Entregable 1 Física Estadística

Lucas Pérez Romero

November 2024

1 Ejercicio 1

Considera un gas ideal clásico a una cierta temperatura T. El gas se encuentra encerrado en un cilindro vertical de sección S y altura L en el cual actúa un campo gravitatorio constante en la dirección -z. El hamiltoniano del sistema se expresa como:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + mgz_i \tag{1}$$

(a) Calcula la función de partición canónica para una molécula de dicho gas y demuestra que es proporcional a $T^{\frac{5}{2}}$

$$Ayuda : \int_0^\infty dpp^2 e^{-\frac{p^2}{2mkT}} = (2mkT)^{3/2} \tag{2}$$

(b) Demuestra que si la la altura fuera infinita, la energía interna de una molécula sería: $\overline{E} = \frac{5}{2}kT$

2 Función de partición para N= 1

Partiremos de la definición de función de partición sabiendo que tenemos solo una molécula es decir N=1

$$Z = \frac{1}{h^{3N}N!} \int dqdpe^{-\beta(\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + mgz_i)} \tag{3}$$

$$Z = \frac{1}{h^3} \int_V d^3re^{-\beta mgz} \int_0^\infty d^3pe^{-\beta\frac{p^2}{2m}} \tag{4}$$

Tal y como dice el enunciado el cilindro tiene una altura L y una sección S, superficie S, por lo que la integral de las coordenadas puede asumirse como una integral en cilíndricas.

$$\pi r^2 \int_0^L dze^{-\beta mgz} \tag{5}$$

Cuya solución es inmediata:

$$\frac{\pi r^2}{\beta mg}(1-e^{-\beta mgL}) \tag{6}$$

Por otra parte, si asumimos que las moléculas de gas tienen simetría esférica la integral puede verse como tres veces la misma, una por cada coordenada del momento.

$$(\int_0^\infty dpe^{-\beta\frac{p^2}{2m}})^3 \tag{7}$$

De esta forma obtenemos una integral de tipo gaussiana cuya solución es similar a la dada por la ayuda:

$$(\frac{2\pi m}{\beta})^{3/2} \tag{8}$$

Finalmente la función de partición será el producto de las dos soluciones obtenidas, sustituyendo $\beta = \frac{1}{kT}$:

$$Z = \frac{\pi r^2 kT}{mgh^3}(2\pi mkT)^{3/2}(1-e^{-\beta mgL}) \tag{9}$$

Si simplificamos la solución demostramos que la función de partición es proporcional a $T^{5/2}$ como propone el enunciado:

$$Z = \frac{r^2}{h^3}(\pi KT)^{5/2}\sqrt{\frac{8m}{g}}(1-e^{\frac{-mgL}{kT}}) \tag{10}$$

3 Energía interna si $z \to \infty$

Para el caso de un cilindro de altura infinita la exponencial resultante de sustituir por L tendería a 0, debido a que tiene un exponente negativo, obteniendo una solución más simple:

$$Z = \frac{\pi r^2}{mg\beta h^3}(\frac{2m}{\beta})^{3/2} \tag{11}$$

Sabemos que la definición de la energía interna en la colectividad canónica es:

$$\overline{E} = -(\frac{\partial lnZ}{\partial\beta})_{X_\alpha} \tag{12}$$

Calculando el logaritmo de Z obtenemos que su expresión es:

$$lnZ = ln\frac{r^2}{h^3} - ln(mg\beta) + \frac{3}{2}ln(\frac{2\pi m}{\beta}) \tag{13}$$

Si calculamos la derivada de logaritmo obtenemos:

$$\overline{E} = -(-\frac{3}{2}\frac{\beta}{2\pi m}\frac{2\pi m}{\beta^2} - \frac{mg}{mg\beta}) = -(\frac{3}{2}\frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta}) = \frac{5}{2}\frac{1}{\beta} \tag{14}$$

Si sustituimos $\beta = kT$ demostramos la solución propuesta en el enunciado.

$$\overline{E} = \frac{5}{2}kT \tag{15}$$

4 Ejercicio 2

Argumentad los siguientes apartados:

(a) Describid como obtendríais la ecuación de estado de un gas ideal de 3 partículas indistinguibles contenidas en un recinto R de volumen V .

Ayuda: Suponer que la partícula se encuentra encerrada en una esfera. Volumen de la esfera: $\frac{\pi^N}{N!}R^N$

(b) ¿En este caso se podría decir que el valor medio es aproximadamente igual a su valor real? ¿Por qué?

5 Ecuación de estado de gas ideal para N= 3

Para obtener la ecuación de estado debemos calcular primero la función de partición para un gas ideal, cuyo hamiltoniano es:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \tag{16}$$

Así pues la función de partición queda como la siguiente integral:

$$Z = \frac{1}{h^{3N}N!} \int dqdpe^{-\beta \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m}} \tag{17}$$

De la misma forma que en el ejercicio anterior podemos desarrollar la siguiente integral, obteniendo una integral dependiente de las coordenadas ,en función del recinto R, y otra del momento. Nótese que como tratamos con partículas indistinguibles hay que incluir el factorial de N.

$$Z = \frac{1}{h^{3N}N!}(\int_R d^3r \int_0^\infty d^3pe^{-\beta \frac{p^2}{2m}})^N \tag{18}$$

Como en la primera integral no hay ninguna función dependiente de la posición su solución será el volumen del recinto R. La integral del momento se puede identificar como la tipo gaussiana resuelta anteriormente. Con todo esto la función queda de la siguiente forma:

$$Z = \frac{1}{h^{3N}N!}R^N(2\pi mkT)^{3N/2} \tag{19}$$

Si sustituimos $N = 3$ obtenemos Z para el sistema de partículas propuesto.

$$Z = \frac{1}{h^9 3!}R^3(2\pi mkT)^{9/2} \tag{20}$$

La ecuación de estado se define como aquella que relaciona las magnitudes termodinámicas P,V y T. Por ello emplearemos la definición del valor medio de la presión para la colectividad canónica:

$$\overline{P} = kT(\frac{\partial lnZ}{\partial V})_{T,N} \tag{21}$$

El logaritmo neperiano de la función de partición,Z tiene la siguiente expresión:

$$lnZ = 3lnR + \frac{9}{2}ln(2\pi mkT) - ln(h^9 3!) \tag{22}$$

Si calculamos su derivada con respecto al volumen, en nuestro caso R el volumen quedaría:

$$\overline{P} = 3kT\frac{1}{R} \tag{23}$$

Así la ecuación de estado para el sistema es:

$$\overline{P}R = 3kT \tag{24}$$

6 ¿$\overline{P}$ puede interpretarse como su valor real?

Para el sistema propuesto por el enunciado de $N = 3$ partículas la aproximación de $\overline{P} \approx P$ no es correcta debido a que es un número bajo de partículas como para que el valor sea similar al de un sistema termodinámico o macroscópico, los cuales suelen tener gases de N muy alto.