PROBLEMA ADICIONAL Nº 5. HOJA 2.

Un gas real tiene un potencial intermolecular dado por $u(r) = \in e^{-\propto r^2}$ donde $\propto > 0$, pero $\propto$ puede ser positivo (potencial repulsivo) o negativo (potencial atractivo). Demuestra que en el límite de altas temperaturas ($\beta|\epsilon| \ll 1$) el segundo coeficiente del virial es

$$B_2(T) \approx \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \frac{\epsilon}{2k_B T}$$

Calculamos $B_2(T)$, que viene dado por:

$$B_2(T) = -2\pi \int_0^\infty drr^2\, \rho(r) \qquad \text{donde} \qquad \rho(r) = e^{-\beta u(r)} - 1$$

Calculamos $\rho(r)$:

$$\rho(r) = exp\left[-\beta \in e^{-\alpha r^2}\right] - 1$$

Hacemos un desarrollo en serie de Taylor del argumento de la exponencial:

$$e^{-x} - 1 = 1 - x \qquad \text{siendo} \qquad x = \beta \in e^{-\alpha r^2}$$

Sustituyendo:

$$\rho(r) = 1 - \beta \in e^{-\alpha r^2} + \theta(\in^2) - 1$$

Como $\beta|\epsilon| \ll 1$ despreciamos los términos de orden > 2. Por tanto:

$$\rho(r) = -\beta \in e^{-\alpha r^2}$$

Por lo que $B_2(T)$:

$$B_2(T) = -2\pi \int_0^\infty drr^2 \left[-\beta \in e^{-\alpha r^2}\right] = 2\pi\beta \in \int_0^\infty drr^2\, e^{-\alpha r^2}$$

Para el cálculo de la integral:

$$\int_{-\infty}^\infty dr\, e^{-\alpha r^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \qquad \Rightarrow \qquad \int_0^\infty dr\, e^{-\alpha r^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

Derivando a ambos lados de la igualdad con respecto a α:

$$-\int_0^\infty drr^2\, e^{-\alpha r^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\frac{d}{d\alpha}\alpha^{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{4}\sqrt{\pi}\frac{1}{\alpha^{3/2}}$$

Por tanto:

$$B_2(T) = 2\pi\beta \in \frac{1}{4}\sqrt{\pi}\frac{1}{\alpha^{3/2}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \beta \in$$

Sustituyendo el valor de $\beta = \frac{1}{k_B T}$

$$B_2(T) = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \beta \in = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \frac{\in}{2k_B T}$$

$$\boxed{B_2(T) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2} \frac{\in}{2k_B T}}$$

c.q.d.