Física Teórica 3
Serie 6: Gases reales

2^{do} Cuatrimestre de 2012

Problema 1: Dibuje los diagramas de racimo correspondientes a los siguientes productos de funciones

a) $f_{12} \cdot f_{23} \cdot f_{34} \cdot f_{45} \cdot f_{14} \cdot f_{25}$

b) $f_{12} \cdot f_{23} \cdot f_{13} \cdot f_{45} \cdot f_{46} \cdot f_{56}$

Problema 2: Muestre que la expansión del virial para la energía termodinámica es

$$\frac{E}{Nk_BT} = \frac{3}{2} - T\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j}\frac{\partial B_{j+1}}{\partial T}\rho^j$$

y la correspondiente a la entropía es

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{S_{\text{ideal}}}{Nk_B} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j}\frac{\partial (TB_{j+1})}{\partial T}\rho^j$$

Problema 3: Muestre que en la aproximación de *Van der Waals*

$$\begin{cases} V(r) = \infty & r < r_o \\ e^{-\beta V(r)} \approx 1 - \beta V(r) & r > r_o \end{cases}$$

para el segundo coeficiente del virial, la energía de interacción del gas vale:

$$E - E_{\text{ideal}} = N_{\text{pares}}\langle V(r) \rangle\,,$$

donde N_{pares} es el número de pares de moléculas y $\langle V(r) \rangle$ es el valor medio del potencial de interacción de un par.

Problema 4: En la misma aproximación, muestre que $S_{\text{real}} < S_{\text{ideal}}$ y que la disminución de entropía se debe a la disminución del volumen real en que pueden moverse las moléculas por ser impenetrables.

Problema 5: Muestre que el potencial intermolecular debe anularse más rápidamente que r^{-3} para que el coeficiente $B_2(T)$ exista. Hágalo partiendo la integral en dos regiones: de 0 a L y de L a ∞. Elija L grande de modo que la exponencial se pueda expandir, e investigue esta convergencia.

Problema 6:

Se tiene un gas de N moléculas que interactúan de la siguiente forma: sea r_{12} la distancia entre los centros de las moléculas 1 y 2. Entonces

$$V(r_{12}) = \begin{cases} \infty & 0 \leq r_{12} < \sigma \\ -\varepsilon & \sigma \leq r_{12} < 2\sigma \\ 0 & 2\sigma \leq r_{12} \end{cases}$$

a) Calcule $B_2(T)$.

b) Grafique $B_2(T)$ e interprete físicamente la curva, relacionándola con la forma de $V(r)$.

c) Muestre que si V_o es el volumen en el cual $V(r) = -\varepsilon$ para cada par de moléculas y n es el número de pares, entonces

$$E - E_{ideal} = n\frac{V_0}{V}(-\varepsilon)e^{\beta\varepsilon}$$

d) Sea un mol de estas moléculas en un volumen de 0,1 litros con $\sigma = 2$ y $\varepsilon = 10meV$ a $T = 500^oK$. Calcule $(E - E_{ideal})$ y la presión.

e) Con los datos anteriores de σ y ε calcule los parámetros de *Van der Waals* a y b.

Problema 7: (a resolver numéricamente) Para el potencial de Lennard-Jones:

$$V(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$$

donde ϵ y σ son constantes positivas,

a) Haga un gráfico del segundo coeficiente del virial reducido, B_2/r_0^3 como función de la temperatura reducida, k_BT/ϵ (siendo r_0 la distancia que hace mínimo al potencial).

b) Interprete físicamente el comportamiento de la curva obtenida y estime la temperatura para la cual se anula el segundo coeficiente del virial (temperatura de *Boyle*).