

Elija su ensamble favorito: opción 2

Enunciado

Considere un gas ideal formado por N partículas de masa m contenidas en un cilindro de altura L y radio R , que rota alrededor de su eje con velocidad angular Ω . El hamiltoniano de una partícula puede escribirse entonces según:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\Omega^2}{2}mr^2,$$

donde p es el momento lineal de la partícula y r la distancia al eje de rotación. Todo el sistema se encuentra en contacto con un foco térmico a temperatura T .

(a) Calcule la función de partición del sistema en el ensamble que le resulte más conveniente.

(b) Calcule la energía interna del sistema, y gráfiquela cualitativamente en función de la temperatura. Estudie los límites de bajas y altas temperaturas, y también los de altas y bajas velocidades angulares. Interprete sus resultados.

(c) Calcule la densidad de partículas en función de r . Analice.

Resolución

(a) Debido a la simetría del problema será conveniente usar coordenadas cilíndricas (r, φ, z) para describir la posición de las partículas que conforman el gas ideal.

Es conceptualmente útil darse cuenta de que el hamiltoniano de una partícula está escrito en el sistema de referencia rotante solidario al cilindro, un sistema de referencia no inercial. Por lo tanto como efecto de inercia aparece una fuerza centrífuga $F_c = +m\Omega^2 r$ aplicada sobre la partícula. Como $F(r) = -\frac{\partial V(r)}{\partial r}$, entonces $V(r) = -\frac{\Omega^2}{2}mr^2$. En el sistema en reposo la energía no depende de la distancia radial.

Con el objetivo de obtener información macroscópica del sistema vamos a utilizar la teoría de conjuntos estadísticos al realizar un número muy grande de copias del sistema bajo condiciones específicas. Debido al vínculo en la temperatura el conjunto estadístico más directo a utilizar aquí es el ensamble canónico, aunque recordamos que en el límite termodinámico las ecuaciones macroscópicas obtenidas en uno u otro deben ser equivalentes.

Podemos escribir la función de partición canónica de este sistema clásico-continuo según:

$$Z_C = \frac{1}{N!} \int \exp(-\beta H_N) \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N}}, \quad (1)$$

donde el factor de conteo correcto de Boltzmann¹ $1/N!$ se agrega por la indistinguibilidad de las partículas que conforman el y H_N es el hamiltoniano de N partículas.

Como las partículas son independientes entre sí, $H_N = \sum_i H_i$, lo que permite que la función de partición se factorice en términos de la función de partición de una partícula:

$$Z_C = \frac{1}{N!} \prod_i \int \exp(-\beta H_i) \frac{d^3q_i d^3p_i}{h^3} = \frac{1}{N!} Z_1^N,$$

donde

$$Z_1 = \int \exp(-\beta H) \frac{d^3q d^3p}{h^3}. \quad (2)$$

A su vez podemos factorizar esta función de partición separando los grados de libertad espaciales y de momento, pues no hay términos cruzados en el hamiltoniano H :

$$Z_1 = \underbrace{\int \exp(\beta \frac{\Omega^2}{2}mr^2) d^3q}_{Z_q} \underbrace{\frac{1}{h^3} \int \exp(-\beta \frac{p^2}{2m}) d^3p}_{Z_p} \equiv Z_q Z_p. \quad (3)$$

¹En este caso incluirlo o no hacerlo no afecta los resultados finales de las cantidades pedidas. No obstante, si es importante conceptualmente.

Calculemos ambas contribuciones por separado.

$$Z_q = \int \exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} m r^2) r dr d\varphi dz = L 2\pi \int_0^R r \exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} m r^2) dr$$

$$Z_q = L 2\pi \left. \frac{\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} m r^2)}{2\beta \frac{\Omega^2}{2} m} \right|_0^R = \frac{2\pi L}{\beta \Omega^2 m} \left(\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} m R^2) - 1 \right). \quad (4)$$

La otra contribución coincide con la del gas ideal clásico al que estamos acostumbrados y podemos obtenerla directamente a partir de la integral gaussiana:

$$\int_0^\infty \exp(-a p_i^2) dp_i = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (5)$$

por lo que tenemos que

$$Z_p = \frac{1}{h^3} \int \exp(-\beta \frac{p^2}{2m}) dp_x dp_y dp_z = \left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{3/2}. \quad (6)$$

La función de partición canónica del sistema está dada entonces por:

$$Z_C = \frac{1}{N!} \left[\left(\frac{2\pi m}{h^2 \beta} \right)^{3/2} \frac{2\pi L}{\beta \Omega^2 m} \left(\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} m R^2) - 1 \right) \right]^N. \quad (7)$$

El logaritmo de la función de partición canónica nos provee toda la información termodinámica del sistema y está relacionado con el potencial termodinámico asociado al conjunto canónico, la energía libre de Helmholtz (que tiene como variables naturales a la temperatura, el volumen y el número de partículas).

(b) La energía interna está dada por

$$U = - \left(\frac{\partial \ln(Z_C)}{\partial \beta} \right)_{V,N} = \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\frac{3}{2} N \ln(\beta) - N \ln \left(\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} m R^2) - 1 \right) \right] \quad (8)$$

$$U = N \left[\frac{5}{2} k_B T + \frac{\frac{\Omega^2}{2} m R^2}{1 - \exp(\Omega^2 m R^2 / 2 k_B T)} \exp(\Omega^2 m R^2 / 2 k_B T) \right]. \quad (9)$$

Para analizar los límites de temperaturas bajas y altas, debemos primero, aunque parezca una tautología, preguntarnos lo que significa que la temperatura sea alta o baja. En ese sentido resulta conveniente definir la variable adimensional $x = \Omega^2 m R^2 / 2 k_B T$, que introduce naturalmente la temperatura característica $T_c = \Omega^2 m R^2 / 2 k_B$. Si la temperatura del sistema mucho menor o mucho mayor que la misma, el sistema se encuentra en el régimen de baja o alta temperatura, respectivamente. Así:

* Baja temperatura (rotación dominante): x es muy grande y la exponencial resulta dominante, por lo cual

$$U \sim N \left(\frac{5}{2} k_B T - \frac{\Omega^2}{2} m R^2 \right), \quad (10)$$

todas las partículas del sistema se acomodan en las paredes debido a la fuerza centrífuga alta, adoptando el estado menos energético.

* Alta temperatura (rotación despreciable): x es muy pequeño y las exponenciales pueden desarrollarse a primer orden en el denominador y a orden cero en el numerador, resultando:

$$U \sim N \left[\frac{5}{2} k_B T + \frac{\frac{\Omega^2}{2} m R^2}{1 - 1 - \Omega^2 m R^2 / 2 k_B T} 1 \right] = \frac{3}{2} N k_B T, \quad (11)$$

que es la energía media de un gas ideal monoatómico.

(c) Hay muchas maneras de calcular distribución radial o densidad de partículas del gas en función de r .

Una manera directa es operando con Z_1 . La probabilidad de que una partícula tenga el estado genérico ν está dada en el conjunto canónico por:

$$p_\nu = \frac{e^{-\beta E_\nu}}{Z_1}. \quad (12)$$

Si sumáramos sobre todos los estados posibles obtendríamos 1, pues la probabilidad está normalizada. Ahora bien, si sumamos sobre todos los estados que no tienen que ver con las coordenadas espaciales, es decir si integramos en \mathbf{p} , podemos obtener la probabilidad $p(r)$ de que una partícula cualquiera de las que conforman el gas se halle a distancia r del eje de rotación al notar la simetría de revolución presente en el problema. Es decir:

$$p(r) = \frac{1}{Z_1} \int \exp(-\beta H) \frac{d^3p}{h^3} = \frac{1}{Z_1} \underbrace{Z_p}_{Z_p Z_q} \exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mr^2) \quad (13)$$

$$p(r) = \frac{\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mr^2)}{\frac{2\pi L}{\beta \Omega^2 m} (\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mR^2) - 1)} = \frac{\beta m \Omega^2}{2\pi L} \frac{\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mr^2)}{\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mR^2) - 1} \quad (14)$$

La densidad de probabilidad $n(r)$ es simplemente

$$n(r) = Np(r) = N \frac{\beta m \Omega^2}{2\pi L} \frac{\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mr^2)}{\exp(\beta \frac{\Omega^2}{2} mR^2) - 1} \quad (15)$$

Al analizar la distribución debieron haber notado que ésta es compatible con la interpretación hecha en términos de la energía interna del inciso anterior.

¿Se recupera que $\int n(r) d^3r = N$? ¡Véanlo!