^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{n=1}^{N} \mathrm{f}^2\,(x_n) \right\rangle + \left\langle \sum_{\substack{m,n=1 \\ m\neq n}}^{N} \mathrm{f}\,(x_m)\, \mathrm{f}\,(x_n) \right\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{N} \left\langle \mathrm{f}^2 \right\rangle + \sum_{\substack{m,n=1 \\ m\neq n}}^{N} \langle \mathrm{f} \rangle \langle \mathrm{f} \rangle = N \left\langle \mathrm{f}^2 \right\rangle + N\,(N-1)\,\langle \mathrm{f} \rangle^2 \\ &= N \left(\left\langle \mathrm{f}^2 \right\rangle - \langle \mathrm{f} \rangle^2 \right) + N^2\,\langle \mathrm{f} \rangle^2 \end{aligned}$$

Por tanto

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\Delta S_N}{\langle S_N \rangle} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\Delta f}{\langle f \rangle} \\ \Delta \mathrm{f} &\equiv \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \mathrm{P}(x) \left[\mathrm{f}(x) - \langle \mathrm{f} \rangle \right]^2} \end{aligned}} \tag{C.39}$$

De la forma del resultado anterior podemos aprender que *algunas* recomendaciones para minimizar el impacto de evaluar una integración de Montecarlo son:

- Aumentar el número de puntos usados en la integración: $N \gg 1$. Note que ello puede aumentar el tiempo necesario para completar la integración así como la dependencia $N^{-1/2}$ sugiere que cada cifra significativa requiere, *" en principio y no necesariamente "*, incrementar N por un factor 10^2.

- La presencia de Δf en el numerador sugiere reescribir la integral de manera que el integrando sea lo mas parecido posible a una función constante. Ello puede ser útil en la reducción de N. Por ejm. . . :

$$\int_0^1 \mathrm{d}x \, \mathrm{sen}\left(\frac{\pi}{2} x^7\right) = \overbrace{\int_0^1 \mathrm{d}x \, x}^{=1/2} - \int_0^1 \mathrm{d}x \left[x - \mathrm{sen}\left(\frac{\pi}{2} x^7\right) \right]$$

El integrando de la segunda integral es mas *" pequeño "* que el de la integral original (miembro izquierdo).

$$\int_0^a \mathrm{d}x \, \mathrm{f}(x) = \int_0^a \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{f}(x) + \mathrm{f}(a-x)}{2}$$

El integrando de la segunda integral *" varía mas suavemente "* que el de la integral original (miembro izquierdo). Esto se conoce como *el método de agregar " la reflejada en el espejo "*.

En general, la integración de Montecarlo es el último método a usar después que todos los *tradicionales* fallan. En particular, en el caso multidimensional (la formulación del método es similar al caso unidimensional) la dependencia en N llega a ser prohibitiva (para integraciones habituales: Simpson, etc. . .) mientras la integración de Montecarlo aun guarda su dependencia $\Delta S_N / \langle S_N \rangle \propto N^{-1/2}$.

■

Ejercicio C.19

Evalue, usando números al azar, la integral

$$\mathcal{I} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-0{,}005x^2} \left[x^3 \operatorname{sen}(4x) + \ln\left(1 + \left| x \cos\left(\left|\operatorname{sen}(x)\right|^{3/13} \right) \right|^8 \right) \right]$$

<u>SOLUCIÓN</u>: Aprovechamos la presencia del *factor Gaussiano* $\mathrm{e}^{-0{,}005x^2}$ para introducir la distribución de probabilidades $\mathrm{P}(x)$:

$$\mathrm{P}(x) \equiv \frac{\mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}\;\sigma}\,, \qquad \sigma \equiv 10\,; \qquad \left(\text{Note que } \mathrm{e}^{-0{,}005x^2} = \sqrt{2\pi}\;\sigma\,\mathrm{P}(x) \right) \tag{C.40}$$

y consideremos la suma

$$S_N \equiv \sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{f}(x_n)$$

donde $\mathrm{f}(x)$ es la función que multiplica el factor Gaussiano en el integrando de la integral $\mathcal{I}$:

$$\mathrm{f}(x) \equiv x^3 \operatorname{sen}(4x) + \ln\left(1 + \left| x \cos\left(\left|\operatorname{sen}(x)\right|^{3/13} \right) \right|^8 \right)$$

El conjunto $\{x_n,\ n = 0, 1, 2, \ldots, N-1\}$ contiene valores generados con la distribución Gaussiana (C.40). Es claro que

$$\mathcal{I} \approx \sqrt{2\pi}\;\overbrace{\sigma}^{=10} \left[\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{f}(x_n) \right]$$

El programa, en `C++`, `intGauss0.cc` implementa el resultado anterior:

```
// intGauss0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
const double DOSPI=2.0*M_PI,RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const double SIGMA=10.0;
const double RAIZDOSPI_S=sqrt(DOSPI)*SIGMA;
const size_t N=10000000U; // Diez millones.
double f(double x),Gauss();
```

```
inline double rand01() // Numeros "al azar" en [0,1).
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline double seno(double x) // Para evitar argumentos grandes.
{
 x=M_PI_2 - x;
 if ( x<0 ) x=(-x);
 return ( x>DOSPI ) ? cos(fmod(x,DOSPI)):cos(x);
}


int main()
{
 srand(size_t(time((time_t *)0)));

 double suma=0;
 size_t j=1U,n=1U;
 while ( n<=N ) {
       suma+=f(Gauss());
       if ( n==j ) {
          cout<<setw(8)<<n<<" -->  "<<((RAIZDOSPI_S*suma)/n)<<endl;
          ++(j<<=1U);
       }
       ++n;
 }
 cout<<endl<<setw(8)<<N<<" -->  "<<((RAIZDOSPI_S*suma)/N)<<endl;

 return 0;
}


double f(double x)
{
 static const double val3_13=3.0/13.0;
 static double temp;
```

```
 temp=abs(seno(x));
 if ( temp>0 ) temp=pow(temp,val3_13); else temp=0;
 temp=abs(x*cos(temp));
 if ( temp>0 ) temp=1.0 + pow(temp,8.0); else temp=1.0;

 return x*x*x*seno(4.0*x) + log(temp);
}


double Gauss() // xMedio = 0.
{
 static double temp;

 do temp=1.0 - rand01(); while ( temp<=0 );
 temp=(-2.0)*log(temp);

 return ( temp>0 ) ? (SIGMA*sqrt(temp)*cos(DOSPI*rand01())):0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado (la columna izquierda reporta el número de iteraciones mientras la columna derecha muestra el resultado correspondiente):

```
       1 -->  2656.16
       3 -->  753.23
       7 -->  43368.8
      15 -->  19230.3
      31 -->  13181.5
      63 -->  2540.52
     127 -->  5103.58
     255 -->  -1476.58
     511 -->  -2894.24
    1023 -->  460.933
    2047 -->  -230.717
    4095 -->  213.973
    8191 -->  207.83
   16383 -->  332.642
   32767 -->  124.795
   65535 -->  -170.383
  131071 -->  -50.5289
  262143 -->  62.5107
  524287 -->  135.59
```

```
 1048575 -->  166.115
 2097151 -->  193.75
 4194303 -->  220.566
 8388607 -->  222.899

10000000 -->  233.348
```

Varios intentos demuestran que el resultado es cercano o ≈ 268. ■

Ejercicio C.20

Este ejercicio es similar al anterior (`Ejercicio C.19`) salvo que resolvemos una integral cuyo resultado se conoce pero su integrando *oscila fuertemente*:

$$\mathcal{J} \equiv \int_0^\pi \mathrm{d}x \ \mathrm{sen}\,(199x)$$

SOLUCIÓN: $\mathcal{J}$ es evaluada segun

$$\mathcal{J} = \int_0^\pi \mathrm{d}x \ \mathrm{sen}\,(199x) = \left.\frac{-\cos\,(199x)}{199}\right|_0^\pi = \frac{2}{199} \approx 0{,}010050251$$

Procediendo en forma similar al ejercicio anterior:

$$\mathcal{J} = \pi \int_0^\pi \mathrm{d}x \, \frac{1}{\pi} \ \mathrm{sen}\,(199x) \approx \pi \, \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathrm{sen}\,(199x_n)$$

donde el conjunto de valores $\{x_n\}$ es generado por la distribución de probabilidades:

$$\mathrm{P}\,(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\pi}\,, & \text{si} \quad 0 \le x < \pi \\ 0\,, & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

El programa, en `C++`, `intOsc0.cc` implementa el resultado anterior:

```
// intOsc0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
const double DOSPI=2.0*M_PI,EXACTO=2.0/199.0;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
```

```
const size_t N=10000000U; // Diez millones.


inline double rand01() // Numeros "al azar" en [0,1).
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline double f(double x) // Para evitar argumentos grandes.
{
 x=M_PI_2 - 199.0*x;
 if ( x<0 ) x=(-x);
 return ( x>DOSPI ) ? cos(fmod(x,DOSPI)):cos(x);
}


int main()
{
 srand(size_t(time((time_t *)0)));

 double suma=0;
 size_t j=1U,n=1U;
 while ( n<=N ) {
       suma+=f(M_PI*rand01());
       if ( n==j ) {
          cout<<setw(8)<<n<<" -->  "<<(M_PI*(suma/n))<<endl;
          ++(j<<=1U);
       }
       ++n;
 }
 cout<<endl<<setw(8)<<N<<" -->  "<<(M_PI*(suma/N))<<';';
 cout<<"   Valor EXACTO = "<<EXACTO<<endl;

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado (la columna izquierda reporta el número de iteraciones mientras la columna derecha muestra el resultado correspondiente):

```
       1 -->  -1.36889
```

```
       3 -->  -1.05353
       7 -->  0.324021
      15 -->  0.20165
      31 -->  0.23342
      63 -->  -0.0901957
     127 -->  0.18167
     255 -->  0.0330276
     511 -->  -0.0391006
    1023 -->  -0.00955283
    2047 -->  0.00548513
    4095 -->  -0.0136338
    8191 -->  0.016558
   16383 -->  -0.0028808
   32767 -->  0.0137717
   65535 -->  0.0096126
  131071 -->  0.014193
  262143 -->  0.0121142
  524287 -->  0.00391622
 1048575 -->  0.00745356
 2097151 -->  0.00723829
 4194303 -->  0.00877376
 8388607 -->  0.0101528

10000000 -->  0.010127;   Valor EXACTO = 0.0100503
```

Note que solo despues de alrededor de 10^5 iteraciones el resultado puede ser cercano al valor exacto. ■

Ejercicio C.21

Evalue, usando el método de Montecarlo, la integral

$$\frac{4}{\pi}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{x^2+1} = 1$$

SOLUCIÓN: Usando el método de Montecarlo, la integral se reduce a

$$\frac{4}{\pi}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{x^2+1} \approx \frac{4}{\pi}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{x_n^2+1}$$

donde $\{x_n\}$ son generados por la distribución $\Theta(x)\,\Theta(1-x)$.

Además, en la evaluación numérica evaluaremos la integral en otra forma equivalente pero que minimiza errores

$$\begin{aligned}\frac{4}{\pi}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{x^2+1} &= \frac{4}{\pi}\int_0^1 \mathrm{d}x\,\frac{1}{2}\left[\frac{1}{x^2+1}+\frac{1}{(1-x)^2+1}\right]\\ &= \frac{4}{\pi}\int_0^1 \mathrm{d}x\,\frac{x(x-1)+3/2}{[x^2+1][x(x-2)+2]}\end{aligned}$$

En resumen, evaluaremos simultaneamente las funciones:

$$\begin{aligned}\mathrm{f}_<(x) &= \frac{4}{\pi}\frac{1}{x^2+1}\\ \mathrm{f}_>(x) &= \frac{4}{\pi}\frac{x(x-1)+3/2}{[x^2+1][x(x-2)+2]}\end{aligned}$$

usando la integración de Montecarlo:

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\,\mathrm{f}_{\substack{<\\>}}(x) \approx \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathrm{f}_{\substack{<\\>}}(x_n)$$

donde $\{x_n\}$ es un conjunto de valores generados por una distribución uniforme de probabilidades en el intervalo $[0,1)$. Note que $\mathrm{f}_>(x)$ varía suavemente en comparación con $\mathrm{f}_<(x)$ (ver Figura C.6). El programa, en `C++`, `intEspejo0.cc` ilustra la discusión anterior:

```
// intEspejo0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
const double FACTOR=4.0/M_PI,RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t N=100000U; // Cien mil.


inline void funciones(double x, double &fMe,double &fMa)
{
 fMe=1.0 + x*x;
 fMa=(x*(x - 1.0) + 1.5)/(fMe*(x*(x - 2.0) + 2.0));
 fMe=1.0/fMe;
```

```
}


inline double rand01() // Numeros "al azar" en [0,1).
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


int main()
{
 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 double fMenos,fMas,mas=0,menos=0;
 size_t j=1U,n=1U;
 while ( n<=N ) {
       funciones(rand01(),fMenos,fMas);
       menos+=fMenos;
       mas+=fMas;
       if ( n==j ) {
          cout<<setw(6)<<n;
          cout<<" -->  "<<(FACTOR*(menos/n));
          cout<<" -->  "<<(FACTOR*(mas/n))<<endl;
          ++(j<<=1U);
       }
       ++n;
 }
 cout<<endl<<setw(6)<<N;
 cout<<" -->  "<<(FACTOR*(menos/N));
 cout<<" -->  "<<(FACTOR*(mas/N))<<endl;

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado (la columna izquierda reporta el número de iteraciones mientras las columnas central y derecha corresponden a la integración de $f_<(x)$ y $f_>(x)$ respectivamente:

```
     1 -->  0.667293 -->  0.968859
     3 -->  0.826289 -->  0.984526
     7 -->  0.977645 -->  0.994102
    15 -->  0.972905 -->  0.991206
    31 -->  0.988225 -->  0.994713
```

```
   63 -->  0.980508 -->  0.99483
  127 -->  0.981211 -->  0.997733
  255 -->  0.991301 -->  0.996184
  511 -->  1.00783  -->  0.99782
 1023 -->  1.00066  -->  0.999146
 2047 -->  0.994604 -->  0.999819
 4095 -->  0.995548 -->  0.99985
 8191 -->  0.99802  -->  1.00007
16383 -->  0.998513 -->  0.999969
32767 -->  0.998367 -->  0.999984
65535 -->  0.999107 -->  0.999875
```

10(

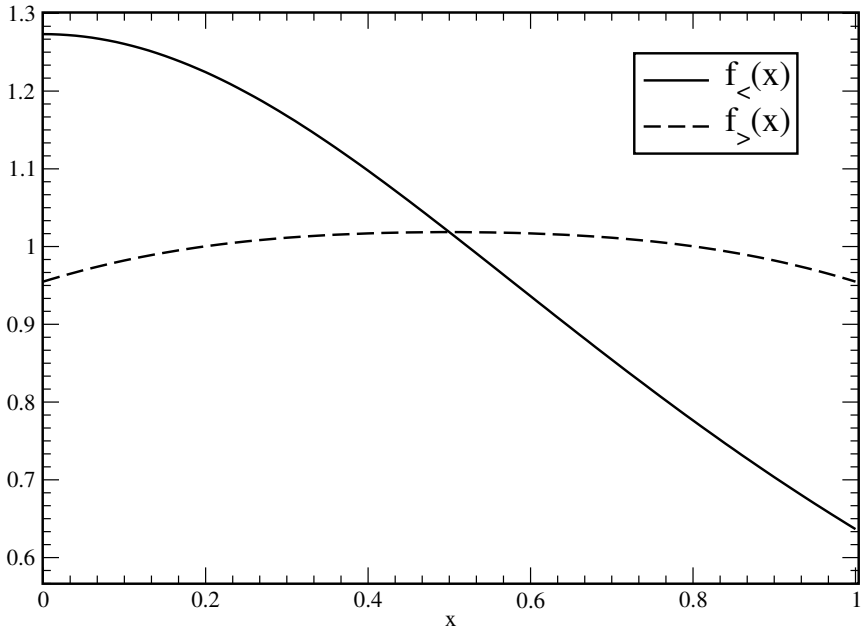


Figura C.6: Ilustración de $f_{<}(x)$ y $f_{>}(x)$. Note que $f_{>}(x)$ varía suavemente en comparación con $f_{<}(x)$ lo cual garantiza una convergencia mas rápida, de la integración de Montecarlo, para obtener el mismo resultado.

■

Ejercicio C.22

Evalue

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\frac{\cos x}{|x|^{30/7}+1}$$

SOLUCIÓN: Es conveniente usar la identidad

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\mathrm{f}\left(x\right)=\int_0^1 \mathrm{d}x\,\left[\mathrm{f}\left(x\right)+\frac{\mathrm{f}\left(1/x\right)}{x^2}\right]$$

y varios de los recursos de los ejercicios previos. Es decir

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\frac{\cos x}{|x|^{30/7}+1}$$
$$=$$
$$\int_0^1 \mathrm{d}x\,\left[\frac{\cos x}{|x|^{30/7}+1}+\frac{1}{x^2}\,\frac{\cos\left(1/x\right)}{|1/x|^{30/7}+1}\right]=\int_0^1 \mathrm{d}x\,\frac{\cos\left(x\right)+|x|^{16/7}\cos\left(1/x\right)}{|x|^{30/7}+1}$$
$$=$$
$$\int_0^1 \mathrm{d}x\,\frac{1}{2}\left\{\frac{\cos\left(x\right)+|x|^{16/7}\cos\left(1/x\right)}{|x|^{30/7}+1}+\frac{\cos\left(1-x\right)+|1-x|^{16/7}\cos\left(1/\left[1-x\right]\right)}{|1-x|^{30/7}+1}\right\}$$

```
// varios0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
const double DOSPI=2.0*M_PI,FACTOR0=16.0/7.0,FACTOR1=30.0/7.0;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t N=1000000U; // Un millon.


inline double coseno(double x)
{
 return ( (x=abs(x))>DOSPI ) ? cos(fmod(x,DOSPI)):cos(x);
}
```

```
inline double f(double x)
{
 if ( (x=abs(x))>0 ) return (cos(x) + pow(x,FACTOR0)*coseno(1.0/x))
                            /
                            (pow(x,FACTOR1) + 1.0);
                     return 1.0;
}


inline double ff(double x)
{
 return (f(x) + f(1.0 - x))/2.0;
}


inline double rand01() // Numeros "al azar" en [0,1).
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


int main()
{
 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 double suma=0;
 size_t j=1U,n=1U;
 while ( n<=N ) {
       suma+=ff(rand01());
       if ( n==j ) {
          cout<<setw(7)<<n<<"  -->  "<<(suma/n)<<endl;
          ++(j<<=1U);
       }
       ++n;
 }

 cout<<setw(7)<<N<<"  -->  "<<(suma/N)<<endl;

 return 0;
}
```

A continuación se muestra el resultado generado por el programa `varios0.cc`:

```
      1  -->  0.75849
      3  -->  0.7812
      7  -->  0.770835
     15  -->  0.777473
     31  -->  0.77866
     63  -->  0.779102
    127  -->  0.77937
    255  -->  0.779142
    511  -->  0.780438
   1023  -->  0.781985
   2047  -->  0.782424
   4095  -->  0.782629
   8191  -->  0.782966
  16383  -->  0.782889
  32767  -->  0.783049
  65535  -->  0.783036
 131071  -->  0.782994
 262143  -->  0.783032
 524287  -->  0.783022
1000000  -->  0.783048
```

El resultado es, razonablemente (3 cifras decimales), cercano a 0,783. ■

Ejercicio C.23

Evalue π mediante el método de Montecarlo.

SOLUCIÓN: π puede ser escrito, y aproximado, en la forma:

$$\pi = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \int_{-1}^{1} \mathrm{d}y \; \underset{\sqrt{x^2+y^2}<1}{} = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \int_{-1}^{1} \mathrm{d}y \, \Theta\left(1 - \sqrt{x^2+y^2}\right)$$

$$= 4 \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \int_{-1}^{1} \mathrm{d}y \, \frac{1}{4} \Theta\left(1 - \sqrt{x^2+y^2}\right) \approx 4 \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \Theta\left(1 - \sqrt{x_n^2+y_n^2}\right)$$

donde $\{(x_n, y_n)\}$ son puntos del plano generados por la distribución de probabilidades $\Theta(1-|x|)\,\Theta(1-|y|)/4$.

$N_\odot \equiv \sum_{n=1}^{N} \Theta\left(1 - \sqrt{x_n^2+y_n^2}\right)$ es el número de puntos en el círculo, con centro en $(0,0)$ y radio 1, tal que π es aproximado por

$$\pi \approx 4 \frac{N_\odot}{N}$$

En realidad el resultado es obvio puesto que la probabilidad de que un punto quede dentro del círculo es $\pi/4$ tal que el número medio de puntos dentro del círculo viene dado por:

$$\langle N_\odot \rangle = N\,\frac{\pi}{4} \quad \text{y, además} \quad \Delta N_\odot = \sqrt{N\,\frac{\pi}{4}\left(1-\frac{\pi}{4}\right)}$$

tal que

$$\frac{\Delta N_\odot}{\langle N_\odot \rangle} \equiv \frac{\Delta\pi}{\pi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\,\sqrt{\frac{4}{\pi}-1} \approx \frac{0{,}5227232002}{\sqrt{N}}$$

El programa, en `C++`, `pi0.cc` evalua π con el método explicado en este `Ejercicio`:

```
// pi0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const size_t PUNTOS=400U;


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
int main()
{
 cout<<setprecision(7);

 size_t nc=0;
 for ( size_t n=0 ; n<PUNTOS ; ++n )
     if ( hypot(2.0*rand01() - 1.0,2.0*rand01() - 1.0)<1.0 ) ++nc;

 cout<<"         Circulo = "<<nc<<endl;
 cout<<"      No Circulo = "<<(PUNTOS - nc)<<endl;
 const double pi=4.0*(double(nc)/PUNTOS);
 cout<<"              PI = "<<pi<<endl;
 cout<<"Error Porcentual = "<<(abs(1.0L - pi/M_PIl)*100.0L)<<" %\n";

 return 0;
}
```

con el resultado

```
         Circulo = 324
      No Circulo = 76
              PI = 3.24
Error Porcentual = 3.132403 %
```

El resultado es ilustrado en la Figura C.7. ■

Ejercicio C.24

Evalue, por el método de Montecarlo, la integral

$$\int_{|\vec{k}-\vec{k}_0|<12} \mathrm{d}^2\vec{k}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(k_x+k_y\mathrm{i})^{3/2}+\left(k+\left|2\vec{k}+\vec{r}\right|\right)^{5/7}}\,; \qquad \vec{k}_0=(1,-2)\ , \quad \vec{r}=(10,-3)$$

<u>SOLUCIÓN</u>: De acuerdo al método de Montecarlo:

$$\int_{|\vec{k}-\vec{k}_0|<12} \mathrm{d}^2\vec{k}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(k_x+k_y\mathrm{i})^{3/2}+\left(k+\left|2\vec{k}+\vec{r}\right|\right)^{5/7}}$$

$$= 144\pi \int_{|\vec{k}-\vec{k}_0|<12} \mathrm{d}^2\vec{k}\, \left(\frac{1}{144\pi}\right) \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(k_x+k_y\mathrm{i})^{3/2}+\left(k+\left|2\vec{k}+\vec{r}\right|\right)^{5/7}}$$

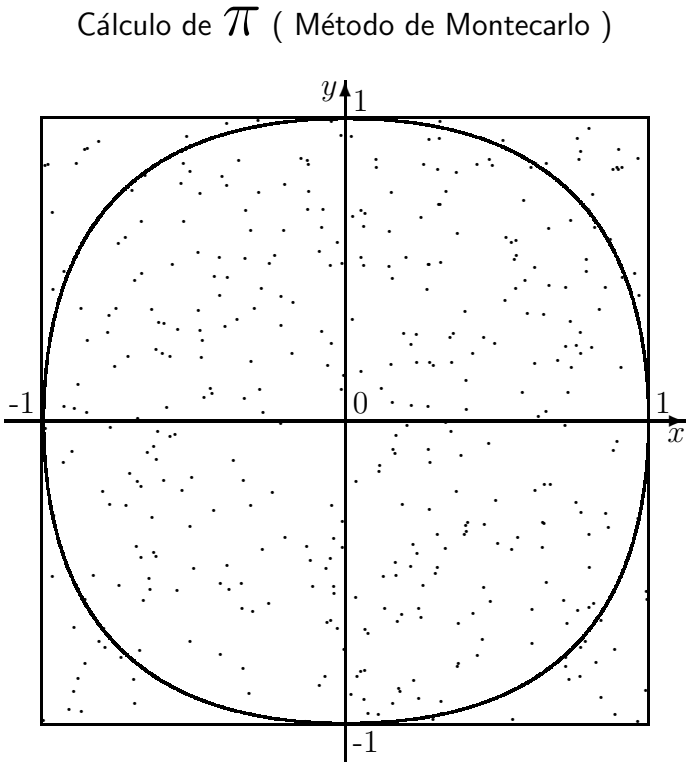


Figura C.7: 400 puntos generados, al azar, uniformemente en el cuadrado. 324 están " *dentro* " del círculo $\left\{(x,y) \ni \sqrt{x^2+y^2} < 1\right\}$ tal que $\boxed{\pi \approx 4 \times (324/400) = 3{,}24}$ con error porcentual de 3,132403 %.

$$\approx$$

$$144\pi \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_n \cdot \vec{r}}}{\left(k_{nx} + k_{ny}\mathrm{i}\right)^{3/2} + \left(k_n + \left|2\vec{k}_n + \vec{r}\right|\right)^{5/7}} \tag{C.41}$$

donde $\left\{\vec{k}_n \ni n = 1, 2, \ldots, N\right\}$ son puntos, en el plano $k_x k_y$, generados por la distribución uniforme de probabilidades $\Theta\left(12 - \left|\vec{k} - \vec{k}_0\right|\right)/144\pi$. Es decir (ver expresión (C.31)),

$$\begin{aligned} k_x &= k_{0x} + 12\sqrt{\xi_r}\ \cos\left(2\pi\xi_\theta\right) \\ k_y &= k_{0y} + 12\sqrt{\xi_r}\ \operatorname{sen}\left(2\pi\xi_\theta\right) \end{aligned}$$

donde ξ_r y ξ_θ son cantidades generadas por una distribución de probabilidades uniforme en el intervalo $[0, 1)$.

Usando los resultados discutidos arriba; el programa, en `C++`, `complejo0.cc` evalua la integral de acuerdo a la expresión (C.41) y mediante el uso de 10^8 puntos:

```
// complejo0.cc
#include <cmath>
#include <complex>
#include <cstdlib>
#include <iomanip>
#include <iostream>
using namespace std;
typedef complex<double> Complejo;
typedef unsigned long long ullong;
```

```
/*************************************************************/
class Vector2D
{
      private:
              double cx,cy; // componentes cartesianas.
      public:
             // Constructores
             Vector2D(): cx(0), cy(0) {}
             Vector2D(double valX,double valY);

             // Metodos
             double abs() const { return hypot(cx,cy); }
             double& x() { return cx; }
             double x() const { return cx; }
             double& y() { return cy; }
             double y() const { return cy; }

             // Operadores
             Vector2D operator +(const Vector2D &v) const;
             double operator *(const Vector2D &v) const;
             Vector2D operator *(double escalar) const;
             Vector2D& operator +=(const Vector2D &v);

             // Friends
             friend Vector2D operator *(double escalar,
                                        const Vector2D &v);
};
/*************************************************************/
const Complejo I(0,-1.0);
const double DOSPI=2.0*M_PI,CINCO7=5.0/7.0;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const Vector2D K0(1.0,-2.0),R(10.0,-3.0);
Complejo Den,Num;
double Fase,XiR;
Vector2D K;


inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
inline const Vector2D& randVector2D()
{
 K=K0;
 if ( (XiR=12.0*sqrt(rand01()))>0 ) {
    Fase=DOSPI*rand01();
    K+=Vector2D(XiR*cos(Fase),XiR*sin(Fase));
 }
 return K;
}


inline Complejo f(const Vector2D &k)
{
 Num=exp(I*(k*R));
 Den=pow(k.x() + k.y()*I,1.5)
     +
     pow(k.abs() + (2.0*k + R).abs(),CINCO7);
 return Num/Den;
}


int main()
{
 const double factor=144.0*M_PI;
 const int w=10;
 const ullong np=100000000UL; // 100 millones: Numero de puntos

 Complejo s=0; // Para acumular la suma.
 ullong j=1ULL,n=0;
 while ( n<np ) {
       s+=f(randVector2D());
       if ( ++n!=j ) continue;
       cout<<setw(w)<<n<<" --> ";
       cout<<(factor*(s/double(n)))<<endl;
       ++(j<<=1ULL);
 }
 cout<<setw(w)<<n<<" --> "<<(factor*(s/double(n)))<<endl;

 return 0;
}
```

```
inline Vector2D::Vector2D(double valX,double valY)
: cx(valX), cy(valY) {}


inline Vector2D Vector2D::operator +(const Vector2D &v) const
{
 return Vector2D(cx + v.cx,cy + v.cy);
}


inline double Vector2D::operator *(const Vector2D &v) const
{
 return cx*v.cx + cy*v.cy;
}


inline Vector2D Vector2D::operator *(double escalar) const
{
 return Vector2D(cx*escalar,cy*escalar);
}


inline Vector2D& Vector2D::operator +=(const Vector2D &v)
{
 cx+=v.cx;
 cy+=v.cy;
 return *this;
}


inline Vector2D operator *(double escalar,const Vector2D &v)
{
 return v*escalar;
}
```

El programa `complejo0.cc` genera el siguiente resultado:

```
       1 --> (13.6729,15.3202)
       3 --> (7.33065,6.26289)
       7 --> (5.25949,8.27589)
      15 --> (3.68587,4.92635)
      31 --> (-1.02987,0.542208)
      63 --> (-2.66109,0.533909)
     127 --> (-3.5832,-2.05837)
     255 --> (-1.55049,-5.00588)
     511 --> (1.89149,-1.489)
    1023 --> (-0.00733835,-2.07264)
    2047 --> (-0.0937291,-1.32297)
    4095 --> (-0.107607,-0.933332)
    8191 --> (-0.227835,-0.365493)
   16383 --> (-0.0251378,-0.0901875)
   32767 --> (0.255396,-0.340971)
   65535 --> (-0.0046882,-0.570189)
  131071 --> (-0.0315184,-0.271452)
  262143 --> (0.00660147,-0.175767)
  524287 --> (-0.042262,-0.0970711)
 1048575 --> (-0.0201318,-0.151981)
 2097151 --> (0.0153756,-0.158944)
 4194303 --> (0.0295975,-0.160655)
 8388607 --> (0.0215885,-0.137395)
16777215 --> (0.00673676,-0.146419)
33554431 --> (0.00615091,-0.154857)
67108863 --> (-0.00573118,-0.161054)
100000000 --> (-0.00531163,-0.158173)
```

Podemos observar que una aproximación al resultado es $\boxed{-0{,}005 - 0{,}158\mathrm{i}}$. ■

Apéndice D

Teoría de Ginzburg–Landau

D.1. Magnetismo Localizado

En este apéndice estamos interesados en la teoría de Ginzburg–Landau que describe, en forma aproximada, la *variación espacial* de la magnetización (*momento magnético medio por unidad de volumen*)[1] en un sistema de espines localizados. Tal aproximación es válida en las *inmediaciones de la temperatura de transición magnética* T_c $\Big(T \lesssim T_c \Big)$ y permite derivar, en forma simple, una ecuación en derivadas parciales para la variación espacial de la magnetización (*ecuación de Ginzburg–Landau*) a partir de las ecuaciones que describen el magnetismo localizado en la *aproximación de campo medio o campo molecular*. La descripción de Ginzburg–Landau es necesaria en sistemas con fronteras (superficies, etc...), materiales impuros, etc... y puede mostrarse (como veremos mas abajo) que corresponde, en general, a *variaciones espaciales suaves* de las amplitudes que *modulan* una magnetización subyacente dada. Tal conducta es consecuencia de la aproximación $T \lesssim T_c$.

El punto de partida es el *hamiltoniano de Heisenberg* el cual describe un sistema interactuante de momentos magnéticos localizados en los sitios de una red cristalina dada:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\left(\vec{m} - \vec{n}\right) \vec{\mathsf{S}}_{\vec{m}} \cdot \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \, ; \qquad \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) = \mathrm{J}\left(-\vec{m}\right) \, , \quad \mathrm{J}\left(\vec{0}\right) = 0 \tag{D.1}$$

$\vec{m}$ y $\vec{n}$ son *vectores de la red cristalina*. El operador de espin $\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}}$, en un sitio dado $\vec{n}$, tiene asociado un *momento magnético* $\vec{\mu}_{\vec{n}} = -g\mu_{\mathrm{B}}\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}}$ y satisface $\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \cdot \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} = S\left(S+1\right)$, $\forall \vec{n}$ donde S es un número positivo entero o semientero. g es el *factor de Landé* y μ_{B} es el *magnetón de Bohr*. $\mathrm{J}\left(\vec{m} - \vec{n}\right)$ es la constante de acoplamientos *entre* los sitios $\vec{m}$ y $\vec{n}$.

[1] En particular, es posible derivar versiones adecuadas a otros fenómenos tales como superconductividad, ondas de densidad de espin, ondas de densidad de carga, etc...

En la aproximación de campo molecular, (D.1) se reduce a

$$H_{cm} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\left(\vec{m}-\vec{n}\right) \left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{m}} \right\rangle \cdot \left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \right\rangle - \sum_{\vec{n}} \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \cdot \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n}-\vec{m}\right) \left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{m}} \right\rangle$$

el cual describe un sistema de espines independientes en presencia de un *campo magnético efectivo*

$$\vec{\mathrm{H}}^{(ef)}_{\vec{n}} \equiv -\frac{1}{g\mu_{\mathrm{B}}} \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n}-\vec{m}\right) \left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{m}} \right\rangle \tag{D.2}$$

Por simplicidad solo consideramos el caso en que $\left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \right\rangle$ es paralelo al eje z:

$$\left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \right\rangle = \left\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \right\rangle \hat{z}$$

$\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle$ viene dado por ($\beta \equiv 1/\mathrm{k_B}T$)

$$\left\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \right\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_{cm}} \mathsf{S}_{\vec{n}z}\right)}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta H_{cm}}} = \frac{\mathrm{Tr}_{\vec{n}}\left(\mathrm{e}^{\beta \mathsf{S}_{\vec{n}z} h_{\vec{n}}} \mathsf{S}_{\vec{n}z}\right)}{\mathrm{Tr}_{\vec{n}}\,\mathrm{e}^{\beta \mathsf{S}_{\vec{n}z} h_{\vec{n}}}} = \mathrm{k_B}T \frac{\partial \ln Z_{\vec{n}}}{\partial h_{\vec{n}}} \tag{D.3}$$

donde $h_{\vec{n}} \equiv \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n}-\vec{m}\right) \langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \rangle$. $Z_{\vec{n}}$ es la *función de partición* asociada al sitio $\vec{n}$:

$$\begin{aligned} Z_{\vec{n}} &= \mathrm{Tr}_{\vec{n}}\,\mathrm{e}^{\beta \mathsf{S}_{\vec{n}z} h_{\vec{n}}} = \sum_{\ell=-S}^{S} \mathrm{e}^{\beta \ell h_{\vec{n}}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta S h_{\vec{n}}}\left[\mathrm{e}^{\beta(2S+1)h_{\vec{n}}} - 1\right]}{\mathrm{e}^{\beta h_{\vec{n}}} - 1} \\ &= \frac{\mathrm{senh}\left(\beta\left[2S+1\right]h_{\vec{n}}/2\right)}{\mathrm{senh}\left(\beta h_{\vec{n}}/2\right)} \end{aligned}$$

Insertando este resultado en la expresión (D.3) se obtiene

$$\left\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \right\rangle = S\,\mathrm{B_S}\left(\beta S h_{\vec{n}}\right) = S\,\mathrm{B_S}\left(\beta S \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n}-\vec{m}\right) \left\langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \right\rangle\right) \tag{D.4}$$

donde $\mathrm{B_S}\left(x\right)$ es la *función de Brillouin de orden* S

$$\mathrm{B_S}\left(x\right) \equiv \frac{2S+1}{2S}\,\mathrm{cotanh}\left(\frac{2S+1}{2S}\,x\right) - \frac{1}{2S}\,\mathrm{cotanh}\left(\frac{x}{2S}\right)$$

Cuando $T \lesssim T_c$ ($\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle \approx 0$ y $h_{\vec{n}} \approx 0\ \forall \vec{n}$), la ecuación (D.4) es, hasta el primer orden *no trivial*, reemplazada por[2]

$$\left\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \right\rangle = \frac{1}{3} S\left(S+1\right)\beta h_{\vec{n}} - \frac{1}{720}\left[\left(2S+1\right)^4 - 1\right]\beta_c^3 h_{\vec{n}}^3 \tag{D.5}$$

(Permite construir la ecuación de Ginzburg–Landau en un caso específico dado.)

[2] $\mathrm{B_S}\left(x\right) \approx \frac{1}{3}\frac{S+1}{S}x - \frac{1}{45}\frac{\left(2S+1\right)^4 - 1}{\left(2S\right)^4}x^3$ cuando $x \approx 0$.

donde hemos hecho el reemplazo $\beta \to \beta_c = 1/\mathrm{k_B}T_c$ en el segundo término del segundo miembro lo cual representa la contribución no trivial de orden mas bajo. En realidad, una aproximación posterior debe ser realizada con el mismo propósito en el término $h^3_{\vec{n}}$. Esta es convenientemente diferida hasta realizar la discusión de los casos particulares.

> Note que la *modulación* de la magnetización genera términos del mismo orden que aquellos generados por el desarrollo en potencias de $T_c - T$ cuando $T \lesssim T_c$. Resaltamos este hecho con el propósito de facilitar la comprensión de las derivaciones subsiguientes de la ecuación de Ginzburg–Landau en los diferentes casos que mostramos mas abajo.

La temperatura de transición T_c ($T \to T_c \implies \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle \to 0,\ \forall \vec{n}$) se obtiene linealizando la Ec. (D.5):

$$\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle = \frac{1}{3} S\,(S+1)\,\beta_c h_{\vec{n}} = \frac{1}{3} S\,(S+1)\,\beta_c \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n})\,\mathsf{S}_{\vec{m}z}$$

Multiplicando ambos miembros de esta ecuación por el factor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{n}}$, y sumando sobre $\vec{n}$, se obtiene

$$\sum_{\vec{n}} \langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{n}} = \frac{1}{3} S\,(S+1)\,\beta_c \left[\sum_{\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{n})\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{n}}\right] \left[\sum_{\vec{m}} \mathsf{S}_{\vec{m}z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{m}}\right]$$

tal que

$$\mathrm{k_B}T_c = \frac{1}{3} S\,(S+1)\,\text{máx}\,\{\mathcal{J}\,(\vec{q})\} \tag{D.6}$$

$$\mathcal{J}\,(\vec{q}) \equiv \sum_{\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{n})\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{n}} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathrm{J}\,(\vec{n}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \mathcal{J}\,(\vec{q})\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{n}} \tag{D.7}$$

donde N es el número de sitios. $\mathrm{k_B}T_c$ es $\propto$ máx $\{\mathcal{J}\,(\vec{q})\}$ puesto que para los restantes autovalores " T_c " la linealización realizada arriba no tiene sentido físico alguno.

En (D.7), la suma sobre $\vec{q}$ se realiza sobre el conjunto

$$\mathcal{B}_1 = \left\{\vec{q}\ \ni\ |q_i| \leq \frac{\pi}{a}\,,\ i = x, y, z\right\}$$

y cualquier otro valor de $\vec{q}$ es de la forma $\vec{q} = \vec{k} + \vec{G}$ donde $\vec{k} \in \mathcal{B}_1$ y $\vec{G}\cdot\vec{n} = 1$, $\forall \vec{n}$. El conjunto $\mathcal{B}_1$ se conoce como *primera zona de Brillouin*. Note que

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}} = \delta_{\vec{k}\vec{0}}\,, \qquad\qquad \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}} = \delta_{\vec{n}\vec{0}}$$

Ejemplos típicos de valores de $\vec{Q}$ que maximizan a $\mathcal{J}(\vec{q})$ son:

$$\vec{Q} = \vec{0}\,, \qquad (\text{ Ferromagnetismo })$$

$$\vec{Q} \neq \vec{0}\,, \qquad \left(\begin{array}{l}\text{Antiferromagnetismo u otras fases} \\ \textit{no conmensuradas} \text{ con una red cris-} \\ \text{talina dada}\end{array}\right)$$

En realidad, la estructura de $\mathcal{J}(\vec{q})$ puede ser mas complicada que la sugerida por los casos simples de los ejemplos señalados arriba. En general, las fases sugeridas por el máx $\{\mathcal{J}(\vec{q})\}$ pueden ser exploradas a temperaturas mas bajas aunque es posible que en tal caso ocurran otros cambios de fase. La variedad de orden magnético que se encuentra en la naturaleza es, en general, muy variada.

A continuación, y por simplicidad, consideramos

1. El caso de una *red cúbica simple* de *constante de red* $a > 0$. En este caso, un *vector* $\vec{\ell}$ *de la red cristalina* es de la forma

$$\vec{\ell} = (\ell_x \hat{x} + \ell_y \hat{y} + \ell_z \hat{z})\, a\,; \qquad \ell_i \in \mathbf{Z}\,, \quad i = x, y, z$$

2. Interacción solo entre los $z = 6$ *vecinos mas cercanos*, en una red cúbica simple, de un sitio dado.

La magnetización (*momento magnético medio por unidad de volumen*) viene dada por

$$\vec{\mathcal{M}}_{\vec{n}} = \frac{-g\mu_{\mathrm{B}} \left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \right\rangle}{a^3} \qquad \Longrightarrow \qquad \left\langle \vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}} \right\rangle = -\frac{a^3}{g\mu_{\mathrm{B}}} \vec{\mathcal{M}}_{\vec{n}}$$

D.2. Ferromagnetismo

En este caso, $\mathrm{J}(\vec{m}) = J > 0$ cuando $\vec{m}$ es uno de los vecinos mas cercanos del origen $\vec{0}$ y nula en cualquier otro caso. De acuerdo a (D.7), $\mathrm{J}(q)$ viene dado por

$$\mathcal{J}(q) = 2J\left[\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)\right] \tag{D.8}$$

cuyo máximo $\mathcal{J}\left(\vec{0}\right) = 6J = zJ$ corresponde a $\vec{Q} = \vec{0}$. La temperatura de transición T_c viene dada por

$$\mathrm{k_B} T_c = \frac{1}{3} S(S+1)\, zJ$$

Aproximemos la Ec. (D.5) cuando $\mathsf{S}_{\vec{n}z} = M_{\vec{n}}$ varía *suavemente* con la posición $\vec{n}$. Para ello evaluamos la suma sobre $\vec{m}$ en la Ec. (D.5):

$$\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}(\vec{m})\, M_{\vec{n}+\vec{m}} \;\approx\; \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}(\vec{m}) \left[M_{\vec{n}} + (\vec{m}\cdot\nabla_{\vec{n}})\, M_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\,(\vec{m}\cdot\nabla_{\vec{n}})^2\, M_{\vec{n}}\right]$$

$$
\begin{aligned}
&= \left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\right] M_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} \left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) m_i m_j\right] \frac{\partial^2 M_{\vec{n}}}{\partial n_i \partial n_j} \\
&= \left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\right] M_{\vec{n}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} \left[\frac{1}{3}\,\delta_{ij} \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) m^2\right] \frac{\partial^2 M_{\vec{n}}}{\partial n_i \partial n_j} \\
&= \left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\right] M_{\vec{n}} + \frac{1}{6} \left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) m^2\right] \nabla^2_{\vec{n}} M_{\vec{n}}
\end{aligned}
$$

Hagamos $M_{\vec{n}} \to \mathrm{M}\left(\vec{r}\right)$ lo cual *enfatiza* el límite continuo:

$$
\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) M_{\vec{n}+\vec{m}} \approx zJ\mathrm{M}\left(\vec{r}\right) + \frac{1}{6}\, zJa^2\, \nabla^2 \mathrm{M}\left(\vec{r}\right)
$$

La Ec. (D.5) se reduce a

$$
\begin{aligned}
\mathrm{M}\left(\vec{r}\right) &= \frac{1}{3}\, S\left(S+1\right) \beta z J \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) + \frac{1}{18}\, S\left(S+1\right) \beta z J a^2\, \nabla^2 \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) \\
&- \\
&\frac{1}{720} \left[\left(2S+1\right)^4 - 1\right] \left(\beta_c z J\right)^3 \mathrm{M}^3\left(\vec{r}\right)
\end{aligned} \tag{D.9}
$$

Puesto que el segundo término del miembro derecho es $\propto \nabla^2 \mathrm{M}\left(\vec{r}\right)$ podemos realizar el reemplazo $\beta \to \beta_c$ en este término:

$$
\mathrm{M}\left(\vec{r}\right) = \mathrm{k_B} T_c \beta \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) + \frac{1}{6}\, a^2\, \nabla^2 \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) - \frac{1}{720} \left[\left(2S+1\right)^4 - 1\right] \left(\beta_c z J\right)^3 \mathrm{M}^3\left(\vec{r}\right)
$$

A su vez, esta ecuación puede ser reescrita en la forma (Ecuación de Ginzburg–Landau)

$$
-\frac{1}{6}\, a^2\, \nabla^2 \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) + \frac{1}{720} \left[\left(2S+1\right)^4 - 1\right] \left(\beta_c z J\right)^3 \mathrm{M}^3\left(\vec{r}\right) - \left(\mathrm{k_B} T_c \beta - 1\right) \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) = 0
$$

Con la identidad

$$
\beta_c z J = \frac{3}{S\left(S+1\right)} = \frac{3}{\left(S+1/2\right)^2 - 1/4} = \frac{12}{\left(2S+1\right)^2 - 1}
$$

el prefactor de $\mathrm{M}^3\left(\vec{r}\right)$ puede ser simplificado en la forma siguiente:

$$
\frac{1}{720} \left[\left(2S+1\right)^4 - 1\right] \left(\beta_c z J\right)^3 = \frac{12}{5}\, \frac{\left(2S+1\right)^2 + 1}{\left[\left(2S+1\right)^2 - 1\right]^2} = \frac{3}{5}\, \frac{S\left(S+1\right) + 1/2}{\left[S\left(S+1\right)\right]^2}
$$

La ecuación de Ginzburg–Landau se reduce a

$$
-\frac{1}{6}\, a^2\, \nabla^2 \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) + \frac{3}{5}\, \frac{S\left(S+1\right) + 1/2}{\left[S\left(S+1\right)\right]^2}\, \mathrm{M}^3\left(\vec{r}\right) - \left(\frac{T_c}{T} - 1\right) \mathrm{M}\left(\vec{r}\right) = 0
$$

La solución uniforme ($\mathrm{M}(\vec{r}) = M_0, \forall \vec{r}$) satisface

$$\frac{3}{5}\,\frac{S(S+1)+1/2}{[S(S+1)]^2}\,M_0^3 - \left(\frac{T_c}{T}-1\right)M_0 = 0$$

Por tanto

$$\boxed{M_0 = \frac{\overbrace{\sqrt{15}}^{\approx\,1{,}2910}}{3}\,\frac{S(S+1)}{\sqrt{S(S+1)+1/2}}\,\left(\frac{T_c}{T}-1\right)^{1/2}} \tag{D.10}$$

la cual equivale a la magnetización uniforme $\vec{\mathcal{M}}_0 = (-g\mu_{\mathrm{B}} M_0/a^3)\,\hat{z}$. El exponente 1/2 es típico de las teorías de campo medio.

Introduciendo la función

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{\mathrm{M}(\vec{r})}{M_0} = \frac{\mathcal{M}_z(\vec{r})}{\mathcal{M}_{0z}}$$

se obtiene la ecuación de Ginzburg–Landau

$$\boxed{-\frac{1}{2}\,\xi^2\,\nabla^2\Psi(\vec{r}) + \Psi(\vec{r})\left[\Psi^2(\vec{r})-1\right] = 0} \tag{D.11}$$

donde

$$\boxed{\xi \equiv \frac{\overbrace{\sqrt{3}}^{\approx\,0{,}5774}}{3}\,\left(\frac{T_c}{T}-1\right)^{-1/2} a\,, \qquad T \lesssim T_c} \tag{D.12}$$

ξ es una escala para la variación espacial de la modulación de la magnetización $\mathcal{M}_z(\vec{r})\,\hat{z}$. Note que $\xi \gg a$ cuando $T \lesssim T_c$ lo cual es consistente con la hipótesis que conduce a la ecuación de Ginzburg–Landau. Por ejm. . . , con $T_c = 1000\,\mathrm{K}$ se obtiene $\xi \approx 18{,}25a$ cuando $T = 999\,\mathrm{K}$.

Ejercicio D.1

Un material ferromagnético ocupa el semiespacio $\{\vec{r} \ni x \geq 0\}$. Suponga que la solución solo depende de la coordenada x y

$$\Psi(x)\big|_{x\to\infty} = 1 \qquad \left(\begin{array}{l}\text{A medida que nos alejamos del origen el}\\ \text{sistema se comporta como un medio in-}\\ \text{finito.}\end{array}\right)$$

$$\Psi(x)|_{x\to 0^+} = 0 \qquad \left(\begin{array}{l}\text{La componente } z \text{ de la magnetización es}\\ \text{continua.}\end{array}\right)$$

1. Evalue $\Psi(x)$, $\forall x \geq 0$.
2. Determine el *vector inducción magnética* $\vec{\mathrm{B}}(\vec{r})$ generado por la solución del aparte anterior.

<u>SOLUCIÓN</u>:

1. La ecuación que determina $\Psi(x)$ es (ver (D.11))

$$-\frac{1}{2}\xi^2\,\Psi''(x) + \Psi(x)\left[\Psi^2(x) - 1\right] = 0$$

Multiplicando ambos miembros por $\Psi'(x)$ se obtiene

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[-\frac{1}{4}\xi^2\,\Psi'^2(x) + \frac{1}{4}\Psi^4(x) - \frac{1}{2}\Psi^2(x)\right] = 0$$

Por tanto

$$\xi^2\,\Psi'^2(x) - \Psi^4(x) + 2\Psi^2(x) = \xi^2\,\Psi'^2(x) - \left[1 - \Psi^2(x)\right]^2 + 1 = \text{constante}$$

Para satisfacer la condición de frontera cuando $x \to \infty$ es necesario escoger la constante igual a 1. El resultado anterior se reduce a

$$\xi^2\,\Psi'^2(x) - \left[1 - \Psi^2(x)\right]^2 = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \Psi'(x) = \pm\frac{1}{\xi}\left[1 - \Psi^2(x)\right]$$

la cual equivale a (con la raiz positiva, $\Psi'(x) \geq 0$)

$$\int_0^x \frac{\mathrm{d}x}{\xi} = \int_0^{\Psi(x)} \frac{\mathrm{d}\psi}{1-\psi^2} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{x}{\xi} = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+\Psi(x)}{1-\Psi(x)}\right) = \arctan(\Psi(x))$$

La solución viene dada por

$$\boxed{\Psi(x) = \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right), \qquad x \geq 0} \tag{D.13}$$

La Figura (D.1) ilustra el comportamiento de la magnetización adimensional dado por el resultado (D.13).

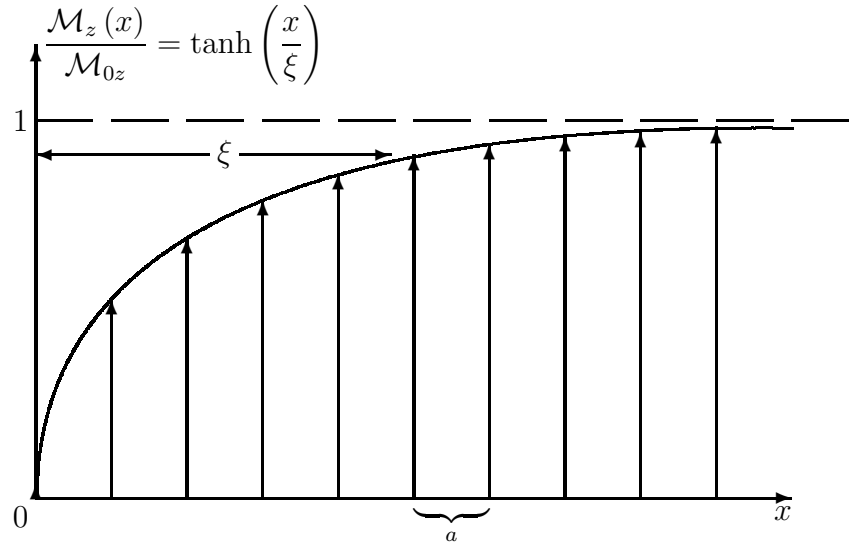


Figura D.1: Ilustración de la magnetización ferromagnética adimensional $\Psi(x)|_{x>0}$. $\Psi(x)$ es una solución de la ecuación de Ginzburg–Landau con condiciones apropiadas de frontera (ver texto). Note que el ancho de la región donde se anula la magnetización es, en las *inmediaciones* del origen, del orden de ξ. Cuando $x \gg \xi$ la solución se comporta como la de un ferromagneto uniforme en un medio infinito.

2. El vector inducción magnética $\vec{\mathrm{B}}(\vec{r})$ viene dado por la *ley de Biot y Savart*[3]

$$\vec{\mathrm{B}}(\vec{r}) = \frac{1}{c}\int \frac{\vec{\mathrm{J}}(\vec{r}\,') \times (\vec{r} - \vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|^3}\, \mathrm{d}^3_{\vec{r}\,'} \tag{D.14}$$

c es la velocidad de la luz y la integración se realiza *sobre todo el espacio*. $\vec{\mathrm{J}}(\vec{r})$ es un *vector densidad de corriente eléctrica equivalente* generado por la magnetización $\vec{\mathcal{M}}(\vec{r})$:

$$\vec{\mathrm{J}}(\vec{r}) = c\nabla \times \vec{\mathcal{M}}(\vec{r})$$

De acuerdo a los resultados obtenidos arriba, $\vec{\mathcal{M}}(\vec{r})$ viene dada por

$$\vec{\mathcal{M}}(\vec{r}) = -\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0\, \Theta(x) \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right) \hat{z}$$

tal que

$$\vec{\mathrm{J}}(\vec{r}) = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} cM_0 \frac{\mathrm{d}\left[\Theta(x)\tanh(x/\xi)\right]}{\mathrm{d}x}\, \hat{y}$$

[3]Ver algun texto de Teoría Electromagnética.

Reemplazando $\vec{\mathrm{J}}(\vec{r})$ en la ley de Biot y Savart (D.14), se obtiene

$$\begin{aligned}
\vec{\mathrm{B}}(\vec{r}) &= \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0 \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}'} \frac{\mathrm{d}\left[\Theta(x')\tanh(x'/\xi)\right]}{\mathrm{d}x'} \hat{y} \times \\
&\qquad \frac{(x-x')\,\hat{x} + (y-y')\,\hat{y} + (z-z')\,\hat{x}}{\left[(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2\right]^{3/2}} \\
&= \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0 \int \mathrm{d}^3_{\vec{r}'} \frac{\mathrm{d}\left[\Theta(x')\tanh(x'/\xi)\right]}{\mathrm{d}x'} \hat{y} \times \frac{(x-x')\,\hat{x} - y'\hat{y} - z'\hat{x}}{\left[(x-x')^2 + y'^2 + z'^2\right]^{3/2}} \\
&= \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \frac{\mathrm{d}\left[\Theta(x')\tanh(x'/\xi)\right]}{\mathrm{d}x'} \hat{y} \times (x-x')\,\hat{x} \\
&\qquad \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}y'\,\mathrm{d}z'}{\left[y'^2 + z'^2 + (x-x')^2\right]^{3/2}} \\
&= -\hat{z}\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \frac{\mathrm{d}\left[\Theta(x')\tanh(x'/\xi)\right]}{\mathrm{d}x'} \operatorname{sgn}(x-x') \times \\
&\qquad \int_0^{\infty} \frac{2\pi\,\mathrm{d}\rho}{(\rho^2+1)^{3/2}}
\end{aligned}$$

La integración sobre ρ es igual a la unidad[4]. Por tanto

$$\begin{aligned}
\vec{\mathrm{B}}(\vec{r}) &= \hat{z}\left(2\pi\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0\right) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \frac{\mathrm{d}\left[\Theta(x')\tanh(x'/\xi)\right]}{\mathrm{d}x'} \operatorname{sgn}(x'-x) \\
&= \hat{z}\left(2\pi\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0\right) \left\{1 - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\,\Theta(x')\tanh\left(\frac{x'}{\xi}\right)\left[2\delta(x'-x)\right]\right\}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\vec{\mathrm{B}}(\vec{r}) = 2\pi\frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{a^3} M_0 \left[1 - 2\Theta(x)\tanh\left(\frac{x}{\xi}\right)\right]\hat{z}} \tag{D.15}$$

La Figura D.2 ilustra el comportamiento de $\mathrm{B}_z(x) \equiv \mathrm{B}_z(\vec{r})$ a lo largo del eje x.

■

[4]Con el cambio de variables $\rho = \tan\theta$ se obtiene:

$$\int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}\rho}{(\rho^2+1)^{3/2}} = \int_0^{\pi/2} \sec^2(\theta)\,\mathrm{d}\theta\,\frac{1}{\sec^3\theta} = \int_0^{\pi/2} \mathrm{d}\theta\,\cos\theta = 1$$

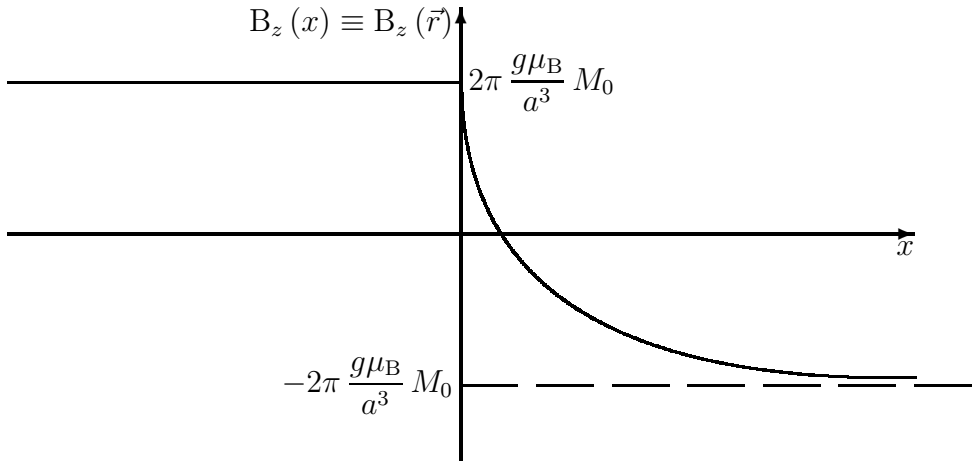


Figura D.2: Variación de la componente z del campo magnético generado por la magnetización ferromagnética (confinada a la región $x \geq 0$) en la aproximación de Ginzburg–Landau. El efecto, con posible autoconsistencia, de este campo es despreciable puesto que $zJ \gg 2\pi \left(g\mu_\mathrm{B}\right)^2 / a^3$ o, en otras palabras, la interacción de intercambio entre espines es mucho mayor que la interacción dipolar magnética entre ellos.

D.3. Antiferromagnetismo y *Similares*

En este caso, $\mathrm{J}(\vec{m}) = J < 0$ cuando $\vec{m}$ es uno de los vecinos mas cercanos del origen $\vec{0}$ y nula en cualquier otro caso. De acuerdo a (D.7), $\mathrm{J}(q)$ viene dado por

$$\mathrm{J}(q) = -2\,|J|\,[\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)]$$

cuyo máximo $\mathcal{J}\left(\vec{Q}\right) = 6\,|J| = z\,|J|$ corresponde a

$$\vec{Q} = (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\,\frac{\pi}{a}$$

con *longitud de onda* asociada $\lambda = 2\pi/(\pi/a) = 2a$. Por ejm..., a lo largo de uno de los ejes observamos una estructura de espines que se alternan como indica la Figura (D.3). La temperatura de transición T_c viene dada por

$$\mathrm{k_B} T_c = \frac{1}{3}\,S(S+1)\,z\,|J|$$

En la aproximación de Ginzburg–Landau introducimos una amplitud $M_{\vec{n}}$ que varía lentamente a lo largo de los sitios de la red cristalina:

$$\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \rangle = M_{\vec{n}} \cos\left(\vec{Q} \cdot \vec{n}\right)$$

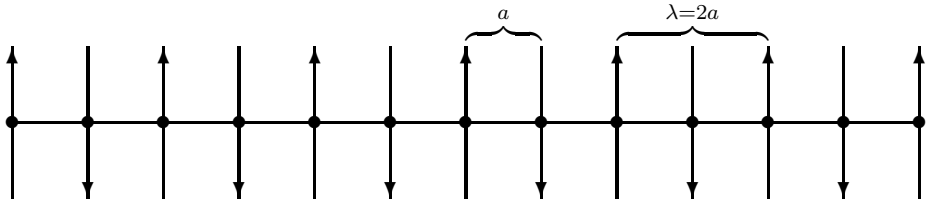


Figura D.3: Variación antiferromagnética del momento magnético, a lo largo de una línea, en la aproximación de campo medio. La aproximación de Ginzburg–Landau introduce, a posteriori, una modulación espacial *lenta* de las amplitudes en cada sitio y <u>*no*</u> se relaciona *directamente* con la variación *rápida* que describe el antiferromagnetismo subyacente.

Evaluemos la suma en la expresión (D.5):

$$
\begin{aligned}
\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n}-\vec{m}\right)\left\langle \mathsf{S}_{\vec{m}z}\right\rangle &= \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) M_{\vec{n}+\vec{m}} \cos\left(\vec{Q}\cdot\left[\vec{n}+\vec{m}\right]\right) \\
&\approx \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\left[M_{\vec{n}} + \left(\vec{m}\cdot\nabla_{\vec{n}}\right) M_{\vec{n}} + \frac{1}{2}\left(\vec{m}\cdot\nabla_{\vec{n}}\right)^2 M_{\vec{n}}\right] \times \\
&\qquad \left[\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{n}\right)\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right) - \underbrace{\operatorname{sen}\left(\vec{Q}\cdot\vec{n}\right)\operatorname{sen}\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right)}_{=\,0}\right] \\
&= \left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right)\right] M_{\vec{n}} \cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{n}\right) \\
&\quad + \\
&\quad \frac{1}{2}\left\{\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\left[\left(\vec{m}\cdot\nabla_{\vec{n}}\right)^2 M_{\vec{n}}\right]\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right)\right\}\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{n}\right)
\end{aligned}
$$

El término entre llaves puede transformarse de la siguiente manera

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\left[\left(\vec{m}\cdot\nabla_{\vec{n}}\right)^2 M_{\vec{n}}\right]\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right) \\
&= \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right) \sum_{i,j=x,y,z} m_i m_j \frac{\partial^2 M_{\vec{n}}}{\partial n_i\,\partial n_j} \\
&= \sum_{i,j=x,y,z}\left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) m_i m_j \cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right)\right]\frac{\partial^2 M_{\vec{n}}}{\partial n_i\,\partial n_j} \\
&= \sum_{i,j=x,y,z}\left[\frac{1}{3}\,\delta_{ij}\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) m^2 \cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right)\right]\frac{\partial^2 M_{\vec{n}}}{\partial n_i\,\partial n_j}
\end{aligned}
$$

$$= \left[\frac{1}{3}\, a^2 \sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) \cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{m}\right)\right] \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial^2 M_{\vec{n}}}{\partial n_i^2}$$

En conclusión

$$\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{n}-\vec{m}\right) \left\langle \mathsf{S}_{\vec{m}z} \right\rangle \approx \mathcal{J}\left(Q\right) \cos\left(\vec{Q}\cdot\vec{n}\right) \left[1 + \frac{1}{6}\, a^2\, \nabla_{\vec{n}}^2\right] M_{\vec{n}}$$

Al reemplazar este resultado en la expresión general (D.5) notamos que se obtiene la misma ecuación de Ginzburg–Landau de la sección anterior. Para ello resaltamos el cambio $J \to |J|$ y que $\cos^2\left(\vec{Q}\cdot\vec{n}\right) = 1,\ \forall \vec{n}$.

Apéndice E

Ondas de Espin (Magnones)[1]

Consideremos el estado ferromagnético, a bajas temperaturas,

$$0 \lesssim T \ll T_c$$

descrito por el *hamiltoniano de Heisenberg*

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\left(\vec{m}-\vec{n}\right)\vec{\mathsf{S}}_{\vec{m}}\cdot\vec{\mathsf{S}}_{\vec{n}}\,; \qquad \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) = \mathrm{J}\left(-\vec{m}\right)\,, \quad \mathrm{J}\left(\vec{0}\right) = 0 \tag{E.1}$$

El estado fundamental ferromagnético $|F\rangle_0$ corresponde a colocar todos los espines de la red cristalina[2] en un estado con $m_S = S$:

$$|F\rangle_0 = |S,S,S,\ldots\rangle \quad \text{con energía} \quad E_{F_0} = -\frac{1}{2}NzJS^2 \quad \left(\begin{array}{l}\text{Energía del } \textit{Estado Fundamental}\end{array}\right)$$

Note que $|-S,-S,-S,\ldots\rangle$ y $|F\rangle_0$ son estados ferromagnéticos degenerados.

A bajas temperaturas, $\langle\mathsf{S}_{\vec{n}z}\rangle \approx S$ tal que estamos interesados en el estudio de ligeras desviaciones respecto de la *saturación* $\langle\mathsf{S}_{\vec{n}z}\rangle = S$, $\forall\vec{n}$. Tales desviaciones se propagan por la red cristalina formando un *colectivo coherente* que se conoce con el nombre de *ondas de espin* o *magnones*[3]. Clásicamente, ello corresponde a una *precesión* alrededor del eje de magnetización ($\parallel \hat{z}$) de la componente de espin perpendicular a esta ($\mathsf{S}_{\vec{n}x}\hat{x} + \mathsf{S}_{\vec{n}y}\hat{y}$) en cada sitio de la red cristalina.

La idea general es, tomando en cuenta las consideraciones señaladas arriba, mostrar que las excitaciones elementales del hamiltoniano de Heisenberg, a partir del estado fundamental ferromagnético son descritas, en forma aproximada, por

[1] Revisar los detalles pertinentes en el Apéndice D.

[2] $|\vec{n}, m_S\rangle$ es el estado de espin en un sitio dado $\vec{n}$. $m_S = -S, -S+1, \ldots, S-1, S$ donde S es un número entero o semientero.

[3] En el caso particular de ferromagnetismo se denominan *ferromagnones*.

un gas de bosones libres. El espectro de excitaciones de este gas provee la información necesaria para extraer consecuencias medibles, a bajas temperaturas, tales como la variación con la temperatura del calor específico, magnetización, etc...

Es claro que el estudio de ondas de espin requiere investigar la evolución de $\mathsf{S}_{\vec{n}x}$ y/o $\mathsf{S}_{\vec{n}y}$ y/o combinaciones lineales de ellas. Recordemos las reglas de conmutación de espin

$$[\mathsf{S}_{\vec{m}x}, \mathsf{S}_{\vec{n}y}] = \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}z}\,, \quad [\mathsf{S}_{\vec{m}y}, \mathsf{S}_{\vec{n}z}] = \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}x}\,, \quad [\mathsf{S}_{\vec{m}z}, \mathsf{S}_{\vec{n}x}] = \mathrm{i}\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}y}$$

Introduzcamos los *operadores de desviación*, en cada sitio $\vec{n}$,

$$\mathsf{S}_{\vec{n}\pm} = \mathsf{S}_{\vec{n}x} \pm \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y} \qquad \text{tal que} \qquad \begin{cases} \mathsf{S}_{\vec{n}x} = \dfrac{\mathsf{S}_{\vec{n}+} + \mathsf{S}_{\vec{n}-}}{2} \\ \mathsf{S}_{\vec{n}y} = \dfrac{\mathsf{S}_{\vec{n}+} - \mathsf{S}_{\vec{n}-}}{2\mathrm{i}} \end{cases}$$

Los operadores de desviación $\mathsf{S}_{\vec{n}\pm}$ y $\mathsf{S}_{\vec{n}z}$ satisfacen las reglas de conmutación

$$[\mathsf{S}_{\vec{m}+}, \mathsf{S}_{\vec{n}-}] = 2\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}z}\,, \quad [\mathsf{S}_{\vec{m}z}, \mathsf{S}_{\vec{n}+}] = \delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}+}\,, \quad [\mathsf{S}_{\vec{m}z}, \mathsf{S}_{\vec{n}-}] = -\delta_{\vec{m}\vec{n}}\mathsf{S}_{\vec{n}-} \tag{E.2}$$

y en particular

$$\begin{cases} \mathsf{S}_{\vec{n}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} = (\mathsf{S}_{\vec{n}x} - \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y})(\mathsf{S}_{\vec{n}x} + \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y}) = \mathsf{S}^2_{\vec{n}x} + \mathsf{S}^2_{\vec{n}y} + \mathrm{i}\,\overbrace{[\mathsf{S}_{\vec{n}x}, \mathsf{S}_{\vec{n}y}]}^{\mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}z}} \\ \qquad\qquad = \mathsf{S}^2_{\vec{n}x} + \mathsf{S}^2_{\vec{n}y} - \mathsf{S}_{\vec{n}z} = \vec{\mathsf{S}}^2_{\vec{n}} - \mathsf{S}^2_{\vec{n}z} - \mathsf{S}_{\vec{n}z} \\ \qquad\qquad \text{Para estados con } \textit{buen número cuántico } S\text{:} \\ \mathsf{S}_{\vec{n}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} = S(S+1) - \mathsf{S}^2_{\vec{n}z} - \mathsf{S}_{\vec{n}z} = (S - \mathsf{S}_{\vec{n}z})(S + 1 + \mathsf{S}_{\vec{n}z}) \end{cases} \tag{E.3}$$

$$\begin{cases} \mathsf{S}_{\vec{n}+}\mathsf{S}_{\vec{n}-} = (\mathsf{S}_{\vec{n}x} + \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y})(\mathsf{S}_{\vec{n}x} - \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y}) = \mathsf{S}^2_{\vec{n}x} + \mathsf{S}^2_{\vec{n}y} + \mathrm{i}\,\overbrace{[\mathsf{S}_{\vec{n}y}, \mathsf{S}_{\vec{n}x}]}^{\mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}z}} \\ \qquad\qquad = \mathsf{S}^2_{\vec{n}x} + \mathsf{S}^2_{\vec{n}y} + \mathsf{S}_{\vec{n}z} = \vec{\mathsf{S}}^2_{\vec{n}} - \mathsf{S}^2_{\vec{n}z} + \mathsf{S}_{\vec{n}z} \\ \qquad\qquad \text{Para estados con } \textit{buen número cuántico } S\text{:} \\ \mathsf{S}_{\vec{n}+}\mathsf{S}_{\vec{n}-} = S(S+1) - \mathsf{S}^2_{\vec{n}z} + \mathsf{S}_{\vec{n}z} = (S + \mathsf{S}_{\vec{n}z})(S + 1 + \mathsf{S}_{\vec{n}z}) \end{cases}$$

$\mathsf{S}_{\vec{n}+}$ ($\mathsf{S}_{\vec{n}-}$) puede interpretarse como un operador que *aumenta* (*disminuye*) en una unidad los autovalores del operador $\mathsf{S}_{\vec{n}z}$ lo cual justifica el nombre Operador de Desviación[4]. Así mismo

$$\mathsf{S}_{\vec{n}-}\,|\vec{n},-S\rangle = 0\,, \qquad \mathsf{S}_{\vec{n}+}\,|\vec{n},S\rangle = 0\,; \qquad \forall\vec{n} \qquad \Big(\text{ Ver pie de pág. 2 }\Big)$$

En términos de los operadores de desviación el hamiltoniano de Heisenberg puede reescribirse en la forma:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n})\,(\mathsf{S}_{\vec{m}x}\mathsf{S}_{\vec{n}x} + \mathsf{S}_{\vec{m}y}\mathsf{S}_{\vec{n}y} + \mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z}) \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n}) \times \\ &\qquad \left(\frac{\mathsf{S}_{\vec{m}+}+\mathsf{S}_{\vec{m}-}}{2}\,\frac{\mathsf{S}_{\vec{n}+}+\mathsf{S}_{\vec{n}-}}{2} + \frac{\mathsf{S}_{\vec{m}+}-\mathsf{S}_{\vec{m}-}}{2\mathrm{i}}\,\frac{\mathsf{S}_{\vec{n}+}-\mathsf{S}_{\vec{n}-}}{2\mathrm{i}} + \mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z}\right) \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n})\left(\frac{1}{2}\,\mathsf{S}_{\vec{m}+}\mathsf{S}_{\vec{n}-} + \frac{1}{2}\,\mathsf{S}_{\vec{m}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} + \mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z}\right) \end{aligned}$$

y, en resumen,

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n})\,(\mathsf{S}_{\vec{m}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} + \mathsf{S}_{\vec{m}z}\mathsf{S}_{\vec{n}z}) \tag{E.4}$$

Note que

$$H\,|F\rangle_0 = -\frac{1}{2}\,NzJS^2\,|F\rangle_0 \qquad \text{puesto que} \qquad \mathsf{S}_{\vec{n}+}\,|F\rangle_0 = 0\,, \quad \forall\vec{n}$$

$-NzJS^2/2$ es la *energía del estado fundamental ferromagnético*.

La relación de conmutación

$$\left[\frac{\mathsf{S}_{\vec{n}+}}{\sqrt{2S}}, \frac{\mathsf{S}_{\vec{n}-}}{\sqrt{2S}}\right] = \frac{\mathsf{S}_{\vec{n}z}}{S}$$

sugiere que, a bajas temperaturas, el efecto del miembro derecho es similar al del *operador identidad* ($\mathsf{S}_{\vec{n}z}/S \sim 1$). En otras palabras, los estados que generan la mayor contribución a la energía libre de Helmholtz son aquellos que tienen componentes $m_S \sim S$. Esta circunstancia nos permite introducir, al menos en forma aproximada, *operadores bosónicos*

$$b_{\vec{n}} = \frac{\mathsf{S}_{\vec{n}+}}{\sqrt{2S}} = \frac{1}{\sqrt{2S}}\,(\mathsf{S}_{\vec{n}x} + \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y})\,, \qquad b^\dagger_{\vec{n}} = \frac{\mathsf{S}_{\vec{n}-}}{\sqrt{2S}} = \frac{1}{\sqrt{2S}}\,(\mathsf{S}_{\vec{n}x} - \mathrm{i}\mathsf{S}_{\vec{n}y})$$

$$\mathsf{S}_{\vec{n}x} = \sqrt{\frac{S}{2}}\,\left(b^\dagger_{\vec{n}} + b_{\vec{n}}\right)\,, \qquad \mathsf{S}_{\vec{n}y} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{S}{2}}\,\left(b^\dagger_{\vec{n}} - b_{\vec{n}}\right)$$

[4]Revise, en algun texto usual de Mecánica Cuántica, las propiedades de los autoestados de espin y de los operadores de espin las cuales pueden derivarse a partir de las relaciones de conmutación de espin.

los cuales satisfacen las relaciones de conmutación

$$[b_{\vec{m}}, b_{\vec{n}}] = 0 \qquad , \qquad \left[b^\dagger_{\vec{m}}, b^\dagger_{\vec{n}}\right] = 0$$

$$\left[b_{\vec{m}}, b^\dagger_{\vec{n}}\right] = 0 \quad \text{si} \quad \vec{m} \neq \vec{n}\,, \qquad \left[b_{\vec{n}}, b^\dagger_{\vec{n}}\right] \approx 1$$

En términos de los operadores bosónicos, el hamiltoniano de Heisenberg (E.4) se reduce, en forma aproximada, al hamiltoniano de ondas de espin H_{ode}

$$\begin{aligned} H_{ode} &= -\frac{1}{2}\,NzJS^2 - \frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n}) \times \\ &\quad \left[\sqrt{\frac{S}{2}}\ \left(b^\dagger_{\vec{m}} + b_{\vec{m}}\right)\sqrt{\frac{S}{2}}\ \left(b^\dagger_{\vec{n}} + b_{\vec{n}}\right) + \mathrm{i}\sqrt{\frac{S}{2}}\ \left(b^\dagger_{\vec{m}} - b_{\vec{m}}\right)\mathrm{i}\sqrt{\frac{S}{2}}\ \left(b^\dagger_{\vec{n}} - b_{\vec{n}}\right)\right] \\ &= -\frac{1}{2}\,NzJS^2 - \frac{1}{4}\,S\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n})\left(b^\dagger_{\vec{m}} b_{\vec{n}} + b_{\vec{m}} b^\dagger_{\vec{n}}\right) \end{aligned}$$

$$H_{ode} = -\frac{1}{2}\,NzJS^2 - \frac{1}{2}\,S\sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\,(\vec{m}-\vec{n})\, b^\dagger_{\vec{m}} b_{\vec{n}} \tag{E.5}$$

Introduzcamos operadores bosónicos en espacio de cuasimomentos–$\hbar\vec{k}$:

$$b_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}}\, b_{\vec{n}}\,, \qquad b_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}}\, b_{\vec{k}}$$

los cuales satisfacen

$$\left[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}\right] = 0 \qquad , \qquad \left[b^\dagger_{\vec{k}}, b^\dagger_{\vec{k}'}\right] = 0$$

$$\left[b_{\vec{k}}, b^\dagger_{\vec{k}'}\right] = 0 \quad \text{si} \quad \vec{k} \neq \vec{k}'\,, \qquad \left[b_{\vec{k}}, b^\dagger_{\vec{k}}\right] \approx 1$$

Las suma sobre $\vec{k}$ se limitan al conjunto $\mathcal{B}_1 = \left\{\vec{k} \ni |k_i| \leq \pi/a,\ i = x, y, z\right\}$. Cualquier número de onda $\vec{k}$ que *no pertenece* a este conjunto es de la forma $\vec{k} = \vec{q} + \vec{G}$ donde $\vec{q} \in \mathcal{B}_1$ y $\vec{G}\cdot\vec{n}$ es un *múltiplo entero*, $\forall\vec{n}$, de 2π. N es el número de sitios. Note que

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}} = \delta_{\vec{n}\vec{0}}\,, \qquad \frac{1}{N}\sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}} = \delta_{\vec{k}\vec{0}}\,,$$

(E.5) se reduce a

$$\begin{aligned} H_{ode} &= -\frac{1}{2}\,NzJS^2 \\ &\quad - \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{2}\, S \sum_{\vec{m}\vec{n}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right) \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{m}+\vec{n})}\, b^{\dagger}_{\vec{q}}\right] \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{n}}\, b_{\vec{k}}\right] \\
= & -\frac{1}{2}\, NzJS^2 - \frac{1}{2}\, S \sum_{\vec{q}\vec{k}} \underbrace{\left[\sum_{\vec{m}} \mathrm{J}\left(\vec{m}\right)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{m}}\right]}_{\mathcal{J}(\vec{q})} \underbrace{\left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{i\left(\vec{q}-\vec{k}\right)\cdot\vec{n}}\right]}_{\delta_{\vec{q}\vec{k}}} b^{\dagger}_{\vec{q}}\, b_{\vec{k}} \\
= & -\frac{1}{2}\, NzJS^2 - \frac{1}{2}\, S \sum_{\vec{k}} \mathcal{J}\left(\vec{k}\right) b^{\dagger}_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}} \\
= & -\frac{1}{2}\, NzJS^2 - \frac{1}{2}\, S\mathcal{J}\left(\vec{0}\right) \sum_{\vec{k}} b^{\dagger}_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}} + \frac{1}{2}\, S \sum_{\vec{k}} \left[\mathcal{J}\left(\vec{0}\right) - \mathcal{J}\left(\vec{k}\right)\right] b^{\dagger}_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}}
\end{aligned}
$$

Pero

$$
\begin{aligned}
\sum_{\vec{k}} b^{\dagger}_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}} &= \sum_{\vec{n}} b^{\dagger}_{\vec{n}}\, b_{\vec{n}} = 2S \sum_{\vec{n}} \mathsf{S}_{\vec{n}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} \\
&= 2S \sum_{\vec{n}} \left[S\left(S+1\right) - \mathsf{S}^2_{\vec{n}z} - \mathsf{S}_{\vec{n}z}\right], \quad \left(\begin{array}{l} \approx 0 \text{ en la aproximación} \\ \text{de ondas de espin} \end{array}\right)
\end{aligned}
$$

Por tanto

$$
\boxed{
\begin{aligned}
H_{ode} &= -\frac{1}{2}\, NzJS^2 + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}\, b^{\dagger}_{\vec{k}}\, b_{\vec{k}} \\
E_{\vec{k}} &= \frac{1}{2}\, S\left[\mathcal{J}\left(\vec{0}\right) - \mathcal{J}\left(\vec{k}\right)\right] \\
&= 2SJ\left[\mathrm{sen}^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \mathrm{sen}^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \mathrm{sen}^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)\right]
\end{aligned}
}
\tag{E.6}
$$

$E_{\vec{k}}$ es el *espectro de excitaciones de las ondas de espin* (ver expresión (D.8)). El *número medio de ondas de espin con cuasimomento* $\hbar\vec{k}$ viene dado por

$$
\left\langle b^{\dagger}_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \right\rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{E_{\vec{k}}/\mathrm{k_B}T} - 1}
$$

A bajas temperaturas $\left(E_{\vec{k}} \ll \mathrm{k_B}T \ll \mathrm{k_B}T_c \right)$ solo es importante el rango de valores de $\vec{k}$ tales que:

$$
E_{\vec{k}} \approx \left(\frac{1}{2}\, SJa^2\right) k^2\,; \qquad |k_i| \ll \frac{\pi}{a}\,, \quad i = x, y, z
$$

E.1. Momento Magnético Total vs. T: $\mathrm{M}(T)\,\hat{z}$

Esta es determinada por

$$\mathrm{M}(T) = \sum_{\vec{n}} \left(-g\mu_{\mathrm{B}} \left\langle \mathsf{S}_{\vec{n}z} \right\rangle\right)$$

De la relación (E.3) se obtiene

$$\mathsf{S}_{\vec{n}z} = \mathsf{S}^2_{\vec{n}x} + \mathsf{S}^2_{\vec{n}y} - \mathsf{S}_{\vec{n}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} = S(S+1) - \overbrace{\mathsf{S}^2_{\vec{n}z}}^{\sim S^2} - \mathsf{S}_{\vec{n}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+} \approx S - \mathsf{S}_{\vec{n}-}\mathsf{S}_{\vec{n}+}$$

En particular, esta relación es exacta para $S = 1/2$. $\mathrm{M}(T)$ se reduce a

$$\mathrm{M}(T) = \overbrace{-Ng\mu_{\mathrm{B}}S}^{\mathrm{M}(0)} + g\mu_{\mathrm{B}} \sum_{\vec{n}} 2S \left\langle b^{\dagger}_{\vec{n}} b_{\vec{n}} \right\rangle = -Ng\mu_{\mathrm{B}}S + 2g\mu_{\mathrm{B}}S \sum_{\vec{k}} \left\langle b^{\dagger}_{\vec{k}} b_{\vec{k}} \right\rangle$$

Además ($\Delta\mathrm{M}(T) \equiv \mathrm{M}(0) - \mathrm{M}(T)$)

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta\mathrm{M}(T)}{\mathrm{M}(0)} &= \frac{2}{N}\frac{V}{(2\pi)^3}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\mathrm{d}k_x \int_{-\pi/a}^{\pi/a}\mathrm{d}k_y \int_{-\pi/a}^{\pi/a}\mathrm{d}k_z \frac{1}{\mathrm{e}^{E_{\vec{k}}/\mathrm{k_B}T} - 1} \\
&\approx \frac{a^3}{4\pi^3}\int_0^{\infty}\mathrm{d}k\,\frac{4\pi k^2}{\mathrm{e}^{SJa^2k^2/2\mathrm{k_B}T} - 1} \\
&= \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{\mathrm{k_B}T}{SJ}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\,\frac{x^{1/2}}{\mathrm{e}^x - 1}}_{=\,\zeta(3/2)\sqrt{\pi}\,/2}, \qquad \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2{,}612
\end{aligned}$$

Este resultado es conocido como la *ley $T^{3/2}$ de Bloch* quien la derivó hace 74 años[5]:

Ley $\mathsf{T}^{3/2}$ de Bloch

$$\frac{\Delta\mathrm{M}(T)}{\mathrm{M}(0)} = \frac{\overbrace{\sqrt{2}\,\zeta(3/2)}^{\approx\,0{,}3317}}{2\pi^{3/2}}\left(\frac{T}{SJ}\right)^{3/2} \approx \left(\frac{T}{T_{ode}}\right)^{3/2} \tag{E.7}$$

$$\Delta\mathrm{M}(T) \equiv \mathrm{M}(0) - \mathrm{M}(T), \qquad \mathrm{k_B}T_{ode} \equiv 2{,}0869\,SJ$$

$\mathrm{M}(T)\,\hat{z}$: Magnetización

Este resultado ha sido confirmado por numerosos experimentos.

[5] F. Bloch, *Z. Physik* **61**, 206 (1931).

E.2. Calor Específico

Este se define como $C \equiv \text{đ}Q/\mathrm{d}T$ el cual, en ausencia de variación de los parámetros externos del sistema, se reduce a $C = \mathrm{d}E/\mathrm{d}T$ donde $\left(0 \lesssim T \ll T_c \right)$

$$
\begin{aligned}
E &= \langle H_{ode} \rangle = \\
&\approx -\frac{1}{2} NzJS^2 + \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \mathrm{d}k \, 4\pi k^2 \, \frac{SJa^2k^2/2}{\mathrm{e}^{SJa^2k^2/2\mathrm{k_B}T} - 1} \\
&= -\frac{1}{2} NzJS^2 + \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} NSJ \left(\frac{\mathrm{k_B}T}{SJ} \right)^{5/2} \underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{3/2}}{\mathrm{e}^x - 1}}_{= \, 3\zeta(5/2)\sqrt{\pi}\,/4}, \qquad \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \approx 1{,}341
\end{aligned}
$$

$$
E \approx -\frac{1}{2} NzJS^2 + \frac{3\sqrt{2}\;\zeta(5/2)}{8\pi^{3/2}} NSJ \left(\frac{\mathrm{k_B}T}{SJ} \right)^{5/2}
$$

y por lo tanto

$$
\boxed{C \approx \overbrace{\frac{15\sqrt{2}\;\zeta(5/2)}{16\pi^{3/2}}}^{\approx\, 0{,}6386} N\mathrm{k_B} \left(\frac{\mathrm{k_B}T}{SJ} \right)^{3/2}} \tag{E.8}
$$

Note que

$$
\text{tanto} \quad \frac{\Delta \mathrm{M}(T)}{\mathrm{M}(0)} \quad \text{como} \quad C \quad \text{son} \quad \propto T^{3/2}
$$

Apéndice F

Recocido Simulado[1]

F.1. Introducción

Recocido Simulado es un procedimiento iterativo, y por lo tanto básicamente computacional, que permite encontrar la región representativa, en el espacio de fases[2], que *ocuparía* un sistema físico en equilibrio termodinámico a una temperatura dada T y para valores dados de sus parámetros externos o/y las fuerzas generalizadas que actuan sobre él[3].

[1] En ingles: *Simulated Annealing*.

[2] Con ello nos referimos, por simplicidad, tanto al espacio de fases clásico como al espacio de estados en Mecánica Cuántica puesto que el método de simulación expuesto en este capítulo es suficientemente general. Así mismo hablamos, indistintamente, de configuraciones o estados. Esperamos que ello no produzca confusión alguna.

[3]
- Una discusión interesante del método de Recocido Simulado puede verse en:
  `Optimization by Simulated Annealing`. S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr., M. P. Vecchi. *Science*, 13 May 1983, volume 220, number 4598, pág. 671.
- La siguiente referencia discute las bases del método, sus extensiones y una variedad de aplicaciones en diversas areas:
  `Monte Carlo Methods in Statistical Physics`. Ed. por K. Binder. Topics in Current Physics. Vol. 7. Springer–Verlag 1979.
- Una revisión del método con una amplia discusión del proceso de generación de *" números aleatorios "* puede verse en:
  `Applications of Monte Carlo Methods to Statistical Physics`. K. Binder, Rep. Prog. Phys. **60**, (1997), págs. 487–559.
- Una discusión, basada en el Teorema del Límite Central, de la convergencia del Algoritmo de Metropolis puede verse en:
  `Stochastic Processes`. J. L. Doob, Wiley & Sons, New York 1953.
- El *Método de las Coincidencias* y una breve discusión de simulaciones numéricas (que incluye la convergencia del algoritmo de Metropolis) puede verse en:
  `Statistical Mechanics`. Shang–Keng Ma, World Scientific 1985.

Este procedimiento o algoritmo adquiere relevancia cuando el sistema no se encuentra inicialmente en la región representativa, mencionada arriba, del espacio de fases. En tal caso, se procede a movilizar *lentamente* el punto o la región en el espacio de fases hacia la región donde *suele permanecer* cuando se encuentra en equilibrio termodinámico. Las configuraciones intermedias o transientes son irrelevantes y solo importa el objetivo final donde se pueden realizar medidas temporales (a lo largo de un número de iteraciones del proceso) que pueden ser contrastadas con experimentos reales. La *lentitud* del proceso o *recocido* garantiza, en principio, que el sistema se aproxima a su situación de equilibrio termodinámico en contraste con un proceso rápido (en ingles: *quenching*) donde el sistema podría adoptar una configuración no compatible (por ejm. . . , metaestable), en general, con la situación de equilibrio termodinámico.

El Recocido Simulado es extremadamente útil en sistemas de extrema complejidad donde resultados analíticos o aproximaciones razonables son escasas. Un consejo usual es que este es el caso en que *solo* debe usarse el método de Recocido Simulado. Es habitual la comparación o cooperación de este método con otros enfoques aproximados.

Puesto que el método de Recocido Simulado está diseñado para aproximar un sistema a su equilibrio termodinámico este resulta ser equivalente a minimizar algún potencial termodinámico específico a una situación dada. Por ello y por analogía el método es aplicable a situaciones, en otras areas del conocimiento, que se reducen a la minimización de[4] una función de una o varias variables (llamada a veces *Función Costo*). En tales casos las nociones de temperatura, presión, etc. . . adquieren un significado que se relaciona al sistema particular en estudio.

F.2. El Método de Recocido Simulado

Consideremos un sistema físico, en el conjunto canónico[5], el cual en equilibrio termodinámico a la temperatura T corresponde a la minimización de la *energía libre de Helmholtz* F:

$$F = E - TS \tag{F.1}$$

E y S son la *energía* y la *entropía* del sistema, respectivamente. Los parámetros externos y el número de partículas del sistema se consideran fijos lo cual no es estrictamente necesario puesto que la generalización a otras situaciones es simple. La minimización de F es, intuitivamente, una competencia entre la tendencia a minimizar la energía E y maximizar la entropía S para un valor dado de la temperatura T. Desde este punto de vista un proceso de simulación luciría sin esperanza alguna puesto que la evaluación de la entropía, como objeto de utilidad

[4]Note que maximizar una función f equivale a minimizar −f.

[5]La generalización a otras situaciones es inmediata.

práctica en un sentido computacional, *no* es simple. Sin embargo, minimizar F equivale a afirmar que la probabilidad P_n de que el sistema se encuentre en el estado[6] $|n\rangle$ de energía E_n satisface

$$P_n \propto \mathrm{e}^{-E_n/\mathrm{k_B}T} \tag{F.2}$$

la cual es una expresión mas simple para nuestros propósitos puesto que no involucra explícitamente a la entropía S.

Dado un sistema el cual podemos observar en un conjunto de configuraciones arbitrarias tal que no necesariamente se satisface (F.2):

¿ Que debemos hacer para configurar el sistema de manera tal que $\{P_n\}$ satisfaga (F.2) ?.

Denotemos con $\mathrm{P}_n(t)$ la probabilidad de que el sistema se encuentre en la configuración $|n\rangle$ en el t. La respuesta *mas simple* a la pregunta anterior involucra la introducción de *probabilidades de transición por unidad de tiempo*. Estas describen transiciones entre estados y/o la evolución del sistema hacia el equilibrio termodinámico. Una manera adecuada de introducir esta descripción es a traves de una *ecuación maestra* como[7]

$$\frac{\mathrm{dP}_n(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_m \left[W_{n\leftarrow m}\mathrm{P}_m(t) - W_{m\leftarrow n}\mathrm{P}_n(t)\right]$$

donde $W_{n\leftarrow n'}$ es la *probabilidad de transición por unidad de tiempo del estado* $|n'\rangle$ *al estado* $|n\rangle$. $W_{n\leftarrow n'}$ es independiente del tiempo $\forall\ n, n'$. Las *soluciones estacionarias* ($P_n \equiv \lim_{t\to\infty} \mathrm{P}_n(t)$) satisfacen

$$\sum_m \left[W_{n\leftarrow m}P_m - W_{m\leftarrow n}P_n\right] = 0\,, \qquad \forall n$$

Una *condición mas débil*, que anula esta suma, es exigir que cada sumando se anule idénticamente:

$$\boxed{W_{n\leftarrow m}P_m - W_{m\leftarrow n}P_n = 0\,, \quad \forall\ m, n \quad \left(\begin{array}{l}\text{Condición de Equilibrio}\\ \text{Detallado}\end{array}\right)} \tag{F.3}$$

[6] Ver pie de pág. 2

[7] Partiendo de la ecuación de Liouville-Neumann para un sistema dado, la construcción de una ecuación maestra como una descripción aproximada de la evolución de un sistema físico no es un problema simple. El lector interesado podría, por ejm. . . , revisar textos de Física de Laser donde tal problema se muestra en toda su complejidad.

Ello significa que las probabilidades de transición por unidad de tiempo satisfacen

$$\boxed{\frac{W_{m\leftarrow n}}{W_{n\leftarrow m}} = \frac{P_m}{P_n} = \mathrm{e}^{-(E_m-E_n)/\mathrm{k_B}T}\,, \qquad \forall\ m,n} \tag{F.4}$$

En la práctica, es conveniente introducir la *probabilidad de transición* $\mathcal{P}_{n\leftarrow n'}$ *durante un intervalo de tiempo dado* Δt

$$\mathcal{P}_{n\leftarrow n'} = W_{n\leftarrow n'}\,\Delta t \qquad \left(\begin{array}{l}\text{Probabilidad de Transición de } |n'\rangle \text{ a } |n\rangle \\ \text{en el intervalo } [t, t+\Delta t]\end{array}\right)$$

tal que

$$\boxed{\frac{\mathcal{P}_{m\leftarrow n}}{\mathcal{P}_{n\leftarrow m}} = \mathrm{e}^{-(E_m-E_n)/\mathrm{k_B}T}\,, \qquad \forall\ m,n} \tag{F.5}$$

como se ilustra en la Figura (F.1).

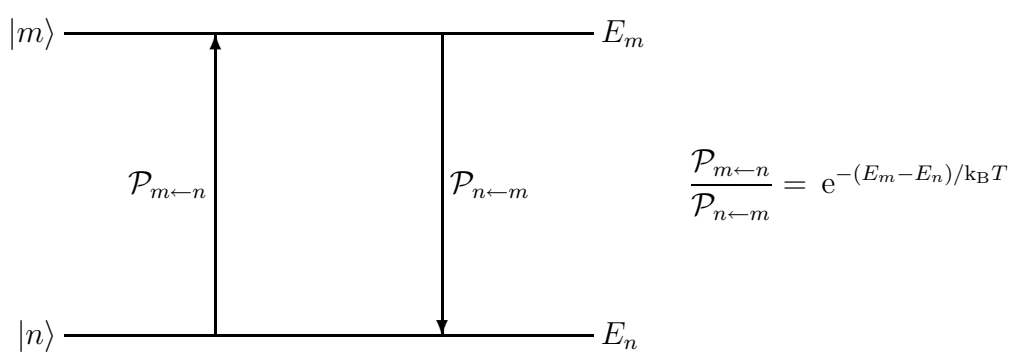


Figura F.1: Ilustración de las transiciones entre dos estados $|m\rangle$ y $|n\rangle$ de energías E_m y E_n, respectivamente, con $E_m > E_n$. Note que las transiciones a estados de mas baja energía (por ejm. . . , $|m\rangle \to |n\rangle$) *son mas probables* que las transiciones hacia altas energías (por ejm. . . , $|n\rangle \to |m\rangle$). Debido a la existencia de un estado fundamental se establece una especie de *efecto compensatorio* que genera una situación de equilibrio.

Puesto que una de las dos probabilidades de transición en la expresión (F.5) es indeterminada podemos escoger una de ellas en forma arbitraria. Por ejm, la

elección mas simple resulta ser el llamado *Algoritmo de Metropolis*[8]

Algoritmo de Metropolis

$$\mathcal{P}_{m\leftarrow n} = \begin{cases} 1 \quad , & \text{si} \quad E_m \leq E_n \\ \mathrm{e}^{-(E_m - E_n)/\mathrm{k_B}T} \, , & \text{si} \quad E_m > E_n \end{cases} \tag{F.6}$$

Otra selección habitual es el llamado *Algoritmo del Baño Térmico*

Algoritmo del Baño Térmico

$$\mathcal{P}_{m\leftarrow n} = \mathrm{f}\left(E_m - E_n\right) \tag{F.7}$$

donde $\mathrm{f}\left(E\right) = \left(\mathrm{e}^{E/\mathrm{k_B}T} + 1\right)^{-1}$ es la función de distribución de Fermi-Dirac[9].

Si en cierto estadio del proceso iterativo, la configuración del sistema corresponde al estado $|n\rangle$; el algoritmo (F.6) o (F.7), entre otras posibilidades, permite decidir si se acepta la transición hacia el estado $|m\rangle$. Note que, en general, la energía E_i del estado $|i\rangle$ es extensiva en el sentido termodinámico tal que el candidato $|m\rangle$ hacia donde el sistema realiza la transición $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$ debe ser tal que $E_m - E_n$ sea una cantidad intensiva en el sentido termodinámico. Ello se logra realizando *solo pequeños desplazamientos* en el espacio de estados.

Note que las bases físicas del método de Recocido Simulado descansan esencialmente sobre la *Condición de Equilibrio Detallado* (F.3). Alguna prueba de que este es un buen punto de partida, para justificar el método, es una tarea dificil de construir. En cualquier caso

- El método se ha tratado de construir sobre bases generales e independiente de los detalles *físicos* de un sistema particular.
- La experiencia de mas de cinco décadas de aplicaciones a diversos sistemas le confieren una buena dosis de confianza.
- Su difusión se ha generalizado debido a su simplicidad y relativa facilidad de implementación computacional en forma independiente de las complejidades del sistema en estudio lo cual, a su vez, ha permitido la comparación con numerosos resultados experimentales.

[8] N. Metropolis, A. W. Rosenblut, M. N. Rosenblut, A. H. Teller, E. Teller: J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

[9] Note que $\mathrm{f}\left(\epsilon\right)/\mathrm{f}\left(-\epsilon\right) = \mathrm{e}^{-\epsilon/\mathrm{k_B}T}$.

- Su extensión a otras areas del conocimiento (por ejm. . . , astronomía, economía, diseño de circuitos electrónicos, etc. . .) es simple.

La implementación del método de Recocido Simulado a $T = 0\,\mathrm{K}$ permite determinar el mínimo de la energía E (ver expresión (F.1)). Sin embargo ello no se realiza directamente. Se empieza usualmente con valores altos de la temperatura T y se reduce esta hasta arribar *lentamente* a $T = 0\,\mathrm{K}$. Esta circunstancia permite su aplicación a diversas areas donde el problema fundamental se reduce a la minimización de una función.

F.3. Implementación del Recocido Simulado

Dado un sistema físico el propósito básico del método de Recocido Simulado es determinar la región del espacio de fases que es compatible con sus condiciones de equilibrio termodinámico a una temperatura dada[10] T. Los pasos a seguir son los siguientes:

1. SELECCIONANDO UNA CONFIGURACIÓN O ESTADO CANDIDATO, A SER LA PRÓXIMA CONFIGURACIÓN, A UNA TEMPERATURA DADA T: Supongamos que el sistema se encuentra en una configuración o estado $|n\rangle$ con energía E_n. Usualmente, se escoge al azar un estado $|m\rangle$, con energía E_m, con algun criterio que es usualmente específico al sistema en estudio. El estado $|m\rangle$ seleccionado es el *candidato* a ser *posiblemente* escogido como nueva configuración del sistema.

2. ACEPTANDO O RECHAZANDO UNA TRANSICIÓN: A la temperatura T, el movimiento o transición desde el estado $|n\rangle$ hacia el estado $|m\rangle$, del paso anterior, se acepta con probabilidad $P_{m\leftarrow n}$ o, equivalentemente, se rechaza con probabilidad $1 - P_{m\leftarrow n}$. En la práctica, ello se realiza de la siguiente manera:

   a) Genere un número r *distribuído uniformemente* al azar en el intervalo $[0, 1)$.

   b) Si $r < P_{m\leftarrow n}$, la transición al estado $|m\rangle$ es ejecutada. En otras palabras, cambiamos la configuración del estado $|n\rangle$ al estado $|m\rangle$.

   c) En caso contrario ($r \geq P_{m\leftarrow n}$) el sistema permanece en su configuración previa $|n\rangle$.

[10] En el conjunto canónico, por ejm. . . , esta región no está delimitada por *" fronteras "* bien definidas. En otras palabras, solo nos referimos a ella como la región donde el punto representativo del sistema en el espacio de fases se encuentra a lo largo de su evolución temporal.

Enfatizamos que la transición $|n\rangle \to |m\rangle$ ocurre en dos pasos (pasos 1 y 2):

I. Escogencia, con algun mecanismo aleatorio, de la posible *configuración o estado candidato* $|m\rangle$ a ser la nueva configuración.

II. El candidato $|m\rangle$ se acepta con probabilidad $P_{m\leftarrow n}$.

3. Los pasos 1 y 2 se repiten, a una temperatura dada T, un número $\tau_0 + \tau$ de veces o iteraciones. Se *espera* que el sistema se haya ubicado en cierta región del espacio de fases, compatible con el equilibrio termodinámico, despues de *las primeras* τ_0 iteraciones: Un proceso que denominamos *Termalización*[11]. Durante *las restantes* τ iteraciones, donde presumimos que el movimiento en el espacio de fases corresponde a la situación de equilibrio termodinámico a la temperatura T, podemos evaluar promedios $\langle A\rangle_T$ de observables $\mathrm{A}\left(|n\left(t\right)\rangle\right)$ que, en la iteración[12] t–ésima, dependen de la configuración $|n\left(t\right)\rangle$:

$$\boxed{\langle A\rangle_T = \frac{1}{\tau}\sum_{t=\tau_0}^{\tau_0+\tau-1} \mathrm{A}\left(|n\left(t\right)\rangle\right)} \tag{F.8}$$

$\langle A\rangle_T$ es un promedio a lo largo de una trayectoria en el espacio de fases o espacio de estados. $\langle A\rangle_T$ es, obviamente, dependiente de la temperatura T a traves *del uso* de las probabilidades $\{P_{m\leftarrow n}\}$ del paso 2.

Usualmente seleccionamos, al inicio de la simulación, una temperatura relativamente alta para evitar que el sistema quede atrapado en mínimos locales. Una manera de elegir la temperatura inicial T_0 es ensayar con diversas configuraciones, seleccionadas al azar, del sistema con el propósito de obtener valores mínimos y máximos ϵ_{min} y ϵ_{max} asociados, por supuesto, a algun par de configuraciones. La temperatura inicial T_0 debe escogerse, por ejm. . . , *mayor* que $\epsilon_{max} - \epsilon_{min}$:

$$T_0 > \epsilon_{max} - \epsilon_{min} \qquad \text{o/y} \qquad T_0 \gg \epsilon_{max} - \epsilon_{min}$$

En algunos casos, este proceso se realiza por *simple inspección*.

Una vez que se ha realizado el proceso de simulación a una temperatura dada T_ℓ (la $(\ell+1)$–ésima temperatura), esta puede reducirse *ligeramente* y proceder a un nuevo proceso de simulación a la temperatura $T_{\ell+1}$. Existen, *entre muchas opciones*, dos formas habituales de reducir la temperatura:

[11] Quizás por un abuso del lenguaje.

[12] Note que el *índice discreto de iteración* t reemplaza al tiempo.

1. EXPONENCIAL:

$$\boxed{T_\ell = \alpha T_{\ell-1}\,; \qquad \ell \geq 1\,, \quad \alpha \lesssim 1} \tag{F.9}$$

la cual equivale a $T_\ell = \alpha^\ell\, T_0$. Puesto que $\alpha \lesssim 1$ esta puede aproximarse por

$$T_\ell = T_0\, \mathrm{e}^{\ell\, \ln \alpha} = T_0\, \mathrm{e}^{\ell\, \ln(1-[1-\alpha])} \approx T_0\, \mathrm{e}^{-(1-\alpha)\ell}$$

de la cual deriva el nombre de *decaimiento exponencial*. Note que $T_\ell \gtrsim 0$ si $\ell \gg 1/\,(1-\alpha)$ tal que $(1-\alpha)^{-1}$ es una escala para el número de valores de temperatura usados a lo largo de una simulación. Por ejm..., $\alpha = 0{,}999$ implica que $T_\ell \gtrsim 0$ cuando $\ell \gg 1000$. Por ejm..., podríamos *saltar directamente* a una simulación a $T = 0\,\mathrm{K}$ cuando $\ell = 1500$ en cuyo caso habríamos obtenido, por ejm..., el mínimo de la energía de acuerdo a (F.1).

En cualquier caso; el valor máximo ℓ_{max} de ℓ, tal que $T_{min} \gtrsim 0$ es la temperatura mínima que usamos antes de *saltar directamente* a $T = 0\,\mathrm{K}$, viene dado por

$$\alpha^{\ell_{max}}\, T_0 \leq T_{min} \quad \Longrightarrow \quad \ell_{max} \geq \frac{\ln\,(T_{min}/T_0)}{\ln \alpha}$$

Por ejm...

$$(\ T_0 = 5\,\mathrm{K}\,, \quad T_{min} = 0{,}01\,\mathrm{K}\,, \quad \alpha = 0{,}999\ ) \qquad \Longrightarrow \qquad \ell_{max} = 6212$$

2. LOGARÍTMICO:

$$\boxed{T_\ell = \frac{T_0 \ln 2}{\ln\,(2+\ell)}\,, \qquad \ell \geq 0} \tag{F.10}$$

Esta varía muy lentamente para $\ell \gg 1$. En efecto

$$T_\ell|_{\ell\gg 1} \approx \frac{T_0 \ln 2}{\ln \ell + 2/\ell} \approx T_0\, \frac{\ln 2}{\ln \ell}\left(1 - \frac{2}{\ell \ln \ell}\right)$$

El factor $2 \ln 2/\left[\ell\,(\ln \ell)^2\right]$ *varía muy lentamente* cuando $\ell \gg 1$.

Note que la esencia del método de Recocido Simulado es una caminata en el espacio de fases, realizada por el sistema en estudio, la cual es gobernada por *reglas aleatorias o " fuerzas " aleatorias*. En otras palabras, la dinámica del sistema es substituída por reglas (que son independientes de los detalles del sistema) cuyo único propósito es *colocar* el sistema

en la región representativa del espacio de fases que es compatible con las condiciones particulares que atañen a su equilibrio termodinámico. Una vez que se logra este propósito se procede al proceso de "*medida*". Ver Figura (F.2).

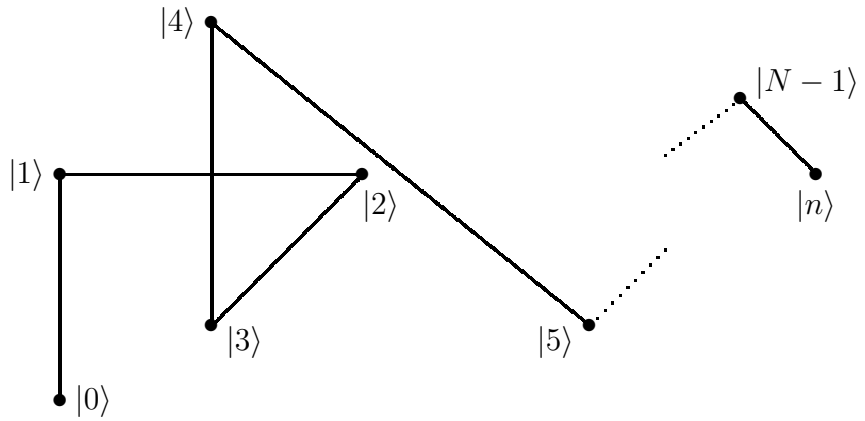


Figura F.2: Ilustración de una *caminata* en el espacio de fases que parte de $|0\rangle$ y, despues de N pasos, arriba a $|n\rangle$. Dadas las reglas para realizar una transición arbitraria ($|m\rangle \to |m'\rangle$), la probabilidad de encontrarse en $|n\rangle$ puede ser calculada, cuando $N \to \infty$, sumando sobre todos los caminos posibles que empiezan en $|0\rangle$ y terminan en $|n\rangle$. *Como ejercicio, construya los argumentos necesarios que muestran que el resultado (con el método del Recocido Simulado) debe ser* $\propto \mathrm{e}^{-E_n/\mathrm{k_B}T}$ *donde* E_ℓ *es la energía del estado* $|\ell\rangle$.

F.4. Ejemplos[13]

En esta sección mostraremos ejemplos de naturaleza extremadamente simple. Tratamos de mantener la simplicidad de los modelo expuestos. a continuación, puesto que el propósito básico es ilustrar el método de Recocido Simulado sin desviar la atención hacia los detalles de un modelo particular.

F.4.1. Una partícula de masa infinita

Consideremos el caso unidimensional de una partícula de masa infinita, en Mecánica Estadística Clásica, en presencia del potencial $\mathrm{V}(x) = |x|$. El hamilto-

[13]Para propósitos computacionales las unidades *siempre* son adimensionales.

niano viene dado por

$$\mathrm{H}\,(x) = |x| \ , \qquad \left(\begin{array}{l} x\text{: Coordenada de la partícula a lo} \\ \text{largo del eje } x. \end{array} \right)$$

El propósito del presente ejemplo es medir la *distancia media al origen* $\langle |x| \rangle$ a una temperatura dada T. El *valor teórico esperado* $\langle |x| \rangle_{teor.}$ y su desviación standard $\Delta\,|x|$ vienen dados por[14]

$$\langle |x| \rangle_{teor.} = T \ , \qquad \Delta\,|x| = \sqrt{\left\langle |x|^2 \right\rangle_{teor.} - \langle |x| \rangle^2_{teor.}} \ = T$$

tal que podemos esperar grandes fluctuaciones alrededor del valor medio, o en otras palabras: $\langle |x| \rangle \ \lesssim 2T$. Ello es consecuencia de haber realizado un ejemplo con una sola partícula y no se relaciona, en forma alguna, al método de Recocido Simulado. Para remediar ello, uno debe considerar un gas de N partículas idénticas y realizar promedios sobre todas las partículas del gas. En tal caso, las fluctuaciones son proporcionales a $N^{-1/2}$.

En particular, realizaremos la simulación, propuesta arriba, tomando en cuenta las siguientes consideraciones:

- En el instante inicial, colocaremos la partícula en la coordenada `XINI` $= 3T$. Es decir, relativamente lejos de la región $\left\{ x \ \ni \ |x| \ \lesssim T \right\}$ donde esperamos que la partícula realize su *paseo habitual*, en equilibrio termodinámico, a la temperatura T. De esta forma no prejuiciamos o favorecemos, para el propósito de ilustrar el Recocido Simulado, el resultado de la simulación.

- Cuando la partícula se encuentra en la coordenada x, escogemos como posible candidata a nueva coordenada a $x + \delta x$ donde $\delta x \neq 0$ es generado *al azar* con una distribución uniforme de probabilidades en el intervalo $[-1, 1)$.

  - Si $|x + \delta x| - |x| \ \leq \ 0$ la transición a la nueva coordenada $x + \delta x$ es aceptada: Es decir, movemos la partícula a la nueva coordenada $x + \delta x$.
  - En caso contrario (si $|x + \delta x| - |x| > 0$) aceptaremos la transición, a la nueva coordenada $x + \delta x$, con probabilidad $\mathrm{e}^{-(|x+\delta x|-|x|)/T}$. Para ello, generamos un número r, *al azar*, con una distribución uniforme de probabilidades en el intervalo $[0, 1)$:
    - Si $r < \ \mathrm{e}^{-(|x+\delta x|-|x|)/T}$ la transición a la nueva coordenada $x + \delta x$ es aceptada.

---

[14] $$\langle \cdots \rangle_{teor.} \ \equiv \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \cdots \mathrm{e}^{-|x|/T}}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \mathrm{e}^{-|x|/T}} \ = \ \frac{1}{2T} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \cdots \mathrm{e}^{-|x|/T}$$

- En caso contrario $\left(r \geq \mathrm{e}^{-(|x+\delta x|-|x|)/T} \right)$ la partícula permanece en la coordenada x.

- El programa `partInfi0.cc` realiza 5 simulaciones, con diferentes semillas del generador de numeros aleatorios, con los valores[15]:

$$T = 10\,, \qquad \tau_0 = 1000\,, \qquad \tau = 9000\,,$$

A lo largo de los τ pasos el valor medio $\langle |x| \rangle$, a la temperatura T, *" se mide "* de acuerdo a la expresión

$$\langle |x| \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{t=\tau_0}^{\tau_0+\tau-1} |x\,(t)|$$

la cual ignora los primeros τ_0 pasos (el 10 % del total) los cuales corresponden al proceso de *" termalización "* a la temperatura T.

[15] Ver aparte 3. en la pág. 205.

```
// partInfi0.cc
#include<cmath>
#include<cstdlib>
#include<ctime>
#include<iostream>
using namespace std;
/*************************************************************/
const char *SEP="##############################\n";
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const unsigned char NENSAYOS=5; // Numero de ensayos.
const double T=10.0;            // Temperatura.
const double XINI=3.0*T;        // Posicion inicial.
const double EINI=abs(XINI);    // Energia inicial de la particula.
const size_t TAU=9000U;         // Iteraciones para "medir" <|x|>.
const size_t TAU0=1000U;        // Iteraciones para "termalizar".
/*************************************************************/
double medicion(double &error);
void transicion(double &x,double &energia);


// Genera un numero al azar en [0,1).
inline double rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


int main()
{
 double error;

 cout<<SEP;
 for ( unsigned char i=0 ; i<NENSAYOS ; ++i ) {
     cout<<"<|x|> teorico = "<<T<<endl;
     cout<<"<|x|> medido  = "<<medicion(error)<<endl;
     cout<<"Error         = "<<error<<" %\n"<<SEP;
 }

 return 0;
}
```

```
double medicion(double &error)
{
 static size_t semilla=size_t(time((time_t *)0));
 double energia=EINI,x=XINI;

 // Inicializa el generador de numeros al azar.
 srand(semilla++);

 size_t t=0; // Termalizacion.
 while ( t<TAU0 ) transicion(x,energia),++t;

 double absXMedido=0;
 for ( t=0 ; t<TAU ; ++t ) { // Medicion.
     transicion(x,energia);
     absXMedido+=abs(x);
 }
 absXMedido/=TAU;
 error=abs(1.0 - absXMedido/T)*100.0; // Error porcentual.

 return absXMedido;
}


void transicion(double &x,double &energia)
{
 static double de,energiaNueva,xNuevo;

 do xNuevo=2.0*rand01() - 1.0; while ( xNuevo==0 );
 xNuevo+=x;
 energiaNueva=abs(xNuevo);
 de=energiaNueva - energia;
 if (  ( de<=0 ) || ( rand01()<exp(-de/T) )  ) {
    x=xNuevo;
    energia=energiaNueva;
 }
}
```

Una ejecución típica del programa anterior produce el resultado:

```
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 11.0039
Error         = 10.0386 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 10.514
Error         = 5.13997 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 7.78264
Error         = 22.1736 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 8.24533
Error         = 17.5467 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 17.509
Error         = 75.0904 %
##############################
```

Note la disparidad de los errores los cuales se deben al considerar una sola partícula. Sin embargo, es notable que los valores *medidos* se encuentran dentro del rango esperado $\left(\ |x| \ \lesssim 2T = 20 \ \right)$. En la sección siguiente estudiaremos un gas de tales partículas sin interacción entre ellas.

F.4.2. Un gas de partículas de masa infinita

En esta sección consideramos el caso de la sección anterior salvo que consideramos un gas de N partículas no interactuantes. El valor medio $\langle |x| \rangle_t$ en el instante t (*promedio instantaneo sobre el gas*) se define de acuerdo a:

$$\langle |x| \rangle_t = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} |\mathrm{x}_i \left(t\right)|$$

donde $\mathrm{x}_i \left(t\right)$ es la posición de la partícula i–ésima en el instante t (o iteración t–ésima).

El *valor medio " medido "* $\langle |x| \rangle$ por el método de Recocido Simulado viene dado por:

$$\langle |x| \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{t=\tau_0}^{\tau_0+\tau-1} \langle |x| \rangle_t$$

El programa `partInf1.cc` (en `C++`) implementa 5 ensayos con el método de Recocido Simulado (los parámetros son explícitos al inicio del programa):

```
// partInfi1.cc
#include<cmath>
#include<cstdlib>
#include<ctime>
#include<iostream>
#include<vector>
using namespace std;
const char *SEP="##############################\n";
const double T=10.0;            // Temperatura.
const double AMPLITUD=3.0*T;    // Amplitud para inicializar.
const size_t NPART=100U;        // Numero de particulas.
const size_t TAU=9000U;         // Iteraciones para "medir" <|x|>.
const size_t TAU0=1000U;        // Iteraciones para "termalizar".
const unsigned char NENSAYOS=5; // Numero de ensayos.
/*************************************************************/
struct PartInf
{
       double x,e; // x: posicion. e: energia
       static const double RANDMAX1;
       static double De;
       static PartInf Nuevo;
       static double Rand01();

       PartInf(): x(0), e(0) {}

       PartInf& operator +=(const PartInf &p);

       void asigne(double xVal) { x=xVal; e=abs(x); }
       void transicion(double temper);

       friend double medicion(vector<PartInf> &v,double temper,
                              size_t tau,double &error);
};
const double PartInf::RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
double PartInf::De;
PartInf PartInf::Nuevo;
```

```
// Genera un numero al azar en [0,1).
inline double PartInf::Rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline PartInf& PartInf::operator +=(const PartInf &p)
{
 x+=p.x;
 e=abs(x);
 return *this;
}


void PartInf::transicion(double temper)
{
 do Nuevo.x=2.0*Rand01() - 1.0; while ( Nuevo.x==0 );
 Nuevo+=(*this);
 De=Nuevo.e - e;
 // Algoritmo de Metropolis
 if (  ( De<=0 ) || ( Rand01()<exp(-De/temper) )  ) *this=Nuevo;
}
```

```
double medicion(vector<PartInf> &v,double temper,size_t tau,
                double &error)
{
 double absXMedio=0,xt;
 size_t i,j;
 for ( i=0 ; i<tau ; ++i ) { // Medicion
     xt=0;
     for ( j=0 ; j<v.size() ; ++j ) { // Sobre el gas
         v[j].transicion(temper);
         xt+=v[j].e;
     }
     xt/=v.size();
     absXMedio+=xt;
 }
 absXMedio/=tau;

 error=abs(1.0 - absXMedio/T)*100.0;

 return absXMedio;
}
/*************************************************************/
```

```
int main()
{
 vector<PartInf> p(NPART);
 size_t i=0,j,semilla=size_t(time((time_t *)0));

 while ( i<p.size() ) {
       srand(semilla++);
       p[i].asigne((2.0*PartInf::Rand01() - 1.0)*AMPLITUD);
       for ( j=0 ; j<TAU0 ; ++j ) p[i].transicion(T);
       ++i;
 }

 double error;
 cout<<SEP;
 for ( unsigned char i=0 ; i<NENSAYOS ; ++i ) {
     srand(semilla++);
     cout<<"<|x|> teorico = "<<T<<endl;
     cout<<"<|x|> medido  = "<<medicion(p,T,TAU,error)<<endl;
     cout<<"Error         = "<<error<<" %\n"<<SEP;
 }

 return 0;
}
```

Una ejecución típica de este programa genera el resultado:

```
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 11.4595
Error         = 14.5946 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 10.2181
Error         = 2.18097 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 9.80664
Error         = 1.93359 %
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 9.86326
Error         = 1.36744 %
```

```
##############################
<|x|> teorico = 10
<|x|> medido  = 9.269
Error         = 7.31 %
##############################
```

el cual muestra la cercanía al valor medio teórico $\langle |x| \rangle_{teor.} = T = 10$.

F.4.3. Sistemas de Ecuaciones o/y Minimización de Funciones

Consideremos el sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} x + \ \ y = 2 \\ x + 3y = 4 \end{cases} \tag{F.11}$$

El propósito de esta sección es encontrar las soluciones reales ($x, y \in \mathbf{R}$) de tal sistema. Ello equivale a minimizar la función $\mathrm{g}\,(x, y)$:

$$\mathrm{g}\,(x, y) \equiv |x + y - 2| + |x + 3y - 4|$$

Es decir[16], si es posible encontrar los valores de x e y tales que $\mathrm{g}\,(x, y) = 0$ habremos encontrado la solución del problema. Note que *cero* es el mínimo de la función $\mathrm{g}\,(x, y)$ cuando el sistema de ecuaciones tiene solución.

Al usar el método de Recocido Simulado realizamos los siguientes pasos (ver sección F.3):

1. A una temperatura dada, el punto (x, y) realiza 1000 saltos generados con una distribución uniforme de probabilidades en un círculo de radio unidad y centro (x, y)[17]. 100 de estos saltos se ignoran (termalización) y los restantes 900 son usados para evaluar la posición media $\langle (x, y) \rangle$ del punto (x, y) a una temperatura dada T. Al reducir la temperatura, $\langle (x, y) \rangle$ se toma como nuevo punto de partida.

2. La temperatura es reducida con

$$T_\ell = 0{,}99\, T_{\ell-1}\,, \qquad \ell \geq 1\,; \qquad T_0 = 10$$

[16] El problema es equivalente al de equilibrio termodinámico de un gas bidimensional de partículas idénticas no interactuantes en presencia del potencial $\mathrm{g}\,(x, y)$.

[17] Escoga un par de números ξ_r y ξ_θ los cuales son generados por una distribución de probabilidades uniforme en el intervalo $[0, 1)$. El desplazamiento $(\delta x, \delta y)$, a partir de (x, y), viene dado por $\delta x = R\sqrt{\xi_r}\ \cos(2\pi\xi_\theta)$ y $\delta y = R\sqrt{\xi_r}\ \mathrm{sen}\,(2\pi\xi_\theta)$. Ello equivale a generar el par $(\delta x, \delta y)$ con una distribución de probabilidades uniforme $\Theta\left(R - \sqrt{(\delta x)^2 + (\delta y)^2}\right)/\pi R^2$ en un círculo de radio R con centro en el origen.

hasta que $T_\ell \leq T_{min} = 0{,}001$. La próxima temperatura es $T = 0$. A esta temperatura esperamos haber encontrado la solución del sistema de ecuaciones propuesto mas arriba.

El programa `sistema0.cc`, en `C++`, implementa estos pasos y permite generar la Figura F.3 la cual describe la *evolución* hacia la *solución correcta* del sistema de ecuaciones (F.11).

```
// sistema0.cc
#include<cmath>
#include<cstdlib>
#include<ctime>
#include<iostream>
#include<vector>
using namespace std;
const double TMIN=0.001; // Temperatura minima antes de T = 0.
const double T0=10.0;    // Temperatura Inicial.
const size_t TAU0=100U;  // Iteraciones para "termalizar" (x,y).
const size_t TAU=900U;   // Iteraciones para "medir" <(x,y)>.
/*************************************************************/
struct ParXY
{
       double x,y,e; // e: energia = g(x,y)
       static const double DOSPI,RANDMAX1;
       static double De,Fase;
       static ParXY Nuevo,P;
       static double Fermi(double de,double temper);
       static double Rand01();

       ParXY(): x(0), y(0), e(43.0) {}
       ParXY(double xx,double yy);

       bool operator !() const;
       ParXY& operator +=(const ParXY &p);
       ParXY operator /(double den) const; // den: denominador

       double energia() const;
       ParXY& termoMedicion(size_t tau0,size_t tau,double temper);
       ParXY& transicion(double temper);
};
```

```
const double ParXY::DOSPI=2.0*M_PI;
const double ParXY::RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
double ParXY::De,ParXY::Fase;
ParXY ParXY::Nuevo,ParXY::P;


double ParXY::Fermi(double de,double temper)// Fermi-Dirac
{
 if ( de!=0 ) {
    if ( temper>0 ) {
       de/=temper;
       if ( de<0 ) return 1.0/(exp(de) + 1.0);
       de=exp(-de);
       return de/(1.0 + de);
    } else return ( de<0 );
 } else return 0.5;
}


inline double ParXY::Rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline bool ParXY::operator !() const
{
 return (  ( x==0 ) && ( y==0 )  );
}


inline double ParXY::energia() const
{
 return abs(x + y - 2.0) + abs(x + 3.0*y - 4.0);
}


inline ParXY::ParXY(double xx,double yy): x(xx), y(yy)
{
 e=energia();
}
```

```
inline ParXY& ParXY::operator +=(const ParXY &p)
{
 x+=p.x;
 y+=p.y;

 return *this;
}


inline ParXY ParXY::operator /(double den) const
{
 return ParXY(x/den,y/den);
}


ParXY& ParXY::termoMedicion(size_t tau0,size_t tau,double temper)
{
 size_t i=0;
 while ( i<tau0 ) transicion(temper),++i; // Termalizando

 // Midiendo
 P.x=P.y=0;
 for ( i=0 ; i<tau ; ++i ) P+=transicion(temper);
 *this=P/tau;

 e=energia();

 return *this;
}
```

```
ParXY& ParXY::transicion(double temper)
{
 do { // Escogiendo un salto
     Nuevo.y=Rand01();
     if ( Nuevo.y>0 ) Nuevo.y=sqrt(Nuevo.y);
     if ( Nuevo.y>0 ) {
        Fase=DOSPI*Rand01();
        Nuevo.x=Nuevo.y*cos(Fase);
        Nuevo.y*=sin(Fase);
     } else Nuevo.x=Nuevo.y=0;
 } while ( !Nuevo );
 Nuevo+=(*this);
 Nuevo.e=Nuevo.energia();

 // Algoritmo del B. Termico para decidir si acepta el salto
 // propuesto arriba.
 if ( Rand01()<Fermi(Nuevo.e - e,temper) ) *this=Nuevo;

 return *this;
}


int main()
{
 ParXY p;
 const double factor=0.99;

 cerr<<"T0 = "<<T0<<endl;
 double t=T0;
 do cout<<t<<' '<<p.termoMedicion(TAU0,TAU,t).e<<endl;
 while ( (t*=factor)>=TMIN );
 cout<<0<<' '<<p.termoMedicion(TAU0,TAU,0).e<<endl;
 cerr<<p.x<<' '<<p.y<<endl; // Solucion.

 return 0;
}
```

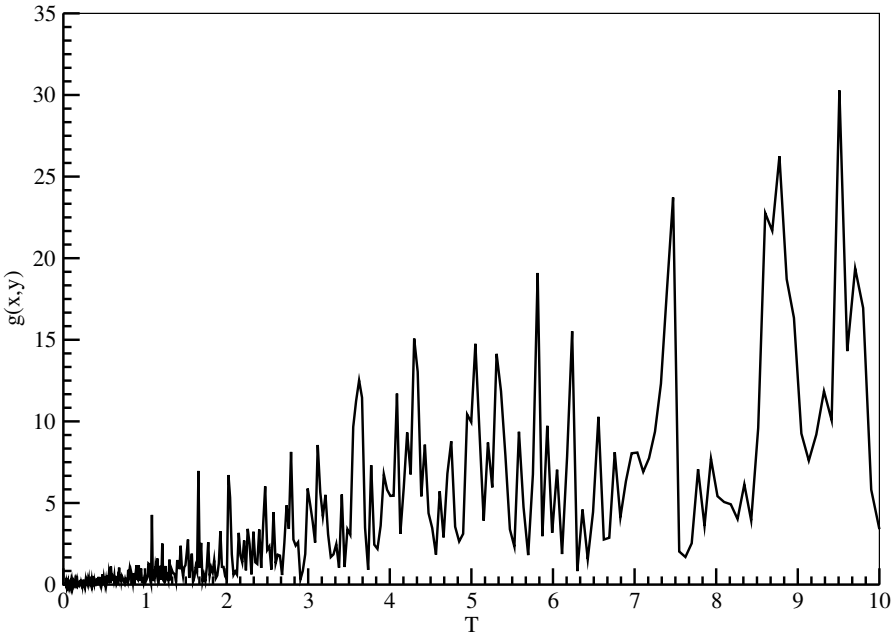


Figura F.3: Datos generados por el programa, en `C++`, `sistema0.cc`. A altas temperaturas ($T \gtrsim 3$, por ejm...) se observan grandes fluctuaciones de la *" energía "* $\mathrm{g}(x, y)$ pero la tendencia es a reducir la energía a bajas temperaturas. A $T = 0$ encontramos $x = 1{,}00034$ e $y = 0{,}999962$ con $\mathrm{g}(x, y) = 0{,}000534132$ lo cual equivale a un error porcentual de $3{,}42 \times 10^{-2}\,\%$. La solución exacta es $(1, 1)$ con $\mathrm{g}(1, 1) = 0$. Con un sistema de ecuaciones mas complicado que (F.11), la solución aproximada podría ser tomada como punto de partida de algun algoritmo numérico.

F.4.4. El modelo de Ising en Dos Dimensiones

La energía de una configuración dada $\{\sigma_i\}$ del modelo de Ising, en presencia de un campo magnético $H > 0$, viene dada por

$$\mathrm{E}\left(\{\sigma_i\}\right) = -\frac{1}{2}\, J \sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i \sigma_j \; - H \sum_i \sigma_i; \qquad \sigma_i = \pm 1\,, \quad J > 0$$

$\langle i, j\rangle$ indica que la suma se realiza solo entre vecinos mas cercanos en una red bidimensional infinita la cual, por simplicidad, es cuadrada (el número de vecinos mas cercanos a un sitio dado es 4).

En equilibrio termodinámico, a la temperatura T, deseamos evaluar el *momento magnético medio por sitio* $\mathrm{m}\,(T)$ (con campo magnético nulo):

$$\mathrm{m}\,(T) = \lim_{H\to 0^+} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle \;, \qquad \langle \cdots \rangle \equiv \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} \cdots \, \mathrm{e}^{-\mathrm{E}(\{\sigma_i\})/\mathrm{k_B}T}}{\sum_{\{\sigma_i\}} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{E}(\{\sigma_i\})/\mathrm{k_B}T}}$$

N es el número de sitios. En 1944, Onsager[18] resolvió este problema (el modelo de Ising bidimensional infinito) lo cual se conoce actualmente como

La Solución de Onsager

$$\mathrm{m}\,(T) \;=\; \begin{cases} \left[1 - \mathrm{senh}^{-4}\left(\dfrac{2J}{\mathrm{k_B}T}\right)\right]^{1/8}, & T \le T_c \\[2ex] 0 \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad , & T > T_c \end{cases}$$

$$\text{y} \qquad \mathrm{k_B}T_c \;=\; \frac{2J}{\mathrm{arcsenh}\,(1)} = \frac{2J}{\ln\left(1 + \sqrt{2}\,\right)} \approx 2{,}2692\; J$$

la cual describe una transición ferromagnética.

En esta sección, nuestro propósito es realizar una simulación del modelo de Ising bidimensional, mediante el método de Recocido Simulado, que evalua $\mathrm{m}\,(T)$ en una red bidimensional cuadrada 45×45 con condiciones de contorno periódicas las cuales simulan la *ausencia de superficies*. La red consta de $N = 45\,\mathbf{X}\,45 = 2025$ espines.

Para ello tomamos en cuenta las siguientes consideraciones:

1. Escogemos (adimensionalmente)

$$J = \frac{\ln\left(1 + \sqrt{2}\,\right)}{2} \approx 0{,}4407 \qquad \text{tal que} \qquad T_c = 1 \quad (\text{ con } \mathrm{k_B} = 1\,)$$

[18] L. Onsager, Phys. Rev. **65** 117 (1944).

2. Recorremos la red al estilo `"máquina de escribir"`. En un sitio dado ℓ evaluamos el cambio de energía δE_ℓ cuando se realiza el cambio (en un sitio dado ℓ) $\sigma_\ell \to -\sigma_\ell$:

$$\begin{aligned} \delta E_\ell &\equiv -\frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \left[(1-2\delta_{i\ell})\, \sigma_i \right] \left[(1-2\delta_{j\ell})\, \sigma_j \right] - \sigma_i \sigma_j \right\} \\ &= -\frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-2\left(\delta_{i\ell} + \delta_{j\ell}\right) \sigma_i \sigma_j + 4\delta_{i\ell}\delta_{j\ell} \right] \end{aligned}$$

$$\boxed{\delta E_\ell = 2J\sigma_\ell \sum_{\substack{i \\ \langle i,\ell \rangle}} \sigma_i \qquad \left(\begin{array}{l} \text{La suma se realiza sobre los 4} \\ \text{vecinos mas cercanos al sitio } \ell. \end{array} \right)} \tag{F.12}$$

El máximo valor δE_{max} de δE_ℓ, $\forall$ sitio ℓ, es

$$\delta E_{max} = 8J = 4 \ln \left(1 + \sqrt{2} \right) T_c \approx 3{,}5255\, T_c = 3{,}5255$$

Cada *actualización* de un sitio corresponde a *un paso* del sistema en el espacio de fases. La evaluación, a una temperatura dada T, del *momento magnético medio por sitio* $\mathrm{m}\,(T)$ corresponde a un promedio sobre la trayectoria (*sobre los pasos*) en el espacio de fases[19]:

$$\mathrm{m}\,(T) = \frac{1}{\tau} \sum_{t=\tau_0}^{\tau_0+\tau-1} \left[\frac{1}{N} \sum_{\ell=0}^{N-1} \sigma_\ell\,(t) \right], \qquad \left(\begin{array}{l} \text{a una temperatu-} \\ \text{ra dada } T \end{array} \right) \tag{F.13}$$

donde $\sigma_\ell\,(t)$ es el valor que adquiere σ_ℓ, en la iteración o instante de tiempo t, despues de ser *sometido* al algoritmo de Metropolis.

La simulación es realizada por el programa `Ising2D0.cc` (ver pág. 227), en `C++`, con las siguientes consideraciones:

- La temperatura decrece desde T_0 hasta T_{pare} de acuerdo a la regla:

$$T_{n+1} = 0{,}999\, T_n\,, \qquad n \geq 0 \quad \text{y} \quad T_0 = 2$$

$$\text{mientras} \quad T_n \geq T_{pare} \qquad \text{con} \quad T_{pare} = 0{,}1$$

- Acto seguido (cuando $T_n < T_{pare}$), se procede a realizar la simulación a $T = 0$.

[19] Un punto en el espacio de fases corresponde a una configuración dada $\{\sigma_i\}$.

- A una temperatura dada T la muestra se sometió al método de Recocido Simulado durante $\tau_0 + \tau$ iteraciones con

$$\begin{aligned} \tau_0 &= \lfloor 0{,}1 \times 2025 \rfloor = 202\,, \qquad \Big(\approx 10\,\% \Big) \\ \tau &= \lfloor 0{,}9 \times 2025 \rfloor = 1822\,, \qquad \Big(\approx 90\,\% \Big) \end{aligned}$$

  - Las primeras τ_0 iteraciones se destinan al propósito de *termalizar* la muestra a la temperatura T. Es decir; a *colocar* el sistema, en equilibrio termodinámico a la temperatura T, en *su* región representativa del espacio de fases.
  - Las restantes τ iteraciones se destinan al *proceso de medida* como se describe en la expresión (F.13).

El resultado se muestra en la Figura F.4.

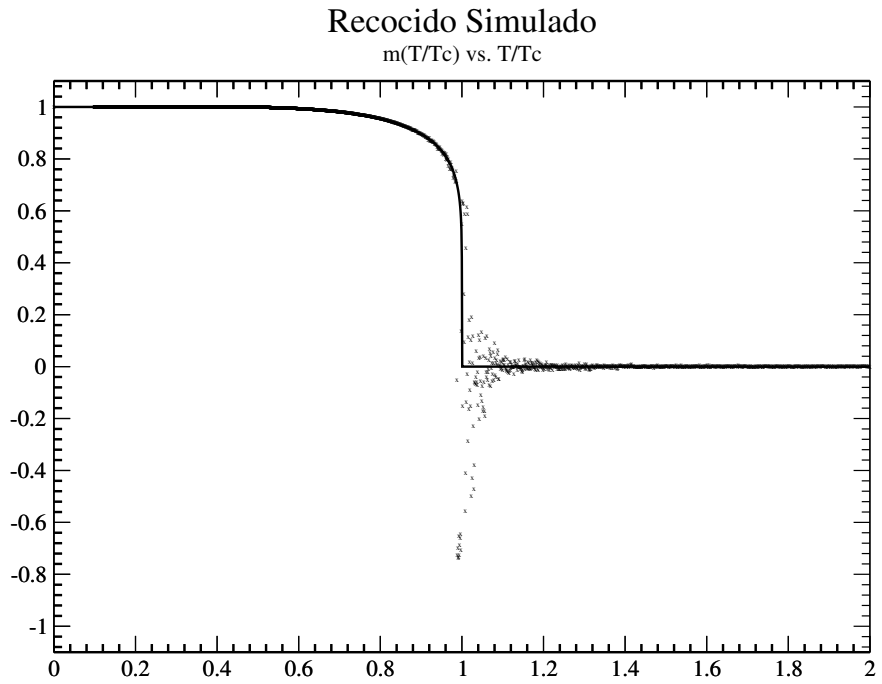


Figura F.4: Recocido Simulado del modelo de Ising bidimensional. Se usó una red cuadrada de 2025 espines, con condiciones de contorno periódicas, para evaluar el *momento magnético medio por sitio* $\left(\sum_{i=0}^{2024} \langle \sigma_i \rangle\right)/2025$ en función de T/T_c. La linea continua es la solución de Onsager en el límite termodinámico (¡¡¡ ∞ espines !!!) mientras los símbolos x son los resultados del Recocido Simulado de la *muestra* de 2025 espines. Note que las discrepancias no son *especialmente notables* cuando $T < T_c$. Alrededor de $T = T_c = 1$ pueden observarse las fluctuaciones del momento magnético medio por sitio. El resultado ha sido generado por el programa, en `C++`, `Ising2D0.cc` (ver pág. 227).

```
// Ising2D0.cc
#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <ctime>
#include <iomanip>
#include <iostream>
#include <vector>
using namespace std;
class Ising2D: public vector<vector<signed char> >
{
      private:
              int intSize;
              size_t nSitios;
              size_t sizet(int i) const;

              // Retorna el momento magnetico de la FILA fila.
              double termalize(int fila,double temper);

              static const double J2,RANDMAX1;
      public:
             // Constructores
             explicit Ising2D(size_t lado);

             // Operadores
             const int& intsize() const { return intSize; }
             const signed char& operator()(int i,int j) const;
             signed char& operator()(int i,int j);

             // Retorna el momento magnetico TOTAL.
             double operator()() const;

             // metodos
             const size_t& sitios() const { return nSitios; }
             static bool Metropolis(double de,double temper);

             static double Onsager(double t); // 0 <= t <=1.
             static double Rand01();

             // Retorna el momento magnetico TOTAL.
             double termalize(double temper);
};
```

```
const double Ising2D::J2=log(1.0 + M_SQRT2); // J2=2*J
const double Ising2D::RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);


inline size_t Ising2D::sizet(int i) const
{
      if ( i<0 )        i+=((-i)/intSize + 1)*intSize;
 else if ( i>=intSize ) i%=intSize;
 return static_cast<size_t>(i);
}


inline double Ising2D::Rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline bool Ising2D::Metropolis(double de,double temper)
{
 if ( temper!=0 ) {
    de/=temper;
    return ( de<=0 ) ? true:( Rand01()<exp(-de) );
 } else return ( de<=0 ); // temper ---> 0+.
}


inline double Ising2D::Onsager(double t)
{
 if (  ( 0<temper ) && ( temper<1.0 )  ) {
    temper=exp(-abs(J2/temper));
    temper=1.0 - pow(2.0*temper/(1.0 - temper*temper),4.0);
    return ( temper<=0 ) ? 0:pow(temper,0.125);
 } else return ( temper<=0 );
}
```

```
Ising2D::Ising2D(size_t lado):vector<vector<signed char> >(lado)
{
 const signed char uno=static_cast<signed char>(1);

 size_t j;
 for ( size_t i=0 ;  i<size() ; ++i ) {
     (*this)[i].resize(size());
     for ( j=0 ; j<size() ; ++j ) (*this)[i][j]=uno;
 }

 intSize=static_cast<int>(size());
 nSitios=size()*size();
}


double Ising2D::operator()() const
{
 double suma=0;

 size_t j;
 for ( size_t i=0 ;  i<size() ; ++i ) {
     for ( j=0 ; j<size() ; ++j ) suma+=(*this)[i][j];
 }

 return suma;
}


inline const signed char& Ising2D::operator()(int i,int j) const
{
 return (*this)[sizet(i)][sizet(j)];
}


inline signed char& Ising2D::operator()(int i,int j)
{
 return (*this)[sizet(i)][sizet(j)];
}
```

```
double Ising2D::termalize(int fila,double temper)
{
 double de,suma=0;
 Ising2D &m=(*this);

 for ( int j=0 ; j<intSize ; ++j ) {
     de=J2*m(fila,j)*(m(fila - 1,j) + m(fila + 1,j)
                      +
                      m(fila,j - 1) + m(fila,j + 1));
     if ( Metropolis(de,temper) ) m(fila,j)=(-m(fila,j));
     suma+=m(fila,j);
 }

 return suma;
}


double Ising2D::termalize(double temper)
{
 double suma=0;

 for ( int i=0 ; i<intSize ; ++i ) suma+=termalize(i,temper);

 return suma;
}
```

```
int main()
{
 srand(6397U);
 Ising2D m(45U);
 const size_t tau0=size_t(0.1*m.sitios());
 const size_t tau=size_t(0.9*m.sitios());
 const double factor=0.999,t0=2.0,tPare=0.1;
 const unsigned long den=((unsigned long)tau)*m.sitios();
 double t=t0;

 cerr<<setprecision(15)<<t<<' '<<m()<<endl;
 double suma;
 size_t n;
 while ( t>=tPare ) {
       for ( n=0 ; n<tau0 ; ++n ) m.termalize(t);
       suma=0;
       for ( n=0 ; n<tau ; ++n )  suma+=m.termalize(t);
       cout<<t<<' '<<(suma/den)<<' '<<Ising2D::Onsager(t)<<endl;
       t*=factor;
 }
 for ( n=0 ; n<tau0 ; ++n ) m.termalize(0);
 suma=0;
 for ( n=0 ; n<tau ; ++n )  suma+=m.termalize(0);
 cout<<0<<' '<<(suma/den)<<' '<<Ising2D::Onsager(0)<<endl;

 return 0;
}
```

F.4.5. La Radiación del Cuerpo Negro[20]

De los cursos de física elemental estamos familiarizados con el estudio (*y la historia*) del equilibrio termodinámico, a una temperatura dada T, de radiación electromagnética *atrapada* en un recipiente a temperatura T.

El 19 de octubre del 1900, Max Planck propuso que $\mathrm{U}(\nu, \mathrm{T})$ (la *energía por unidad de volumen y por intervalo de frecuencia* ν) en equilibrio termodinámico a la temperatura T viene dada por[21]

$$\mathrm{U}_{Planck}(\nu, T) \propto \frac{\nu^3}{\mathrm{e}^{h\nu/\mathrm{k_B}T} - 1} \tag{F.14}$$

[20]Parte de esta sección está basada en el artículo `Einstein and the Quantum Theory`, A. Pais, Review of Modern Physics, Vol. **51**, No. 4, págs. 863–914, October 1979.

[21]Planck M., 1900, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **2**, 202.

donde h es la llamada *constante de Planck*[22].

La propuesta (F.14) respondía a la necesidad de explicar los experimentos recientes de Rubens y Kurlbaum[23]. En particular, era notorio que a medida que las técnicas experimentales se refinaban podían observarse notorias discrepancias con la llamada *Ley Exponencial de Wien*[24]:

$$\mathrm{U}_{Wien}\,(\nu, T) \propto \nu^3\,\mathrm{e}^{-h\nu/\mathrm{k_B}T} \tag{F.15}$$

la cual coincide con la *ley de Planck* (F.14) en el límite de bajas temperaturas o/y altas frecuencias ($h\nu \gg \mathrm{k_B}T$).

Diversas experiencias posteriores mostraron que la ley de Planck (F.14) era siempre un mejor *ajuste* de los datos experimentales que la ley de desplazamiento de Wien (F.15). Confrontados con esta situación, Planck y la comunidad científica de la época ($\gtrsim$ 1900) enfrentaron el reto de desarrollar un esquema teórico que explicara la ley de Planck en vista de su extrema concordancia con los resultados experimentales. Parte de la dificultad teórica era que la física clásica (ecuaciones de Maxwell, etc...) permitía visualizar la radiación electromagnética como un gas de osciladores armónicos con relación de dispersión

$$\omega_{\vec{k}} = 2\pi\nu_{\vec{k}} = ck\,, \qquad \Big(\ c \text{ es la velocidad de la luz }\Big) \tag{F.16}$$

tal que la predicción de la mecánica estadistica clásica corresponde al teorema de equipartición de la energía. Este resultado es conocido como *ley de Rayleigh–Jeans*[25]

$$\mathrm{U}_{RJ}\,(\nu, T) \propto \nu^2\,T \tag{F.17}$$

la cual coincide con la *ley de Planck* (F.14) en el límite de altas temperaturas o/y bajas frecuencias ($h\nu \ll \mathrm{k_B}T$).

El resto de la historia es bien conocida y condujo a la *cuantización del campo electromagnético*:

La radiación electromagnética puede describirse como un conjunto de partículas y su energía es discreta de acuerdo a:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

[22]En 1860, Kirchhoff mostró que la energía por unidad de volumen y por unidad de intervalo de frecuencia es una función de ν y T e independiente de las características particulares del cuerpo que aloja la radiación electromagnética: $\mathrm{U}\,(\nu, T)$. Tal resultado se conoce como *Teorema de Kirchhoff* y Kirchhoff desafió a la comunidad científica a encontrar tal función $\mathrm{U}\,(\nu, T)$.

[23]Rubens H. and F. Kurlbaum, 1900, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl., p. 929.

[24]Propuesta por Wien en 1896 la cual es un caso particular de la *Ley de Desplazamiento de Wien* $\big(\ \mathrm{U}\,(\nu, T) \propto \nu^3 \mathrm{F}\,(\nu/T)\ \big)$ propuesta en 1893.

[25]Derivada independientemente por Rayleigh en junio de 1900 y por Jeans en 1905.

lo cual permite la interpretación de " un gas de n partículas llamadas *fotones* donde cada una de ellas tiene energía $h\nu$ ".

Puesto que:

- el elemento de volumen en el *espacio de vectores de onda–$\vec{k}$* satisface (de acuerdo con la relación (F.16))

$$\mathrm{d}^3\vec{k} \propto \nu^2\,\mathrm{d}\nu$$

- y la energía de *un* fotón es $\propto \nu$

se obtiene que el *número medio de fotones, de frecuencia ν, en equilibrio termodinámico a la temperatura T* es, segun el *ajuste original* de Planck[26] (F.14):

$$\boxed{\langle n\rangle_{Planck} = \frac{1}{\mathrm{e}^{h\nu/\mathrm{k_B}T} - 1}} \tag{F.18}$$

El propósito fundamental de esta sección es:

1. Mostrar que el método de Recocido Simulado permite una *derivación teórica* del resultado (F.18) con la ayuda de ciertas hipótesis razonables.
2. Mostrar una simulación simple, en `C++`, de la *termalización* de un gas de fotones, a la temperatura T, mediante el método de Recocido Simulado.

Derivación Teórica (Recocido Simulado)

Considere un gas de fotones los cuales describen radiación electromagnética de frecuencia ν confinada a un recinto (reservorio a temperatura T) con el cual puede intercambiar fotones de energía $h\nu$. Tal gas es sometido a los siguientes supuestos:

`I.` La energía $E_n \geq 0$ de un gas, que consiste de n fotones, solo depende del número de fotones $n \geq 0$ y es una función creciente de este.

`II.` Solo se permite la absorción o emisión de *un* fotón. Las probabilidades por unidad de tiempo para absorber ($W_\uparrow$) o emitir ($W_\downarrow$) un fotón son *independientes* de n y del tiempo t. Además, $0 < W_\uparrow < W_\downarrow$.

[26] Ver detalles en algún texto elemental de Física Estadística.

Con estas condiciones e introduciendo

$\mathrm{P}_n(t)$: Probabilidad de que el gas, en el instante t, contenga *exactamente* n fotones.

podemos derivar una ecuación de movimiento para $\{\mathrm{P}_n(t)\}$:

$$\begin{aligned}\mathrm{P}_n(t+\Delta t) &= \mathrm{P}_{n-1}(t)\,W_{\uparrow}\Delta t + \mathrm{P}_{n+1}(t)\,W_{\downarrow}\Delta t \\ &+ \\ &\mathrm{P}_n(t)\,(1-W_{\uparrow}\Delta t)\,(1-W_{\downarrow}\Delta t)\ , \qquad n\geq 1\end{aligned}$$

Reemplazando esta en la definición $\dot{\mathrm{P}}_n(t) = \lim_{\Delta t\to 0}\left[\mathrm{P}_n(t+\Delta t)-\mathrm{P}_n(t)\right]/\Delta t$ se obtiene

$$\dot{\mathrm{P}}_n(t) = W_{\uparrow}\mathrm{P}_{n-1}(t) - (W_{\uparrow}+W_{\downarrow})\,\mathrm{P}_n(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_{n+1}(t)\ , \qquad n\geq 1$$

La ecuación de movimiento para $\mathrm{P}_0(t)$ puede obtenerse en forma similar pero es interesante obsevar que ella puede derivarse por consistencia con la condición de normalización de $\{\mathrm{P}_n(t)\}$: $\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{P}_n(t)=1$, $\forall\ t$. En efecto

$$\begin{aligned}-\dot{\mathrm{P}}_0(t) &= \sum_{n=1}^{\infty}\dot{\mathrm{P}}_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left[W_{\uparrow}\mathrm{P}_{n-1}(t) - (W_{\uparrow}+W_{\downarrow})\,\mathrm{P}_n(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_{n+1}(t)\right] \\ &= W_{\uparrow}\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{P}_n(t) - (W_{\uparrow}+W_{\downarrow})\left[\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{P}_n(t)-\mathrm{P}_0(t)\right] \\ &+ \\ &W_{\downarrow}\left[\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{P}_n(t)-\mathrm{P}_0(t)-\mathrm{P}_1(t)\right] \\ &= W_{\uparrow} - (W_{\uparrow}+W_{\downarrow})\left[1-\mathrm{P}_0(t)\right] + W_{\downarrow}\left[1-\mathrm{P}_0(t)-\mathrm{P}_1(t)\right]\end{aligned}$$

lo cual conduce a $\dot{\mathrm{P}}_0(t) = -W_{\uparrow}\mathrm{P}_0(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_1(t)$ y, en resumen, las ecuaciones de movimiento para $\{\mathrm{P}_n(t)\}$ son:

$$\dot{\mathrm{P}}_0(t) = -W_{\uparrow}\mathrm{P}_0(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_1(t) \tag{F.19}$$

$$\dot{\mathrm{P}}_n(t) = W_{\uparrow}\mathrm{P}_{n-1}(t) - (W_{\uparrow}+W_{\downarrow})\,\mathrm{P}_n(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_{n+1}(t)\ , \quad n\geq 1 \tag{F.20}$$

Solo estamos interesados en las soluciones estacionarias $\left(\ \dot{\mathrm{P}}_n(t)=0,\ \forall n\ \right)$ de (F.19) y (F.20)[27] las cuales, por simplicidad, denotamos como P_n, $\forall n$. Estas satisfacen

$$P_1 = \gamma P_0 \tag{F.21}$$

$$(1+\gamma)\,P_n = \gamma P_{n-1} + P_{n+1}\,, \qquad n\geq 1 \tag{F.22}$$

[27]El conjunto de Ecs. (F.19) y (F.20) se conocen como *Modelo de Erlang* en el area de Teoría de Colas y surgió en 1909 en relación con la naciente industria telefónica: Erlang A. K., `Probability`

donde

$$\gamma \equiv \frac{W_\uparrow}{W_\downarrow}, \qquad \Big(\text{ Note que } 0 < \gamma < 1 \Big) \tag{F.23}$$

Las soluciones de (F.22) son de la forma $P_n \propto \alpha^n$ donde α es una cantidad a ser determinada por substitución en (F.22):

$$(1+\gamma)\,\alpha = \gamma + \alpha^2 \quad \Longrightarrow \quad (\alpha - 1)\,(\alpha - \gamma) = 0 \quad \Longrightarrow \quad (\ \alpha = 1 \quad \text{o} \quad \alpha = \gamma\ )$$

Por tanto, la solución general es de la forma $P_n = A + B\gamma^n$. A y B se determinan con la Ec. (F.21) y la condición de normalización $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$. (F.21) conduce a

$$A + B\gamma = \gamma\,(A + B) \qquad \Longrightarrow \qquad A = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad P_n = B\gamma^n$$

y la condición de normalización $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$ a:

$$1 = B \sum_{n=0}^{\infty} \gamma^n = B\,\frac{1}{1-\gamma} \qquad \Longrightarrow \qquad B = 1 - \gamma$$

Por tanto

$$\boxed{P_n = (1-\gamma)\,\gamma^n = \left(1 - \frac{W_\uparrow}{W_\downarrow}\right)\left(\frac{W_\uparrow}{W_\downarrow}\right)^n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots} \tag{F.24}$$

El *número medio de fotones* $\langle n \rangle_{RS}$, de acuerdo al método de Recocido Simulado y para valores dados de $W_\downarrow$ y $W_\uparrow$, viene dado por

$$\begin{aligned} \langle n \rangle_{RS} &= \sum_{n=0}^{\infty} P_n\, n = \sum_{n=0}^{\infty} (1-\gamma)\,\gamma^n\, n = (1-\gamma)\,\gamma\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \gamma^n \\ &= (1-\gamma)\,\gamma\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\gamma}\left(\frac{1}{1-\gamma}\right) \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle n \rangle_{RS} = \frac{\gamma}{1-\gamma} = \frac{1}{\dfrac{W_\downarrow}{W_\uparrow} - 1}} \tag{F.25}$$

$W_\uparrow / W_\downarrow$ satisface (de acuerdo a *dos* comparaciones):

`and Telephone Calls`, Nys. Tiddskr. Mat., Ser. B, vol. **20**, págs. 33–39, 1909. El lector interesado en el tema puede consultar `Elements of Queueing Theory with Applications`, Thomas L. Saaty, Dover Publications, Inc. New York 1961. Es interesante observar que en la misma época se discutía la distribución de energía de la radiación del cuerpo negro que, como discutimos en esta sección, guarda relación con las soluciones estacionarias del Modelo de Erlang. Ver, además,

`http://www-groups.dcs.st-and.ac.uk/~history/Mathematicians/Erlang.html`

1. Con la condición de equilibrio detallado (F.4), que es una de las bases del método de Recocido Simulado, y haciendo uso de la condición I (ver pág. 233):

$$\frac{W_\uparrow}{W_\downarrow} = \mathrm{e}^{-(E_{n+1}-E_n)/\mathrm{k_B}T}\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

2. Con el *ajuste de los datos experimentales* $\langle n \rangle_{Planck}$ realizado por Planck (ver expresión (F.18)):

$$\frac{W_\uparrow}{W_\downarrow} = \mathrm{e}^{-h\nu/\mathrm{k_B}T} \tag{F.26}$$

Estas comparaciones permiten inferir que

$$\boxed{E_{n+1} - E_n = h\nu \quad \Longrightarrow \quad E_n = E_0 + n\,h\nu\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots} \tag{F.27}$$

En conclusión, el método de Recocido Simulado predice correctamente el número medio de fotones, en equilibrio termodinámico a la temperatura T, para la radiación electromagnética confinada y en contacto con un reservorio a la temperatura T. Tal predicción es aceptada una vez que reconozcamos que la energía E_n de un gas de n fotones está *cuantizada* de acuerdo a $E_n = E_0 + n\,h\nu$ o, equivalentemente, que la absorción o emisión de un fotón involucra un *cuanto de energía* $h\nu$.

La escogencia de $W_\uparrow/W_\downarrow$, equivale a seleccionar la temperatura (o definir una nueva escala) T de acuerdo a

$$\mathrm{k_B}T = \frac{h\nu}{\ln\left(W_\downarrow/W_\uparrow\right)}\,, \qquad \Big(\text{ Ver Ec. (F.26) }\Big)$$

Note que es *intuitivamente incorrecto* imaginar que, puesto que $W_\downarrow > W_\uparrow$, $\langle n \rangle_{RS} \to 0$ cuando el número de transiciones $\mathcal{N} \to \infty$ (o el tiempo $t \to \infty$). En realidad, puesto que n está *acotado inferiormente* ($n \geq 0$) ello genera una especie de *efecto compensatorio* que es responsable de la generación de una situación de equilibrio lo cual representa, por razones obvias, una situación afortunada.

El lector podrá observar que el proceso descrito arriba es similar al de una partícula que realiza saltos unidimensionales (con desplazamientos ± 1) y confinada a la región $\{n \ni n = 0, 1, 2, \ldots\}$ (semieje positivo). Siguiendo la analogía podemos escribir, para este caso, una *especie de energía libre de Helmholtz* $\mathcal{F}$:

$$\mathcal{F} = \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} P_n n}_{\text{“ E ”}} - \underbrace{\left[\frac{1}{\ln\left(W_\leftarrow/W_\rightarrow\right)}\right]}_{\text{“ T ”}} \underbrace{\left(-\sum_{n=0}^{\infty} P_n \ln P_n\right)}_{\text{“ S ”}}\,, \qquad \sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$$

donde $W_{\substack{\leftarrow \\ \rightarrow}}$ equivale a $W_{\substack{\downarrow \\ \uparrow}}$. Esperamos que el lector estudie en detalle esta analogía.

Simulación de *un* gas de fotones (Recocido Simulado)

La simulación, mediante el método de Recocido Simulado, del proceso de equilibrio termodinámico de un gas de fotones a la temperatura T, es bastante simple puesto que solo necesitamos el ajuste de *una* variable: El número n de fotones.

En una simulación, cuando ν es un valor dado, escogemos a $h\nu/\mathrm{k_B}$ como unidad de temperatura tal que T es adimensional y, de acuerdo al algoritmo de Metropolis (F.6),

$$T = -\frac{1}{\ln P_\uparrow} \quad \Longleftrightarrow \quad P_\uparrow = \mathrm{e}^{-1/T} \qquad \text{donde} \qquad \begin{cases} P_\uparrow \equiv W_\uparrow \Delta t \ < \ 1 \\ P_\downarrow \equiv W_\downarrow \Delta t \ = \ 1 \end{cases}$$

$P_{\uparrow\downarrow}$ son las probabilidades de transición en cada iteración.

Dado un valor de n (el número de fotones en el gas):

1. Escogemos, con probabilidad 1/2, si disminuimos ($n \to n-1$ si $n > 0$) o aumentamos ($n \to n+1$), en *una* unidad, el número de fotones. Para ello, generamos un número r con una distribución de probabilidades uniforme en el intervalo $[0, 1)$. Si $r < 1/2$ se escoge *" disminuir "* y en caso contrario ($r \geq 1/2$) se escoge *" aumentar "*.

2. Si en el paso anterior se escogió disminuir el número n de fotones, ello se realiza (puesto que $E_{n-1} < E_n$) a menos que $n = 0$.

3. En caso contrario; si se escogió incrementar el número n de fotones, ello se realiza con probabilidad $\mathrm{e}^{-1/T}$. Para ello, generamos un número R con una distribución de probabilidades uniforme en el intervalo $[0, 1)$. Si $R < \mathrm{e}^{-1/T}$ se incrementa el número de fotones y en caso contrario $\left(R \geq \mathrm{e}^{-1/T} \right)$ el número de fotones permanece inalterado.

El programa `fotones0.cc` (ver pág. 238), en `C++`, repite 10^5 veces los pasos anteriores tanto para *termalizar* el gas como para *medir* la distribución de probabilidades P_n a la temperatura adimensional $T = 20$. El gran número de iteraciones reduce, en gran medida, las fluctuaciones esperadas al considerar *un solo gas*. Así mismo, el programa mencionado arriba generó los datos que permitieron construir la Figura F.5 (ver pág. 240).

```
// fotones0.cc
#include<cmath>
#include<cstdlib>
#include<ctime>
#include<iostream>
#include<vector>
using namespace std;
const double RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
const double T=20.0;                          // temperatura
const double PABSORCION=exp(-1.0/T);
const double P0=1.0 - PABSORCION;             // P_{0}
const size_t NITER=100000U;
void inicialize(vector<size_t> &v,size_t &n);


inline double rand01() // Retorna un numero "al azar" en [0,1)
{
 return rand()/RANDMAX1;
}


inline void transicion(size_t &n)
{
      if ( rand01()<0.5 ) { if ( n>0 ) --n; } // emision
 else if ( rand01()<PABSORCION )       ++n;   // absorcion
}
```

```
int main()
{
 size_t n;
 vector<size_t> v;
 inicialize(v,n);

 for ( size_t i=0; i<NITER ; ++i ) { // Midiendo
       transicion(n);
       if ( n<v.size() ) ++v[n]; else v.push_back(1U);
 }
 double nMedio=0,p=P0,pn;
 for ( n=0 ; n<v.size() ; p*=(++n,PABSORCION) ) {
     pn=double(v[n])/NITER;
     nMedio+=pn*n;
     cout<<n<<' '<<pn<<' '<<p<<endl;
 }

 cerr<<"\n<n> simulado = "<<nMedio<<endl;
 cerr<<"<n> teorico  = "<<(PABSORCION/P0)<<endl;

 return 0;
}


void inicialize(vector<size_t> &v,size_t &n)
{
 srand(size_t(time((time_t *)0)));

 size_t nMax=0;
 for ( size_t i=((n=0),0) ; i<NITER ; ++i ) { // Termalizando
       transicion(n);
       if ( n>nMax ) nMax=n;
 }

 v.resize(++nMax,0);
}
```

El resultado que genera este programa es ilustrado y comentado (en la leyenda de la figura) en la Figura F.5.

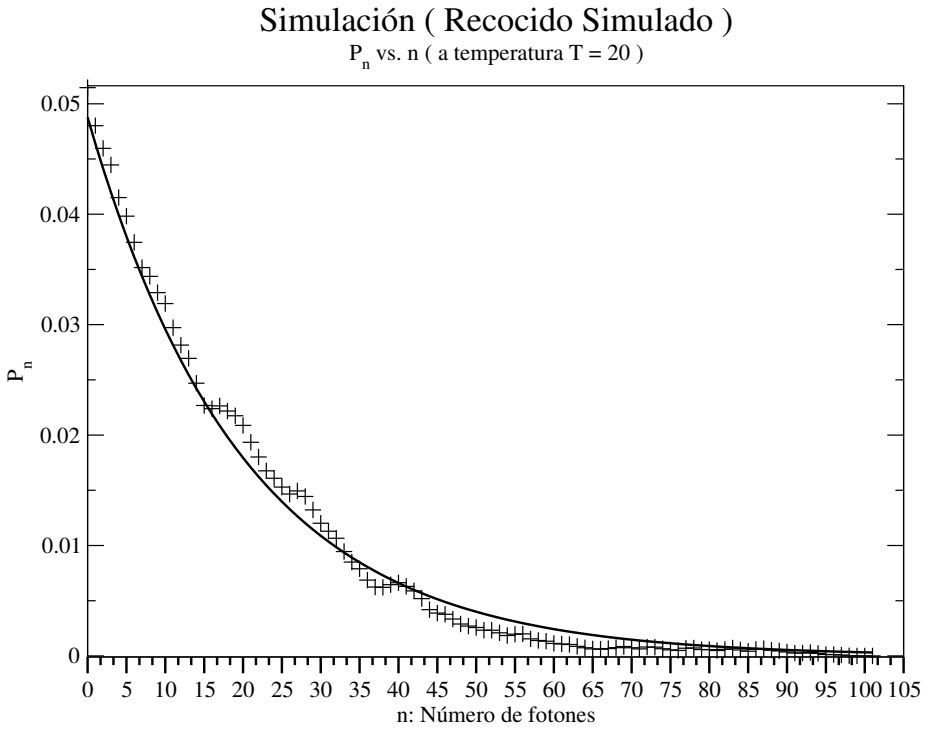


Figura F.5: Simulación, mediante el método de Recocido Simulado del equilibrio térmico de un gas de fotones a la temperatura (adimensional) $T = 20$, de la probabilidad P_n de *encontrar exactamente* n fotones en el gas. Los símbolos **+** describen el resultado de la simulación mientras la linea continua es el resultado teórico (F.24). Durante el proceso de simulación se realizaron 200.000 iteraciones: a) Las primeras 100.000 *termalizan* el gas y proporciona información útil al programa, en `C++`, `fotones0.cc`, b) mientras las restantes describen el proceso de medida. P_n (simulado) se toma como la *fracción de visitas a un valor dado de* n. Así mismo, el programa `fotones0.cc` generó los valores $\langle n \rangle_{simulado} = 22{,}45$ y $\langle n \rangle_{teórico} = 19{,}50$.. En particular, los datos simulados pueden considerarse como el resultado de *un experimento* tal que una *temperatura efectiva*, como resultado de un *ajuste*, puede derivarse mediante el uso, por ejm. . . , del *Método de Mínimos Cuadrados*. ¡¡¡ El lector debería intentar este último esfuerzo !!!.

Simulación de la distribución de energía de un gas de fotones (Recocido Simulado)

Esta sección es similar a la anterior salvo que consideraremos un conjunto de $\mathcal{N}_{\mathcal{E}}$ gases de fotones (*ensemble*) y, a una temperatura dada T, simulamos la distribución de energías como una función de la frecuencia ν

$$\mathrm{U}\left(\nu, T\right) \equiv \frac{\nu^3}{\mathrm{e}^{\nu/T} - 1}\,, \qquad h = \mathrm{k_B} = 1$$

$$\left(\mathrm{U}\left(\nu, T\right), \nu \text{ y } T \text{ son adimensionales } \right)$$

El *número medio de fotones* $\langle n \rangle_{RS}\left(\nu\right)$ para un valor dado de la frecuencia ν y un *valor constante* de la temperatura T viene dado (con el proceso de Recocido Simulado) por

$$\langle n \rangle_{RS}\left(\nu\right) \equiv \frac{1}{\mathcal{N}_{\mathcal{E}}} \sum_{\ell=0}^{\mathcal{N}_{\mathcal{E}}-1} \left[\frac{1}{\tau} \sum_{t=\tau_0}^{\tau_0+\tau-1} n_\ell\left(t\right) \right] \qquad \text{tal que} \qquad \mathrm{U}_{RS}\left(\nu, T\right) \equiv \nu^3 \langle n \rangle_{RS}\left(\nu\right)$$

$n_\ell\left(t\right)$ es el número de fotones, en la iteración t–ésima o instante de tiempo t, en el elemento ℓ–ésimo del *ensemble* de gases de fotones. El programa, en `C++`, `fotones1.cc` (ver pág. 242) realiza esta simulación con los parámetros:

$$T = 10\,, \qquad \mathcal{N}_{\mathcal{E}} = 100\,, \qquad \tau_0 = \tau = 10000$$

Como es usual, τ_0 es el número de iteraciones ignoradas (no participan en el proceso de " *medida* ") y sirven al propósito de termalización de los diferentes gases en el ensemble mencionado arriba.

En particular, somos breves puesto que los detalles han sido expuestos en la sección anterior y otros detalles pertinentes pueden inferirse del programa (en `C++`) `fotones1.cc` (ver pág. 242). El resultado puede observarse en la Figura F.6 (ver pág. 245).

```
// fotones1.cc
#include<cmath>
#include<cstdlib>
#include<ctime>
#include<iostream>
#include<vector>
using namespace std;
/*********************clase GasFotones*****************/
class GasFotones
{
      private:
              size_t n; // Numero de fotones

              static const double RANDMAX1;
      public:
             // Constructores
             explicit GasFotones(size_t nFot=0): n(nFot) {}

             // Metodos
             static double Rand01();
             static double U(double nu,double temper);
             const size_t& fotones() const { return n; }
             size_t& fotones() { return n; }
             double termalize(double pAbsorcion,size_t tau0);
             GasFotones& transicion(double pAbsorcion);
};
const double GasFotones::RANDMAX1=floor(RAND_MAX + 1.5);
/*****************************************************/
const double DNU=0.05;           // Incremento de energia.
const double T=10.0;             // Temperatura.
const double MAXNU=10.0*T;       // Energia ( nu ) maxima.
//
const size_t NGASES=100U;        // Numero de gases en el
                                 // "ensemble".
const size_t TAU0=NGASES*NGASES;
const size_t TAU=TAU0;
```

```
int main()
{
 cout<<0<<' '<<0<<' '<<0<<endl;
 vector<GasFotones> g(NGASES);
 const unsigned long total=((unsigned long)TAU)*g.size();

 double n,pA;
 size_t i;
 for ( double nu=DNU ; nu<=MAXNU ; nu+=DNU ) {
     pA=exp(-nu/T);
     for ( i=0 ; i<g.size() ; ++i ) g[i].termalize(pA,TAU0);
     for ( i=((n=0),0) ; i<g.size() ; ++i )
         n+=g[i].termalize(pA,TAU);
     cout<<nu<<' '<<(nu*nu*nu*(n/total))<<' ';
     cout<<GasFotones::U(nu,T)<<endl;
 }

 return 0;
}

/**************Implementacion de class GasFotones*************/
// Retorna un numero "al azar" en [0,1)
inline double GasFotones::Rand01()
{
 return rand()/RANDMAX1;
}
```

```
double GasFotones::U(double nu,double temper) // U(nu,T) teorico
{
 if ( temper!=0 ) {
    temper=nu/temper;
    double temp;
           if ( temper<0 ) {
              temp=exp(temper) - 1.0;
              if ( temp!=0 ) return (nu*nu*nu)/temp;
    } else if ( temper>0 ) {
              temper=exp(-temper);
              temp=1.0 - temper;
              if ( temp!=0 ) return (nu*nu*nu*temper)/temp;
    }
 }

 return 0;
}


inline GasFotones& GasFotones::transicion(double pAbsorcion)
{
      if ( Rand01()<0.5 ) { if ( n>0 ) --n; } // emision
 else if ( Rand01()<pAbsorcion )       ++n;   // absorcion

 return *this;
}


double GasFotones::termalize(double pAbsorcion,size_t tau0)
{
 srand(size_t(time((time_t *)0)));
 double suma=0;
 while ( tau0>0 ) {
       suma+=transicion(pAbsorcion).n;
       --tau0;
 }

 return suma;
}
```

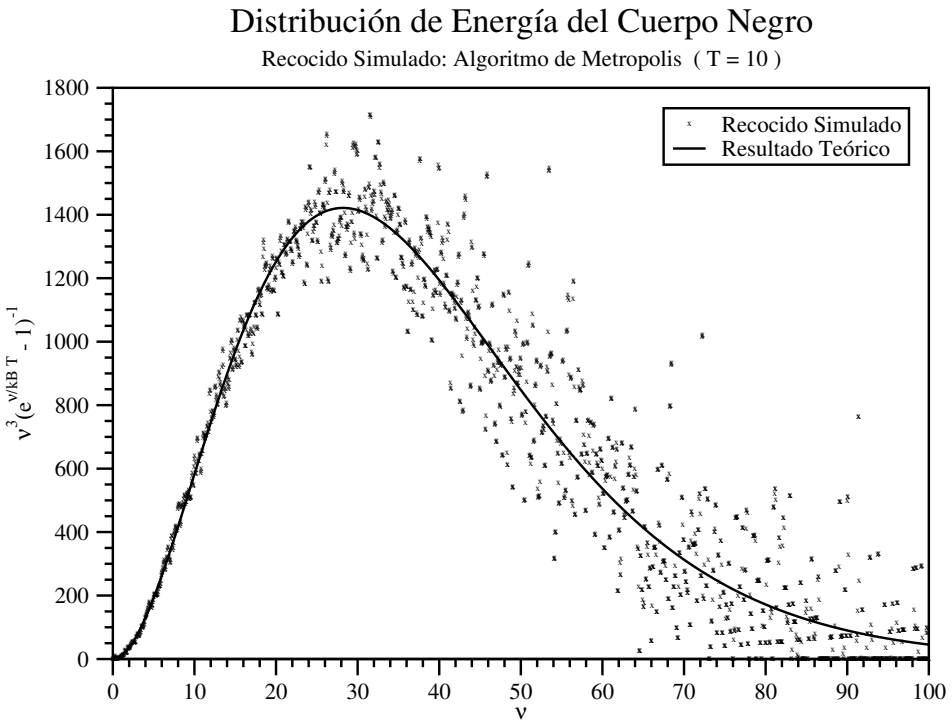


Figura F.6: Simulación, mediante el método de Recocido Simulado (Algoritmo de Metropolis) de la distribución de energía de la radiación del cuerpo negro (en unidades adimensionales). Los valores simulados " x " pueden considerase como " *datos experimentales* " a ser *ajustados* o/y *suavizados* para establecer comparaciones con el resultado teórico. Por ejm. . . , un método de mínimos cuadrados determinaría la *mejor temperatura efectiva* T_{ef} que reproduce la expresión teórica. Esta temperatura debería ser similar a la *temperatura actual* $T = 10$. ¡ Lo dejamos como un ejercicio interesante para el lector !.

Ejercicio F.1

Este ejercicio es similar a la discusión teórica del recocido simulado (ver pág. 233) salvo que el proceso termina la *primera vez* que la variable en estudio n se *anula*. El propósito es discutir, por ejm. . . , la conducta de un jugador que apuesta contra una máquina que se comporta como un reservorio infinito de dinero y por lo tanto nunca se retira del juego.

SOLUCIÓN: Si denotamos con $\mathrm{P}_n(t)$ a la *probabilidad de que el jugador posea una cantidad de dinero n en el instante t*, estas obedecen[28]:

$$\begin{aligned}
\mathrm{P}_0(t+\Delta t) &= \mathrm{P}_0(t) + \mathrm{P}_1(t) W_{\downarrow}\Delta t \\
\mathrm{P}_1(t+\Delta t) &= \mathrm{P}_1(t)(1 - W_{\downarrow}\Delta t)(1 - W_{\uparrow}\Delta t) + \mathrm{P}_2(t) W_{\downarrow}\Delta t \\
\\
\mathrm{P}_n(t+\Delta t) &= \mathrm{P}_{n-1}(t) W_{\uparrow}\Delta t + \mathrm{P}_n(t)(1 - W_{\downarrow}\Delta t)(1 - W_{\uparrow}\Delta t) \\
&\quad + \\
&\quad \mathrm{P}_{n+1}(t) W_{\downarrow}\Delta t\,, \qquad n \geq 2
\end{aligned}$$

las cuales en el límite $\Delta t \to 0$ se reducen a:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathrm{P}}_0(t) &= W_{\downarrow}\mathrm{P}_1(t) \\
\dot{\mathrm{P}}_1(t) &= -(W_{\downarrow} + W_{\uparrow})\mathrm{P}_1(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_2(t) \\
\dot{\mathrm{P}}_n(t) &= W_{\uparrow}\mathrm{P}_{n-1}(t) - (W_{\downarrow} + W_{\uparrow})\mathrm{P}_n(t) + W_{\downarrow}\mathrm{P}_{n+1}(t)\,, \qquad n \geq 2
\end{aligned}$$

Denotemos con $\{P_n\}$ al conjunto de *soluciones estacionarias* $\left(\dot{\mathrm{P}}_n(t) = 0,\ \forall n\right)$ de $\{\mathrm{P}_n(t)\}$ las cuales satisfacen:

$$\begin{aligned}
0 &= W_{\downarrow}P_1 \\
0 &= -(W_{\downarrow} + W_{\uparrow})P_1 + W_{\downarrow}P_2 \\
0 &= W_{\uparrow}P_{n-1} - (W_{\downarrow} + W_{\uparrow})P_n + W_{\downarrow}P_{n+1}\,, \qquad n \geq 2
\end{aligned}$$

[28] Obviamos los detalles puesto que el razonamiento es similar al de la sección citada arriba (ver pág. 233).

Salvo en el caso no importante y trivial $W_{\downarrow} = W_{\uparrow} = 0$, se obtiene:

$$\boxed{\begin{array}{c} W_{\downarrow} \neq 0 \quad \text{o} \quad W_{\uparrow} \neq 0 \\ P_n = \begin{cases} 1\,, & \text{si } n = 0 \\ 0\,, & \text{si } n > 0 \end{cases} \end{array}} \tag{F.28}$$

lo cual significa que

> El jugador pierde eventualmente todo su dinero. En otras palabras, el jugador pasa eventualmente por la situación en que $n = 0$ en cuyo caso el juego termina inmediatamente.

■