Física Estadística.
Soluciones relación 4

December 2, 2009

1. *Suponga que la energía de una partícula puede ser escrita como $E(z) = az^2$, donde a es constante y z es una variable que puede representar tanto una posición como un momento, y que va de $-\infty$ a ∞. Utilizando estadística de Boltzamann, cuál es el valor esperado de la energía?*

Según la distribución de Boltzmann, $f(z) \sim \exp[-E(z)/(kT)]$. Por lo tanto, el valor esperado de la energía es

$$\overline{E} = \int_{-\infty}^{\infty} f(z)E(z)dz = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} -az^2 \exp\left(-\frac{az^2}{kT}\right) dz}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{az^2}{kT}\right) dz}.$$

Utilizando la identidad

$$\int_0^{\infty} x^m e^{-cx^2} dx = \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2c^{(m+1)/2}},$$

tenemos $\overline{E} = \frac{1}{2}kT$.

2. *Demuestre el teorema de equipartición de la energía para un sistema clásico. Para ello, obtenga el valor esperado de la magnitud $x_i \partial H/\partial x_j$ en la colectividad canónica, donde $H(q,p)$ es el hamiltoniano del sistema y x_i y x_j son cualesquiera de las $6N$ coordenadas generalizadas.*

El valor esperado de $x_i \partial H/\partial x_j$ es

$$\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \frac{\int \left(x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}\right) e^{-\beta H} d\omega}{\int e^{-\beta H} d\omega},$$

donde $d\omega = d^{3N}q d^{3N}p$. Integrando por partes en el numerador, tenemos

$$\int \left[-\frac{1}{\beta} x_i e^{-\beta H} \Big|_{(x_j)_1}^{(x_j)_2} + \frac{1}{\beta} \int \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_j}\right) e^{-\beta H} dx_j \right] d\omega_{(j)};$$

en esta expresión, $(x_j)_1$ y $(x_j)_2$ son los valores extremos de la coordenada x_j, y $d\omega_{(j)}$ es $d\omega$ sin dx_j.

La parte integrada desaparece ya que el hamiltoniano diverge para valores extremos. Teniendo en cuenta que $\partial x_i/\partial x_j = \delta_{ij}$, el término restante es

$$\frac{1}{\beta}\delta_{ij}\int e^{-\beta H}d\omega.$$

Por lo tanto, el valor esperado que buscamos es

$$\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j}\right\rangle = \delta_{ij}kT.$$

Para $x_i = x_j = p_i$, tenemos

$$\left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\right\rangle = \langle p_i \dot{q}_i\rangle = kT,$$

e, igualmente, para $x_i = x_j = q_i$,

$$\left\langle q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}\right\rangle = -\langle q_i \dot{p}_i\rangle = kT.$$

Sumando sobre los $3N$ componentes,

$$\left\langle \sum_i p_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\right\rangle = \left\langle \sum_i p_i \dot{q}_i\right\rangle = 3NkT,$$

y

$$\left\langle \sum_i q_i \frac{\partial H}{\partial q_i}\right\rangle = -\left\langle \sum_i q_i \dot{p}_i\right\rangle = 3NkT.$$

La última igualdad constituye el *teorema del virial.*

En muchas situaciones físicas, el hamiltoniano del sistema es una función cuadrática de sus coordenadas, luego, a través de una transformación canónica, puede ser escrita en la forma

$$H = \sum_j A_j P_j^2 + \sum_j B_j Q_j^2, \tag{1}$$

donde P_j y Q_j son las coordenadas canónicas conjugadas transformadas, y A_j y B_j son constantes. Para un sistema de este tipo, tenemos

$$\sum_j \left(P_j \frac{\partial H}{\partial P_j} + Q_j \frac{\partial H}{\partial Q_j}\right) = 2H,$$

luego el valor esperado de la energía será

$$\langle H\rangle = \frac{1}{2} f kT,$$

donde f es el número de coeficientes no nulos en la Eq. (1).

Podemos concluir que cada término armónico del hamiltoniano transformado hace una contribución de $\frac{1}{2}kT$ a la energía intera, y, por tanto, una contribución de $\frac{1}{2}k$ al calor específico C_V. Es decir, la energía se reparte equitativamente entre todos los grados de libertad del sistema. Sin embargo, para que esto sea cierto, se requiere que estos grados de libertad puedan ser excitados libremente. En algunas situaciones, sin no hay suficiente energía disponible, algunos grados de libertad pueden estar "congelados" y no contribuir significativamente a la energía ni al calor específico. En general, mientras más alta la temperatura del sistema, más válido el teorema.

3. *Utilice el teorema del virial para obtener la ecuación de un gas ideal cásico.*

Según el teorema del virial, $\mathcal{V} \equiv \langle \sum_i q_i F_i \rangle = -3NkT$, con las fuerzas $F_i = \dot{p}_i$. En este caso, las partículas sólo interactuan con la pared, luego sólo en esta superficie existirán fuerzas. La fuerza asociada al elemento de superficie $d\mathbf{S}$ será $-Pd\mathbf{S}$, donde P es la presión. En el límite continuo, tenemos

$$\mathcal{V} = -P \oint_S \mathbf{r} \cdot \mathbf{S} = -P \int_V (\nabla \cdot \mathbf{r}) dV = -3PV,$$

Donde la segunda igualdad resulta del teorema de Gauss. Llegamos así al conocido resultado

$$PV = NkT.$$

4. *Una partícula de polvo larga y fina (es decir, con forma de aguja) flota en una caja llena de gas a temperatura constante T. En media, es el vector de momento angular casi paralelo o casi perpendicular al eje largo de la partícula?*

Digamos que el eje largo es el eje z. Los principales momentos de inercia satisfacerán por tanto $I_z < I_x, I_y$. En equilibrio térmico tendremos

$$\frac{1}{2} I_z \omega_z^2 = \frac{1}{2} I_x \omega_x^2 = \frac{1}{2} I_y \omega_y^2,$$

de manera que

$$|\omega_z| = \sqrt{\frac{I_x}{I_z}} |\omega_x| = \sqrt{\frac{I_y}{I_z}} |\omega_y|.$$

Por lo tanto,

$$|I_z \omega_z| = \sqrt{\frac{I_x}{I_z}} |I_x \omega_x| < |I_x \omega_x|;$$

o, igualmente,

$$|I_z \omega_z| = \sqrt{\frac{I_y}{I_z}} |I_y \omega_y| < |I_y \omega_y|.$$

Luego el vector momento angular es casi perpendicular al eje largo de la partícula.

5. *Un contenedor cúbido de arista* 20 *cm contiene H_2 a temperatura $T = 300$ K. Cada molécula consiste en dos átomos de hidrógeno de masa $m = 1.66 \cdot 10^{-24}$ g cada uno, separados una distancia de $r \simeq 10^{-8}$ cm. Suponga que los átomos son puntuales y que las moléculas no interactúan entre sí, e ignore el grado de libertad de vibración. Obtenga:*

a) La velocidad media de traslación de las moléculas.
b) La velocidad media de rotación de las moléculas alrededor de un eje perpendicular al bisector de la línea que une los dos átomos.
c) La capacidad calorífica C_V.

a) Hay tres grados de libertad translacionales, luego tenemos

$$\frac{3}{2}kT = \frac{1}{2}M\overline{v^2} = m\overline{v^2},$$

de donde

$$\overline{v} \simeq \sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\frac{3kT}{2m}} \simeq 2 \cdot 10^3 m/s.$$

b) Hay dos grados de libertad rotacionales, luego

$$\frac{2}{2}kT = \frac{1}{2}I\overline{\omega^2},$$

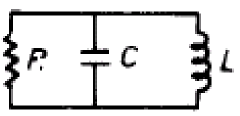
donde el momento de inercia de una molécula es $I = 2m(r/2)^2 = \frac{1}{2}mr^2$. Así, la velocidad angular media es

$$\overline{\omega} \simeq \sqrt{\overline{\omega^2}} \simeq 3.2 \cdot 10^{13} s^{-1}.$$

c) Sumando las contribuciones de cada una de los cinco grados de libertad, la capacidad calorífica a volumen constante molar es

$$C_V = \frac{5}{2}kn_A = \frac{5}{2}R.$$

6. *El circuito de la figura está en equilibrio térmico con su entorno a temperatura T. Encuentre la expresión clásica para la corriente media que pasa por el inductor.*



Fluctuaciones en el movimiento de electrones libres en el conductor dan lugar a corrientes en el circuito. Si la corriente que pasa a través del inductor es $I(t)$, entonces la energía media del inductor será

$$\overline{W} = \frac{1}{2}L\overline{I^2}.$$

Según el principio de equipartición de la energía, $\overline{W} = \frac{1}{2}kT$, luego tenemos

$$\sqrt{\overline{I^2}} = \sqrt{\frac{kT}{L}}.$$