Física Teórica 3 – 2do. cuatrimestre de 2020

Guía 4: *Teoría cinética – Ecuación de Boltzmann*

Notarán que esta es una *guía* de problemas en el sentido literal de la palabra. No hay ningún concepto muy complicado, pero sí muchos detalles sobre cómo hacer las cuentas teniendo en consideración la finitud de la vida humana. A propósito de esto, en la última página hay varias integrales útiles. Pueden consultar el libro de Dalvit et al. para la parte de transporte y el de Huang para leyes de conservación. Los interesados en recibir un susto de muerte pueden buscar el libro de Chapman y Cowling, *The Mathematical Theory of Non–uniform Gases*, o investigar otras fuentes acerca de la expansión de Chapman–Enskog.

1. Considere un gas clásico de partículas de masa m descripto por la función de distribución de una partícula $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, y sea $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ una magnitud asociada a cada partícula del gas.

   (a) Si se usa la variable $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$, ¿cuál es, en términos de f, la función de distribución adecuada?

   (b) Escribir el valor medio de $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ en el punto $\mathbf{r}$ a tiempo t, $\langle \chi \rangle (\mathbf{r}, t)$.

   (c) Escribir la densidad de $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ en $\mathbf{r}$ y t, $\rho_\chi(\mathbf{r}, t)$.

   (d) ¿Cuál es la función $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ cuya densidad corresponde a la densidad de partículas $n(\mathbf{r}, t)$?

   (e) Escribir las expresiones integrales que definen la densidad n, la velocidad media $\mathbf{u}$, la densidad de energía cinética ϵ y la densidad de impulso $\boldsymbol{\pi}$. En particular, relacionar $\boldsymbol{\pi}$ con n y $\mathbf{u}$.

   Si un elemento de área con normal $\mathbf{n}$, en la posición $\mathbf{r}$ a tiempo t, se mueve con velocidad $\mathbf{v}$, el flujo de la magnitud χ a través de este elemento puede escribirse como $\mathbf{j}_\chi \cdot \mathbf{n}$, donde $\mathbf{j}_\chi$ es la densidad de corriente asociada a χ. (Si χ es un vector, $\mathbf{j}_\chi$ será un tensor, etc.)

   f) Dados $\mathbf{r}$, t y una velocidad $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ escribir $\mathbf{j}_\chi(\mathbf{r}, t)$.

   Usualmente se consideran dos casos: $\mathbf{v}$ igual a la velocidad media del gas, $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{p}/m \rangle (\mathbf{r}, t)$, o $\mathbf{v}$ igual a cero. Como casos particulares, escribir las expresiones para:

   g) La densidad de corriente de partículas, $\mathbf{j}$. Aquí se toma $\mathbf{v} = 0$. Relacionar el resultado con $\mathbf{u}$ y n.

   h) La densidad de corriente de energía cinética, $\mathbf{j}_\epsilon$. Aquí se toma $\mathbf{v} = 0$.

   i) La densidad de corriente térmica o de flujo de calor, $\mathbf{q}$, definida como la corriente de energía cinética medida en un sistema que se mueve con la velocidad local del gas. Es decir, se toma $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, pero además se calcula la energía en el sistema localmente en reposo, $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m}|\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2$. Como antes, $\mathbf{u}$ es la velocidad media del gas.

   j) El tensor de presión, P_{ij}: el tensor cuya componente ij es el flujo de la componente i de impulso, medido en el sistema localmente en reposo, a través de un elemento de área con normal en la dirección j que se mueve con la velocidad media del gas: $\chi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = [p_i - m u_i(\mathbf{r}, t)]$, $\mathbf{v} = \mathbf{u}$.

   k) El tensor de flujo de impulso, Θ_{ij}, definido como el tensor cuya componente ij es el flujo de la componente i de impulso, medido en el sistema del laboratorio, a través de un elemento de área con normal en la dirección j en reposo en ese sistema: $\chi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = p_i$, $\mathbf{v} = 0$.

2. Un gas en equilibrio está a temperatura T y tiene densidad de partículas n. Su función de distribución es la de Maxwell−Boltzmann. Sobre una de las paredes del recipiente que contiene al gas, hay un pequeño orificio de área A. Asumiendo que pueda despreciarse el efecto del orificio sobre la distribución de equilibrio del gas, calcular el número de partículas que escapan por unidad de tiempo.

3. Escribir la función de distribución exacta de equilibrio de un gas en un potencial externo $\phi(\mathbf{r})$, en términos de la función de distribución de equilibrio cuando $\phi = 0$ (Huang 2da. ed. pág 78). Sea n_0 la densidad del aire en la superficie terrestre. Determine la densidad n_z a una altura z suponiendo equilibrio y temperatura uniforme. Despreciar la variación de g con la altura.

■ Si una cantidad $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, asociada a cada partícula, se conserva en las colisiones binarias, es decir, si $\chi'_1 + \chi'_2 = \chi_1 + \chi_2$, entonces es posible deducir leyes de conservación para las soluciones de la ecuación de Boltzmann. La forma de estas leyes es la siguiente (Huang §5.3):

$$\int dp^3\, \chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0. \tag{1}$$

La más elemental de estas leyes es la conservación del número de partículas; la función $\chi = 1$ lleva la cuenta del número de partículas antes y después de la colisión. Si cada integral de las que aparecen en (1) se identifica con el valor medio o con la corriente de alguna de las variables macroscópicas, la forma final de la ley de conservación puede interpretarse como una ecuación de continuidad.

4) Demostrar que para $\chi = 1$, $\chi = \mathbf{p}$ y $\chi = p^2/2m$ resultan las siguientes ecuaciones de continuidad:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\, \mathbf{u}) = 0, \qquad m \frac{\partial}{\partial t}(n\mathbf{u}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\Theta} = n \left\langle \mathbf{F} \right\rangle, \qquad \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_\epsilon = n \left\langle \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \mathbf{F} \right\rangle,$$

donde n es la densidad, $\mathbf{u}$ la velocidad media y

$$\Theta_{ij} = \int d^3p\, \frac{p_i p_j}{m}\, f, \qquad \epsilon = \int d^3p\, \frac{p^2}{2m} f, \qquad \mathbf{j}_\epsilon = \int d^3p\, \frac{p^2}{2m} \frac{\mathbf{p}}{m}\, f.$$

Interpretar físicamente cada término. *Ayudas*: i) la derivadas respecto del tiempo y de la posición pueden sacarse fuera de la integral; ii) el término con la fuerza $\mathbf{F}$ puede integrarse por partes; iii) suponga que la fuerza exterior cumple $\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = 0$; en particular demuestre que esta condición incluye el caso de la fuerza de Lorentz.

■ Los siguientes problemas tratan acerca de las aproximaciones de equilibrio local y de tiempo de relajación. La primera corresponde a asumir que la función de distribución del gas es una distribución de Maxwell−Boltzmann local más una corrección δf,

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{n(\mathbf{r}, t)}{[2\pi m k T(\mathbf{r}, t)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{|\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2}{2mkT(\mathbf{r}, t)} \right] + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \tag{2}$$

con tres condiciones suplementarias que fijan los valores de n, $\mathbf{u}$ y T, a saber,

$$\int d^3p\, \delta f = 0, \qquad \int d^3p\, \mathbf{p}\, \delta f = 0, \qquad \int d^3p\, \frac{p^2}{2m}\, \delta f = 0. \tag{3}$$

5) Demostrar que las tres condiciones anteriores significan que las funciones n y $\mathbf{u}$ que aparecen en f_0 son la densidad y la velocidad media exactas y que la densidad de energía cinética exacta es

$$\epsilon = \frac{3}{2}nkT + \frac{1}{2}n\,mu^2,$$

lo que define T en general. (Algunas integrales útiles figuran en la última página.)

■ El integrando en el término de colisiones de la ecuación de Boltzmann es cuadrático en f,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm col} = \int d^3p_1' d^3p_2' d^3p_2\, \delta^3\left(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2'\right) \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2')\, |T_{fi}|^2 (f_2' f_1' - f_2 f_1).$$

Antes hemos definido $f = f_0 + \delta f$, así que la combinación de f's que aparece en el término de colisiones puede escribirse como

$$f_2' f_1' - f_2 f_1 = f_{02}' f_{01}' - f_{02} f_{01} + \delta f_2'\, f_{01}' + f_{02}'\, \delta f_1' - \delta f_2\, f_{01} - f_{02}\, \delta f_1 + \delta f_1'\, \delta f_2' - \delta f_2\, \delta f_1. \tag{4}$$

6) Demostrar por cálculo directo que cualquier distribución de Maxwell−Boltzmann local, con funciones T, $\mathbf{u}$ y n arbitrarias, reemplazada en el término de colisiones integra a cero.

■ Por lo tanto, los primeros dos términos en el miembro de la derecha de la ecuación (4) no contribuyen a la integral de colisiones. De los otros términos, a más bajo orden se pueden omitir los que son cuadráticos en δf, conservando sólo los que son lineales. De esta forma puede estimarse que $(\partial f/\partial t)_{\rm col} \sim \delta f$. Esto motiva la siguiente aproximación

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm col} \approx -\frac{\delta f}{\tau},$$

donde τ es un tiempo microscópico característico, mucho menor que la escala de evolución macroscópica del sistema. En definitiva, la ecuación de Boltzmann en la aproximación de tiempo de relajación es

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

A más bajo orden en τ puede escribirse entonces

$$\delta f = -\tau \left[\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_0\right]. \tag{5}$$

En muchas aplicaciones no es necesario calcular δf de manera explícita, debido a que lo que importa en realidad son las corrientes y densidades, es decir, integrales de δf sobre el impulso. Al reemplazar la expresión (5) en estas integrales ocurren dos cosas: i) la derivada respecto del tiempo y el gradiente respecto a la posición pueden sacarse fuera de las integrales (evitando tener que calcular los muchos términos de las derivadas de una función que depende de $\mathbf{r}$ y t a través de la composición de muchas otras funciones), ii) el gradiente respecto del impulso puede integrarse usando integración por partes (trasladando el peso de las derivadas sobre simples funciones del impulso, en vez de la gaussiana). Hay que tener presente esto en los problemas que siguen. Además, en la última página hay algunas integrales que aparecen con frecuencia.

7) Suponga que el régimen es estacionario (es decir, las derivadas respecto del tiempo son cero) y que no hay fuerzas externas. Siempre en la aproximación de equilibrio local y de tiempo de relajación:

(a) Demostrar que las tres condiciones (3) implican a orden τ

$$\nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0, \qquad m\,n(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} + \nabla(nkT) = 0, \qquad (\mathbf{u}\cdot\nabla)\left(\tfrac{5}{2}kT + \tfrac{1}{2}mu^2\right) = 0,$$

y que son equivalentes a la conservación (exacta) del número de partículas y a la conservación a orden más bajo del impulso y de la energía, respectivamente. Estas igualdades se usan en los ítems que siguen.

(b) Calcular el tensor de flujo de impulso Θ_{ij} hasta orden τ, es decir, usando la distribución (2) y la corrección δf dada por (5). El resultado al que se debe llegar es

$$\Theta_{ij} = n\Big[kT\,\delta_{ij} + m\,u_i u_j\Big] - \tau n\Big[\,(\mathbf{u}\cdot\nabla)(kT)\,\delta_{ij} + kT\,(\partial_i u_j + \partial_j u_i)\,\Big].$$

El factor que acompaña al término $(-\partial_i u_j - \partial_j u_i)$ es la viscosidad, $\eta = \tau nkT$.

(c) Bajo las mismas condiciones que antes pero suponiendo además que el fluido está en reposo, calcule la densidad de corriente de energía cinética hasta orden τ. Note que para un fluido en reposo el flujo de energía cinética coincide con el de calor. El resultado al que se debe llegar es

$$\mathbf{j}_\epsilon = \mathbf{q} = -\left(\frac{5\tau nk^2T}{2m}\right)\nabla T.$$

El coeficiente que multiplica a $(-\nabla T)$ es la conductividad térmica, $\kappa = \dfrac{5\tau nk^2T}{2m}$.

(d) Halle el cociente $\kappa/(C_V\eta)$, donde C_V es la capacidad calorífica por unidad de masa a volumen constante, y vea que es una constante numérica universal. (Al respecto ver Dalvit et al., págs. 261$-$262; Huang 2da. ed. pág. 108.)

8) En este problema se calcula la conductividad eléctrica de un gas maxwelliano de electrones en la aproximación de tiempo de relajación. Ésta es una buena aproximación para un plasma: esencialmente, un gas neutro de iones con poca movilidad y electrones libres que chocan únicamente contra los iones. Es importante notar que, debido a la disparidad entre las masas de los electrones y de los iones, desde el punto de vista de los electrones los iones son blancos fijos de masa infinita. En estos choques la energía de los electrones se conserva, pero no su impulso. La distribución de equilibrio, que se construye a partir de las cantidades que se conservan en las colisiones, carecerá por lo tanto de un término lineal en el impulso. La aproximación correcta es entonces

$$f(\mathbf{r},t) = f_0(\mathbf{r},t) + \delta f(\mathbf{r},t) = \frac{n(\mathbf{r},t)}{[2\pi mkT(\mathbf{r},t)]^{3/2}}\,\exp\left[-\frac{p^2}{2mkT(\mathbf{r},t)}\right] + \delta f(\mathbf{r},t),$$

sin término de arrastre, y donde ahora sólo se piden dos condiciones,

$$\int d^3p\,\delta f = 0, \qquad \int d^3p\,\frac{p^2}{2m}\,\delta f = 0. \tag{6}$$

Hechas estas salvedades, la aproximación de tiempo de relajación se plantea como antes,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

A orden más bajo y en régimen estacionario se encuentra

$$\delta f = -\tau \left(\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_0 \right).$$

Rara vez uno está interesado en escribir δf explícitamente. Lo que interesa es calcular integrales de δf en el espacio de impulsos. En tal caso, las derivadas respecto de la posición se podrán sacar fuera de las integrales, y las derivadas respecto del impulso se podrán integrar por partes.

(a) Demostrar que para la fuerza de Lorentz, $\mathbf{F} = q\left[\mathbf{E} + (mc)^{-1}\, \mathbf{p} \times \mathbf{B}\right]$, con campos $\mathbf{E}$ y $\mathbf{B}$ independientes del tiempo, las condiciones (6) se cumplen automáticamente a orden τ.

(b) Demostrar que la velocidad media del gas de electrones a orden τ está dada por

$$n\mathbf{u} = -\frac{\tau}{m}\, \nabla(nkT) + \frac{\tau n q\, \mathbf{E}}{m}.$$

Multiplicando por q se obtiene la corriente eléctrica; el término proporcional a $\mathbf{E}$ es la conductividad. Al margen de esto, se ve que un gradiente de temperatura también genera una corriente eléctrica.

Algunas integrales útiles

Si f es la distribución de Maxwell−Boltzmann centrada en $\mathbf{p}_0 = m\mathbf{u} = 0$,

$$f(p) = \frac{n}{(2m\pi kT)^{3/2}}\, \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right),$$

entonces:

$$\begin{aligned}
&\int d^3p\; f(p) = n,\\
&\int d^3p\; p_i p_j\, f(p) = \delta_{ij}\, m\, nkT,\\
&\int d^3p\; p^2\, f(p) = 3m\, nkT,\\
&\int d^3p\; p_i p_j p_k p_l\, f(p) = (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl})\; n(mkT)^2\\
&\int d^3p\; p^2 p_i p_j\, f(p) = 5\, \delta_{ij}\, n(mkT)^2,\\
&\int d^3p\; p^4\, f(p) = 15\; n(mkT)^2.
\end{aligned}$$

Notar que la integral de un número impar de componentes del impulso siempre es cero, por simetría. Si se trata de hacer integrales con $m\mathbf{u} \neq 0$, es decir, con la gaussiana no centrada de la ec. (2), hay que hacer el cambio de variable $\mathbf{p} \to \mathbf{p} + m\mathbf{u}$, que centra la gaussiana pero desplaza las componentes del impulso que se están promediando.