Tarea 5

Fecha de entrega: 29 de Septiembre

Profesor: Felipe Barra De La Guarda
Auxiliar: Matías Araya Satriani
Ayudantes: Astor Sandoval Parra

P1. Molécula diatómica

Considere una molécula diatómica con átomos de masa m_1 y m_2 en contacto con un baño térmico a temperatura T cuyo hamiltoniano (clásico) tiene la forma:

$$\mathcal{H} = \frac{|\vec{p}_\mu|^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{L^2}{2I} \tag{1}$$

Donde μ indica el centro de masa. Usando el teorema de equipartición muestre que la energía promedio de la molécula diatómica es $\langle E \rangle = \frac{5kT}{2}$.
Recordando que (en coordenadas esféricas):

$$\frac{L^2}{2I} = \frac{1}{2} I(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \operatorname{sen}^2\theta) \tag{2}$$

Calcule la energía promedio de la molécula diatómica a partir de su energía libre y muestre que coincide con el resultado del teorema de equipartición.

Hint: En $\mathcal{H}$ ya se encuentra presente el momentum del centro de masa, para calcular la función partición necesitará expresar el momentum asociado a θ y ϕ en el hamiltoniano. Para esto recuerde que el lagrangiano rotacional es $\mathcal{L}_{rot} = \frac{1}{2} I(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 \operatorname{sen}^2\theta)$ y obtenga los momentos conjugados $\vec{p}_\theta$ y $\vec{p}_\phi$ para llegar a $\mathcal{H}_{rot}$. Usando este resultado describa $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{trans} + \mathcal{H}_{rot}$, donde $\mathcal{H}_{trans} = \frac{|\vec{p}_\mu|^2}{2(m_1+m_2)}$.

P2. Gas de Coulomb Bidimensional

Considere una mixtura clásica de N partículas cargadas positivamente y N partículas cargadas negativamente en una caja bidimensional de área $A = L \times L$. El Hamiltoniano es:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{2N} \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m} - \sum_{i<j}^{2N} c_i c_j \log\left(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|\right) \tag{3}$$

donde $c_i = c_0$ para $i = 1, \cdots, N$ y $c_i = -c_0$ para $i = N+1, \cdots, 2N$. La idea de este problema es encontrar la presión del gas notando que no podemos resolver de manera exacta la función partición del problema dado que es interactuante.

1. Note que en el término de interacción cada par aparece solamente una vez, y que no hay autointeracción $i = j$. ¿Cuántos pares tienen interacción repulsiva y cuántos tienen interacción atractiva?

2. Encuentre una expresión para la función partición, integrando las coordenadas de momento y escribiendo la contribución de las posiciones como un producto de potencias de $|\vec{q}_i - \vec{q}_j|$.

3. A pesar de que no podemos resolver las integrales en la posición, podemos encontrar la dependencia directa de Z en A. Ideé un método para lograr lo anterior.

4. Calcule la presión del Gas de Coulomb.

5. Calcule los límites de altas y bajas temperaturas e interprete.

P3. Gas Débilmente Interactuante

Considere un gas de particulas débilmente interactuantes. El Hamiltoniano es:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + U\left(r_1, \cdots, r_n\right) \tag{4}$$

La forma de U puede ser complicada involucrando interacciones entre dos, tres, o más particulas. Considere solo interacciones binarias, las cuales se modelan con dos requerimientos, a corta distancia las particulas del gas se repelen intensamente y cuando las particulas están lejos se atraen débilmente.

1. Considere que el gas está diluido y por lo tanto se pueden despreciar los choques múltiples. Bajo este supuesto, justifique que se puede realizar la siguiente aproximación:

$$\frac{1}{V^N} \int dr_1 \ldots dr_N e^{-\beta U(r_1 \cdots r_N)} = \left(1 + \frac{N(N-1)}{2V^2} \int dr_1 dr_2 \left(e^{-\beta U(r_2 - r_2)} - 1\right)\right)$$

   Ocupando lo anterior, muestre que la energía libre del gas es

$$F = F_{id} + \frac{N^2 T B(T)}{V}$$

   donde F_{id} es la la energía libre del gas ideal y $B(T)$ es el primer coeficiente virial definido como

$$B(T) = \frac{1}{2} \int dr \left(1 - e^{-U(r)/T}\right)$$

2. Muestre que la ecuación de estado del gas es

$$\frac{PV}{NT} = 1 + \frac{NB(T)}{V}$$

3. El coeficiente de Joule α_J se define como

$$\alpha_J = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_E$$

   e indica si un gas se calienta o enfría bajo una expansión a energía constante. Muestre que el coeficiente de Joule para este gas es:

$$\alpha_J = -\frac{N^2 T^2}{c_V V^2} B'(T)$$

4. Este gas, ¿se enfría o expande bajo expansión a energía constante? Argumente su respuesta analizando el signo de α_J y además argumente por qué para un gas débilmente interactuante está pasando lo que usted ha deducido.