Problema 3

Suponga un gas ideal compuesto de N partículas de masa m no puntuales que pueden rotar en cualquier dirección, con momentos principales de inercia I_1, I_2, I_3. El gas se encuentra dentro de un cilindro de radio R y altura h. Considere que hay gravedad g y que la tapa inferior del cilindro se encuentra sobre el nivel del mar donde la presión es $P_0 = 1\text{atm}$. Recuerde que la energía cinética de un cuerpo rígido se escribe como $E_c = \frac{1}{2}mv_{cm}^2 + \sum_{i=1}^{3} \frac{I_i}{2}\omega_i^2$.

a. Escriba la densidad de probabilidad de velocidades del centro de masa, velocidades angulares y posiciones de las N partículas. En base a esta deduzca la correspondiente a una sola partícula (por ejemplo la partícula 1). No resuelva ninguna integral en este inciso, es decir, deje todo expresado en función de la constante de normalización.

b. Trabajando con la densidad de probabilidad de una partícula, encuentre la constante de normalización.

c. Halle el valor medio de la energía cinética y de la energía potencial de una partícula y luego el de todo sistema.

d. Encuentre el valor medio del módulo de la velocidad de una partícula $\langle v \rangle$ y usando los resultados del inciso anterior compárelo con la velocidad cuadrática media $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$. Determine también el valor medio de v_i con $i = x, y, z$.

e. Encuentre la presión P en función de la altura z y de la temperatura (puede suponer que esta no depende de z) sabiendo que $\frac{dP}{dz} = -n(z)\,mg$ con $n(z)$ la densidad de partículas a altura z. Por último, deduzca esta ecuación. Note que este inciso es independiente de los anteriores.

Solución

a) La densidad de probabilidad correspondiente a las N partículas está dada por

$$p(\overline{r}_1, \overline{v}_1, \overline{\omega}_1, \ldots, \overline{r}_N, \overline{v}_N, \overline{\omega}_N) = Ae^{-\beta E(\overline{r}_1, \overline{v}_1, \overline{\omega}_1, \ldots, \overline{r}_N, \overline{v}_N, \overline{\omega}_N)} = Ae^{-\beta \sum_i E_i(\overline{r}_i, \overline{v}_i, \overline{\omega}_i)} = A \prod_i e^{-\beta E_i(\overline{r}_i, \overline{v}_i, \overline{\omega}_i)}, \tag{1}$$

donde

$$E_i(\overline{r}_i, \overline{v}_i, \overline{\omega}_i) = \frac{1}{2}m|\overline{v}_i|^2 + \frac{1}{2}I_1\omega_{i1}^2 + \frac{1}{2}I_2\omega_{i2}^2 + \frac{1}{2}I_3\omega_{i3}^2 + mgz_i. \tag{2}$$

Para encontrar la de una partícula (por ejemplo la 1) hay que integrar sobre todas las demás en todo el espacio obteniendo directamente

$$p_1(\overline{r}_1, \overline{v}_1, \overline{\omega}_1) = A_1 e^{-\beta E_1(\overline{r}_1, \overline{v}_1, \overline{\omega}_1)} \tag{3}$$

con A_1 una nueva constante. Como las partículas son todas iguales, conviene notar directamente

$$p(\overline{r}, \overline{v}, \overline{\omega}) = Ae^{-\beta E(\overline{r}, \overline{v}, \overline{\omega})} \tag{4}$$

con

$$E(\overline{r}, \overline{v}, \overline{\omega}) = \frac{1}{2}m|\overline{v}|^2 + \frac{1}{2}I_1\omega_1^2 + \frac{1}{2}I_2\omega_2^2 + \frac{1}{2}I_3\omega_3^2 + mgz. \tag{5}$$

b) Para encontrar la constante de normalización hay que pedir

$$\int_V d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 p(\overline{r}, \overline{v}, \overline{\omega}) = 1. \tag{6}$$

Queda entonces

$$A\left[\int_V d^3r e^{-\beta mgz}\right]\left[\int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}\right]\left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 e^{-\beta\left(\frac{1}{2}I_1\omega_1^2 + \frac{1}{2}I_2\omega_2^2 + \frac{1}{2}I_3\omega_3^2\right)}\right] = 1, \tag{7}$$

donde

$$\int_V d^3r e^{-\beta mgz} = \pi R^2 \int_0^h dz e^{-\beta mgz} = \frac{\pi R^2}{\beta mg}\left(1 - e^{-\beta mgh}\right), \tag{8}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-\frac{\beta m}{2}u^2}\right)^3 = \left(\frac{2\pi}{\beta m}\right)^{\frac{3}{2}}, \tag{9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 e^{-\beta\left(\frac{1}{2}I_1\omega_1^2 + \frac{1}{2}I_2\omega_2^2 + \frac{1}{2}I_3\omega_3^2\right)} = \prod_{i=1}^{3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_i e^{-\frac{\beta I_i}{2}\omega_i^2} = \prod_{i=1}^{3}\left(\frac{2\pi}{\beta I_i}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\pi}{\beta I_1}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2\pi}{\beta I_2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2\pi}{\beta I_3}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{10}$$

A partir de aquí se encuentra la constante de normalización pero no es necesaria para resolver el resto de los ítems.

c) En cuanto al ítem c, el valor medio de la energía cinética de una partícula está dado por

$$\langle E_c \rangle = \int_V d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 E_c \left(\overline{v}, \overline{\omega}\right) p \left(\overline{r}, \overline{v}, \overline{\omega}\right). \tag{11}$$

Es fácil ver que la gravedad no afecta para nada al hacer esta cuenta y por ende se puede usar directamente el teorema de equipartición llegando a

$$\langle E_c \rangle = 3kT. \tag{12}$$

En cuanto a la energía potencial, se tiene que

$$\langle E_p \rangle = \int_V d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 mgzp \left(\overline{r}, \overline{v}, \overline{\omega}\right) \tag{13}$$

$$= \frac{\int_V d^3r mgze^{-\beta mgz}}{\int_V d^3r e^{-\beta mgz}} = \frac{\int_0^h dz mgze^{-\beta mgz}}{\int_0^h dz e^{-\beta mgz}} = -\frac{d}{d\beta} \ln \left(\int_0^h dz e^{-\beta mgz} \right) = \frac{1 - e^{-\beta mgh} \left(mgh\beta + 1\right)}{\beta \left(1 - e^{-\beta mgh}\right)}. \tag{14}$$

Para los valores medios del sistema, basta multiplicar por N a estas magnitudes.

d) La distribución de velocidades de una partícula está dada por

$$p(v_x, v_y, v_z) = Ae^{-\frac{\beta}{2m}|\overline{v}|^2}. \tag{15}$$

Luego, para obtener la distribución correspondiente al módulo de la velocidad, basta con escribirla en coordenadas esféricas e integrar en θ y ϕ llegando a

$$p(v) = A'v^2 e^{-\frac{\beta}{2m}v^2}. \tag{16}$$

Se tiene entonces que

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} dv v p(v) = \frac{\int_0^{\infty} dv v^3 e^{-\frac{\beta}{2m}v^2}}{\int_0^{\infty} dv v^2 e^{-\frac{\beta}{2m}v^2}} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \sqrt{\langle v^2 \rangle}. \tag{17}$$

Por simetría es claro que $\langle v_i \rangle = 0$.

e) Sabiendo que

$$\frac{dP}{dz} = -n\left(z\right) mg \tag{18}$$

y que

$$P\left(z\right) = n\left(z\right) kT \tag{19}$$

por ser gas ideal, se obtiene

$$\frac{dn}{dz} = -\frac{mg}{kT} n \tag{20}$$

y por lo tanto

$$n\left(z\right) = n_0 e^{-\frac{mg}{kT}z}, \tag{21}$$

con n_0 la densidad de partículas a nivel del mar. Luego,

$$P\left(z\right) = n_0 kT e^{-\frac{mg}{kT}z} = P_0 e^{-\frac{mg}{kT}z}. \tag{22}$$

Notar que la expresión $n\left(z\right) = n_0 e^{-\frac{mg}{kT}z}$ se deduce de la distribución de Maxwell Boltzmann y por lo tanto se puede obtener $\frac{dP}{dz} = -n\left(z\right) mg$ a partiendo de ahí, o también usando argumentos tipo Newton.