Mª del Carmen S.
Ángel

Problema 7 – HOJA 1 (PROBLEMAS ADICIONALES)

Un gas ideal monoatómico está contenido en una centrífuga consistente en un cilindro de radio *R* y longitud *L*. El cilindro rota con velocidad angular *ω* alrededor de su eje de simetría. Los átomos tienen masa *m* y obedecen la estadística clásica.

a) Escribir el Hamiltoniano en el sistema de referencia que rota con el cilindro.
b) ¿Cuál es la función de partición del sistema?
c) ¿Cuál será el número medio de partículas por unidad de volumen a una distancia *r* del eje del cilindro?

No considerar el efecto de la gravedad y asumir que la centrífuga ha rotado ya suficiente tiempo para que el gas haya alcanzado el equilibrio. (Ayuda: Describir la fuerza centrífuga mediante un potencial).

a) ***Escribir el Hamiltoniano en el sistema de referencia que rota con el cilindro:***

El Hamiltoniano del sistema es:

$$H = T + V; \qquad (1)$$

donde la energía cinética *T* viene dada por:

$$T = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p_i^2}}{2m}\ ; \qquad (2)$$

y la energía potencial *V* la obtenemos a partir solamente de la *fuerza centrífuga*, (nos dicen que despreciemos los efectos de la gravedad: $V = mgz_i$), fuerza "ficticia" que aparece al analizar el movimiento de las partículas desde el sistema de referencia que rota con el cilindro (*sistema de referencia no inercial*):

$$F_{centrífuga} = m\frac{v^2}{r} = m\omega^2 r$$

(donde: $v = \omega r$); y como:

$$F(r) = -\frac{d\,V(r)}{dr} \Longrightarrow V(r) = -\int F(r)dr$$

tendremos que:

$$V(r) = -\int m\omega^2 r\,dr \Longrightarrow V(r) = -m\omega^2 \int r dr \Longrightarrow V(r) = -m\omega^2 \frac{r^2}{2}$$

Luego:

$$V = \sum_{i=1}^{N} -m\omega^2 \frac{r_i^2}{2}\ ; \qquad (3)$$

Por lo tanto, sustituyendo (2) y (3) en la ecuación (1), tendremos que el Hamiltoniano de nuestro sistema es:

$$\boxed{H = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} - m\omega^2\frac{r_i^2}{2}\right)} \quad (4)$$

b) ***¿Cuál es la función de partición del sistema?:***

La función de partición para el *colectivo canónico* viene dada por la expresión:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!\,h_0^f}\int dq\ dp\ e^{-\beta H(q,p)}$$

y sustituyendo el Hamiltoniano obtenido en el apartado anterior, (ecuación (4)), tomará la forma:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!\,h_0^{3N}}\int dq\ dp\ e^{-\beta\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 r_i^2\right)\right]}$$

Pero sabemos que para el caso del gas ideal, la función de partición se puede expresar también como:

$$Z(\beta) = \frac{\zeta^N}{N!}\ ; \qquad (5)$$

donde ζ es la función de partición de una partícula, que en nuestro caso será:

$$\zeta = \frac{1}{h_0^3}\int d^3\boldsymbol{r}\ d^3\boldsymbol{p}\quad e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right)}$$

Luego:

$$\zeta = \frac{1}{h_0^3}\int d^3\boldsymbol{p}\quad e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\int d^3\boldsymbol{r}\quad e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} \quad ; \quad (6)$$

Calculamos el valor de las integrales de la ecuación anterior por separado:

- La primera integral de la ecuación (6), teniendo en cuenta que en coordenadas polares: $d^3\boldsymbol{p} = 4\pi p^2 dp$, tomará la forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3\boldsymbol{p}\quad e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} = 4\pi\int_0^{\infty} p^2\ e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\ dp$$

  y haciendo el cambio de variable: $t \equiv \frac{\beta}{2m}p^2 \Longrightarrow p = \frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{\beta}}\sqrt{t} \Longrightarrow dp = \sqrt{\frac{2m}{\beta}}\frac{1}{2\sqrt{t}}dt$,

  resulta que:

$$4\pi\int_0^{\infty} p^2\ e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\,dp = 4\pi\int_0^{\infty}\frac{2m\,t}{\beta}\ e^{-t}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}\frac{1}{2\sqrt{t}}dt = 2\pi\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2}\int_0^{\infty} dt\ t^{1/2}e^{-t}$$

Por otro lado, sabemos que la *función Gamma* viene dada por la expresión:

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} dt\ t^{n-1}e^{-t}$$

y que una de sus propiedades dice que:

$$\Gamma\left(m+\frac{1}{2}\right) = \frac{1.3.5\ldots(2m-1)}{2^m}\sqrt{\pi}, m = 1,2,3,\ldots \Longrightarrow \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Así pues:

$$2\pi\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2}\int_0^{\infty} dt\ t^{1/2}e^{-t} = 2\pi\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = 2\pi\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2}\frac{\sqrt{\pi}}{2} = \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2}$$

Luego:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3\boldsymbol{p}\quad e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} = \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2}\ ;\qquad (7)$$

- La segunda integral de la ecuación (6), teniendo en cuenta que en coordenadas cilíndricas: $d^3\boldsymbol{r} = rdrd\theta dz$, tomará la forma:

$$\int\limits_{Cilindro} d^3\boldsymbol{r}\quad e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} = \int_{-L/2}^{+L/2} dz\int_0^{2\pi} d\theta\int_0^R r\quad e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2}\ dr =$$

$$L2\pi\int_0^R \frac{1}{\beta m\omega^2}\frac{\partial}{\partial r}\quad e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2}\ dr = \frac{2\pi L}{\beta m\omega^2}\int_0^R \frac{\partial}{\partial r}\quad e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2}\ dr = \frac{2\pi L}{\beta m\omega^2}\left[\ e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2}\right]_0^R$$

Por lo tanto:

$$\int\limits_{Cilindro} d^3\boldsymbol{r}\quad e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} = \frac{2\pi L}{\beta m\omega^2}\left(\ e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 R^2} - 1\right);\qquad (8)$$

Luego, sustituyendo (7) y (8) en la ecuación (6) resulta que:

$$\zeta = \frac{1}{h_0^3}\left\{\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{3/2}\left[\frac{2\pi L}{\beta m\omega^2}\left(\ e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 R^2} - 1\right)\right]\right\} = \frac{1}{h_0^3}\left[\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{5/2}\frac{\sqrt{m}\,L}{\omega^2}\left(\ e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 R^2} - 1\right)\right];(9)$$

Por tanto, sustituyendo (9) en (5) tendremos que la función de partición de nuestro sistema es:

$$\boxed{Z(\beta) = \frac{1}{N!\,h_0^{3N}}\left[\left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{5/2}\frac{\sqrt{m}\,L}{\omega^2}\left(\ e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 R^2} - 1\right)\right]^N}$$

c) ***¿Cuál será el número medio de partículas por unidad de volumen a una distancia*** r ***del eje del cilindro?***

El número medio de partículas a una distancia *r* del eje del cilindro viene dada por la expresión:

$$N(r) \propto e^{-\beta U(r)} \Leftrightarrow N(r) = Ae^{-\beta V(r)}\,; \qquad (10)$$

El valor de la constante *A* lo obtenemos de la condición de normalización:

$$\int d^3\boldsymbol{r}\; N(r) = N$$

Luego, haciendo uso del valor de la integral calculada en el *apartado b),* tendremos:

$$\int d^3\boldsymbol{r}\; Ae^{-\beta V(r)} = N \Longrightarrow\; A \int_{Cilindro} d^3\boldsymbol{r}\;\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} = N \Longrightarrow A\frac{2\pi L}{\beta m\omega^2}\left(\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} - 1\right) = N \Longrightarrow$$

$$A = \frac{N\beta m\omega^2}{2\pi L\left(\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} - 1\right)}$$

Y sustituyendo este valor en la ecuación (10), resulta que:

$$N(r) = \frac{N\beta m\omega^2}{2\pi L\left(\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} - 1\right)}\;\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2}$$

Por lo tanto, el número medio de partículas *por unidad de volumen* será:

$$\frac{N(r)}{V} = \frac{N}{V}\frac{\beta m\omega^2}{2\pi L\left(\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} - 1\right)}\;\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} \Longrightarrow$$

$$\boxed{\frac{N(r)}{V} = \frac{n\;\beta m\omega^2\;\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2}}{2\pi L\left(\; e^{\frac{\beta}{2}m\omega^2 r^2} - 1\right)}}$$

(donde *n* es la densidad de partículas: $n = N/V$))