Física Teórica 3 — 1er. cuatrimestre de 2019

Guía 4: *Teoría cinética y Ecuación de Boltzmann*

Esta es una *guía* de problemas en el sentido literal de la palabra *guía*. 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. Se recomienda 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 $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ una magnitud que puede calcularse para cada partícula.

   a) Escribir la densidad $\rho_\chi(\mathbf{r}, t)$ de la magnitud χ en el punto $\mathbf{r}$ a tiempo t.

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

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

   d) Además de $n(\mathbf{r}, t)$, escribir las expresiones integrales que definen 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 $\mathbf{u}$.

2. 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 $\mathbf{j}_\chi$, que depende de $\mathbf{v}$, es la densidad de corriente asociada a χ. (Si χ es un vector, $\mathbf{j}_\chi$ será un tensor, etc.) Usualmente se consideran dos casos: $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, la velocidad media del gas, y $\mathbf{v}$ igual a cero.

   a) Dados $\mathbf{r}$, t y una velocidad $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ escribir la expresión general de $\mathbf{j}_\chi(\mathbf{r}, t)$. (Pensar primero en la corriente de partículas; después, en la corriente de masa; luego, generalizar).

   b) Escribir la densidad de corriente de partículas $\mathbf{j}$ en el sistema del laboratorio. Aquí se toma $\mathbf{v} = 0$. Relacionar el resultado con $\mathbf{u}$ y n.

   c) Escribir la densidad de corriente de energía cinética $\mathbf{j}_\epsilon$. Aquí se toma $\mathbf{v} = 0$.

   d) Escribir 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, $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m}|\mathbf{p} - m\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|^2$.

   e) Escribir 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: $\chi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = p_i$, $\mathbf{v} = 0$.

f) Escribir el tensor de presión P_{ij}, que es 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: $\chi_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = [p_i - m u_i(\mathbf{r}, t)]$, $\mathbf{v} = \mathbf{u}$.

3. **Efusión**. 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, mucho menor que el camino libre medio de las partículas. 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. (Huang 2da. ed. pág 95).

4. **Gas en un potencial externo**. Escribir la función de distribución 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). Como ejemplo, si n_0 es 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.

5. **Leyes de conservación**. 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):

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

(La ley de conservación más elemental es la 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.

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

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

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 para los cálculos*: 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 $\nabla_p \cdot \mathbf{F} = 0$; en particular demuestre que esta condición incluye el caso de la fuerza de Lorentz.

6. **Aproximaciones de equilibrio local y de tiempo de relajación**. La aproximación de equilibrio local corresponde a asumir que la función de distribución del gas es una distribución de Maxwell–Boltzmann local más una corrección δf,

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

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

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

a) Calcular la corriente de partículas $\mathbf{j}$, el tensor de esfuerzos Θ_{ij} y la densidad de flujo de energía $\mathbf{j}_\epsilon$ asociados a la aproximación de más bajo orden $f \approx f_0$.

b) Demostrar que las tres condiciones (3) significan que las funciones n y $\mathbf{u}$ que aparecen en f_0 son la densidad y la velocidad media exactas, y mostrar que la densidad de energía cinética exacta es

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

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

c) Recordarán que el integrando en el término de colisiones de la ecuación de Boltzmann es cuadrático en f,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{col}} = \int d^3p_1' d^3p_2' d^3p_2\ \delta^3(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1'-\mathbf{p}_2')\ \delta(E_1+E_2-E_1'-E_2')\ |T_{fi}|^2\ (f_2'f_1'-f_2f_1). \tag{4}$$

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.

d) Antes hemos definido $f = f_0 + \delta f$, así que la combinación de f's que aparece en el término de colisiones (4) puede escribirse como

$$f_2'f_1'-f_2f_1 = (f_{02}'f_{01}'-f_{02}f_{01}) + \delta f_2'\,f_{01}' + f_{02}'\,\delta f_1' - \delta f_2\,f_{01} - f_{02}\,\delta f_1 + \delta f_1'\,\delta f_2' - \delta f_2\,\delta f_1. \tag{5}$$

El *item (c)* muestra que el término entre paréntesis no contribuye 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 $(\partial f/\partial t)_{\text{col}} \sim \delta f$. Esto motiva la aproximación de tiempo de relajación

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

donde τ es un tiempo microscópico característico, mucho menor que la escala de evolución macroscópica del sistema.

Finalmente, la ecuación de Boltzmann en la aproximación de tiempo de relajación es

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

Mostrar que a más bajo orden en τ puede escribirse

$$\delta f = -\tau \left[\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f_0 + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_0 \right]. \tag{6}$$

e) No suele ser necesario calcular δf de manera explícita, debido a que lo que importa son las corrientes y densidades, es decir, integrales de δf sobre el impulso. Al reemplazar la expresión (6) 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 por partes (trasladando el peso de las derivadas a simples funciones del impulso, en vez de la gaussiana).

Suponga que el régimen es estacionario y que no hay fuerzas externas.

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

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

y que son equivalentes [vía el *item (a)*] 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 *items* que siguen.

ii) Calcular el tensor de flujo de impulso Θ_{ij} hasta orden τ, es decir, usando la distribución (2) y la corrección δf dada por (6) con $\partial f_0/\partial t = 0$ y $\mathbf{F} = 0$. El resultado al que se debe llegar es

$$\Theta_{ij} = n \Big[kT\delta_{ij} + mu_i u_j \Big] - \tau n \Big[(\mathbf{u} \cdot \nabla)(kT)\, \delta_{ij} + kT\, (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \Big]. \tag{7}$$

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

f) Bajo las mismas condiciones que antes pero suponiendo además que el fluido está en reposo, calcule $\mathbf{j}_\epsilon$ 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

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

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

g) 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.)

7. **Modelo de Lorentz**. En este problema se calcula la conductividad eléctrica de un gas de partículas cargadas cuya única interacción es mediante choques contra centros de dispersión fijos. El modelo se aplica a semiconductores y plasmas: en este último caso se trata, esencialmente, de un gas neutro de iones con poca movilidad y electrones libres que chocan predominantemente 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,

$$\int d^3p\, \delta f = 0, \qquad \int d^3p\, \frac{p^2}{2m}\, \delta f = 0. \tag{8}$$

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

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

Según se ha dicho, 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 (8) 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:

$$\int d^3p\ f(p) = n,$$

$$\int d^3p\ p_i p_j\ f(p) = \delta_{ij} mnkT,$$

$$\int d^3p\ p^2\ f(p) = 3m\,nkT,$$

$$\int d^3p\ p_i p_j p_k p_l\ f(p) = \left(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl}\right)\ n(mkT)^2,$$

$$\int d^3p\ p^2 p_i p_j\ f(p) = 5\delta_{ij} n(mkT)^2,$$

$$\int d^3p\ p^4\ f(p) = 15n(mkT)^2.$$

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, lo que da lugar a integrales de órdenes más bajos.