

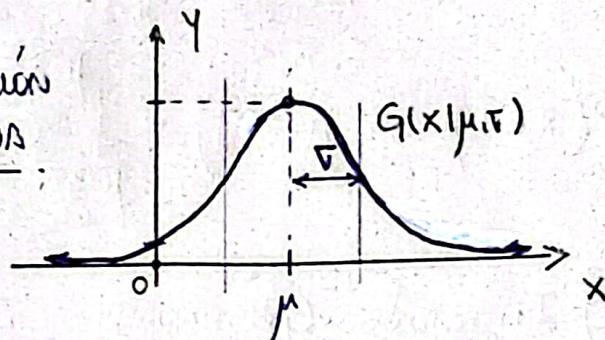
DISTRIBUCIÓN GAUSSIANA:

5

LA DISTRIBUCIÓN GAUSSIANA $G(x|\mu, \sigma)$ ES RELEVANTE POR MODELAR CANTIDAD DE FENÓMENOS FÍSICOS Y SOCIALES EN DONDE SE ENCUENTRAN SUMAS DE VARIABLES ALEATORIAS DESCONOCIDAS QUE INTERVIENEN EN LOS PROCESOS.

$$G(x|\mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

DISTRIBUCIÓN
GAUSSIANA



μ $\equiv$ VALOR MEDIO DE LA DISTRIBUCIÓN.

σ $\equiv$ DISPERSIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN.

1) NORMALIZACIÓN:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(x|\mu, \sigma) dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi\sigma^2}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}$$

$\mu=0$
 $\gamma = \frac{1}{2\sigma^2}$

$\Rightarrow$
SIMETRÍA
RESPECTO
 $\Delta x=0$

$$\int_0^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \equiv I_0$$

2) VALOR MEDIO Y DISPERSIÓN:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x G(x|\mu, \sigma) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} dx = \dots = \mu$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 G(x|\mu, \sigma) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} dx = \dots = \mu^2 + \sigma^2$$

$$\Rightarrow \text{Var}(x) \equiv \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \mu^2 + \sigma^2 - \mu^2 \Rightarrow \text{Var}(x) = \sigma^2$$

$$\Rightarrow \Delta x = \sigma$$

3) PROBABILIDADES:

$$P(x \in [\mu - \sigma, \mu + \sigma]) = \int_{\mu - \sigma}^{\mu + \sigma} G(x|\mu, \sigma) dx \approx \underline{0,6826}$$

$$P(x \in [\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma]) = \int_{\mu - 2\sigma}^{\mu + 2\sigma} G(x|\mu, \sigma) dx \approx \underline{0,9544}$$

$$P(x \in [\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]) = \int_{\mu - 3\sigma}^{\mu + 3\sigma} G(x|\mu, \sigma) dx \approx \underline{0,9974}$$

4) INTEGRALES GAUSSIANAS:

$$I_\alpha = \int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-\gamma x^2} dx \quad \text{INTEGRALES GAUSSIANAS}$$

YA CONOCEMOS EL RESULTADO DE LA I_0 ; VEAMOS TAMBIÉN I_1 :

$$I_0 = \int_0^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}$$

$$I_1 = \int_0^{+\infty} x e^{-\gamma x^2} dx \stackrel{r = x^2}{\underset{dr = 2x dx}{=}} \int_0^{+\infty} \frac{1}{2} e^{-\gamma r} dr = \frac{1}{2\gamma}$$

¿Y SI NECESITO OTRA INTEGRAL I_α ? PODEMOS NOTAR QUE:

$$I_2 = \int_0^{+\infty} \underbrace{x^2 e^{-\gamma x^2}}_{= -\frac{\partial}{\partial \gamma} (e^{-\gamma x^2})} dx = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \underbrace{\int_0^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx}_{= I_0} = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \right) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma^3}}$$

$$I_3 = \int_0^{+\infty} \underbrace{x^3 e^{-\gamma x^2}}_{= -\frac{\partial}{\partial \gamma} (x e^{-\gamma x^2})} dx = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \underbrace{\int_0^{+\infty} x e^{-\gamma x^2} dx}_{= I_1} = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{1}{2\gamma} \right) = \frac{1}{2\gamma^2}$$

LOS MIEMBROS DE LA FAMILIA DE INTEGRALES I_α PUEDEN DERIVARSE DE I_0 (MIEMBROS PARES) O DE I_1 (MIEMBROS IMPARES)

o Ejemplo:

$$\begin{aligned} I_4 &= \int_0^{+\infty} x^4 e^{-\gamma x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \int_0^{+\infty} x^2 e^{-\gamma x^2} dx = \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \int_0^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx \\ &= \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} (I_0) = \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \right) = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma^5}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_5 &= \int_0^{+\infty} x^5 e^{-\gamma x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial \gamma} \int_0^{+\infty} x^3 e^{-\gamma x^2} dx = \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \int_0^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx \\ &= \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} (I_1) = \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \left(\frac{1}{2\gamma} \right) = \frac{1}{\gamma^3} \end{aligned}$$

REGLA: $I_\alpha = -\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\gamma-2}$, $\alpha \geq 2 \rightarrow$

$$\begin{cases} I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} \\ I_1 = \frac{1}{2\gamma} \\ I_\alpha = \int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-\gamma x^2} dx \end{cases}$$

OBSERVACIÓN: Si se quiere extender el resultado en un intervalo simétrico respecto al cero, hay que ver los integrandos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x^{2\alpha}}_{\text{par}} e^{-\gamma x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} x^{2\alpha} e^{-\gamma x^2} dx = 2 \cdot I_{2\alpha}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x^{2\alpha+1}}_{\text{impar}} \underbrace{e^{-\gamma x^2}}_{\text{par}} dx = 0$$

¡Ojo!

DISTRIBUCIÓN MAXWELL-BOLTZMANN:

• SE TRATA DE UN MODELO MICROSCÓPICO DE LA MATERIA, DESDE UN PUNTO DE VISTA CLÁSICO. LAS HIPÓTESIS SON:

- 1 - EL SISTEMA ESTÁ EN EQUILIBRIO TÉRMICO A TEMPERATURA 'T'.
- 2 - EL GAS (O SISTEMA GENERAL) ESTÁ DILUIDO: LAS DISTANCIAS MOLECULARES SON MÁS GRANDES RESPECTO AL TAMAÑO DE LAS PARTÍCULAS.
- 3 - SE DESPRECIAN POTENCIALES DE INTERACCIÓN ENTRE MOLÉCULAS FRENTE A SU ENERGÍA CINÉTICA (SOLVO CUANDO COLISIONAN ELÁSTICAMENTE).

4 - SE TIENEN EN CUENTA FUERZAS EXTERNAS AL SISTEMA.

• LA DISTRIBUCIÓN MAXWELL-BOLTZMANN (MB) ES LA INDICADA PARA, POR EJEMPLO, DESCRIBIR UN GAS IDEAL. LA MISMA TIENE LA EXPRESIÓN GENERAL DADA POR:

$$\frac{d^6 N_{\vec{x}, \vec{n}}}{N} \equiv f_{MB}(\vec{x}, \vec{n}) d^3 \vec{x} d^3 \vec{n} \equiv A \cdot e^{-\beta E(\vec{x}, \vec{n})} d^3 \vec{x} d^3 \vec{n}$$

- $f_{MB}(\vec{x}, \vec{n}) \equiv$ DISTRIBUCIÓN DE MAXWELL-BOLTZMANN.
- $A \equiv$ CONSTANTE DE NORMALIZACIÓN.
- $E(\vec{x}, \vec{n}) \equiv$ ENERGÍA POR PARTÍCULA
- $\beta = \frac{1}{k_B T}$, $k_B \equiv$ CONSTANTE DE BOLTZMANN ($k_B \approx 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$)

• Ejemplo: GAS IDEAL (LA CONTRIBUCIÓN A LA ENERGÍA ES SOLO CINÉTICA).

$$E(\vec{x}, \vec{n}) = E(\vec{n}) = \frac{1}{2} m |\vec{n}|^2 \rightarrow f_{MB}(\vec{x}, \vec{n}) = A \cdot e^{-\beta E(\vec{x}, \vec{n})}$$

$$\Rightarrow f_{MB}(\vec{n}) = A \cdot e^{-\beta \frac{m}{2} |\vec{n}|^2}$$

SI QUEREMOS ESCRIBIRLA EN FUNCIÓN DE SUS COMPONENTES n_x, n_y, n_z :

$$f_{MB}(\vec{n}) d^3 \vec{n} = A e^{-\frac{\beta m}{2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} dn_x dn_y dn_z$$

DISTRIBUCIÓN DE
VELOCIDADES VECTORIALES

VELOS QUE:

$$f_{MB}(\vec{n}) = A e^{-\frac{\beta m}{2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)} = A \cdot \underbrace{e^{-\frac{\beta m}{2} n_x^2}}_{= f(n_x)} \cdot \underbrace{e^{-\frac{\beta m}{2} n_y^2}}_{= f(n_y)} \cdot \underbrace{e^{-\frac{\beta m}{2} n_z^2}}_{= f(n_z)}$$

3 gaussianas independientes.

1) Normalización:

$$1 = \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{N} f_{MB}(\vec{N}) = A \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dN_x e^{-\frac{\beta u}{2} N_x^2}}_{\text{LA MISMA INTEGRAL}} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dN_y e^{-\frac{\beta u}{2} N_y^2}}_{\text{LA MISMA INTEGRAL}} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dN_z e^{-\frac{\beta u}{2} N_z^2}}_{\text{LA MISMA INTEGRAL}}$$

$$= A \cdot \left(\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dN e^{-\frac{\beta u}{2} N^2}}_{= 2I_0} \right)^3 = A \cdot \left(2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\beta u/2}} \right)^3$$

$$= A \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{\beta u}}^3 \Rightarrow \boxed{A = \left(\frac{\beta u}{2\pi} \right)^{3/2}}$$

2) Velocidad Media Vectorial:

$$\langle N_x \rangle = \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{N} N_x f_{MB}(\vec{N}) = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dN_x N_x e^{-\frac{\beta u}{2} N_x^2}}_{\text{IMPAR} \times \text{PAR} = 0} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dN_y e^{-\frac{\beta u}{2} N_y^2} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dN_z e^{-\frac{\beta u}{2} N_z^2}$$

$$= 0$$

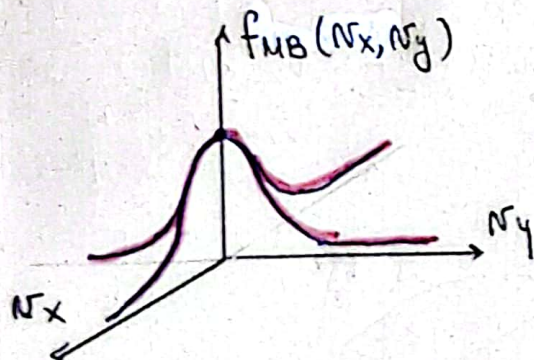


$$\langle N_x \rangle = 0$$

$$\langle N_y \rangle = 0$$

$$\langle N_z \rangle = 0$$

← NO HAY DIRECCIÓN PRIVILEGIADA.



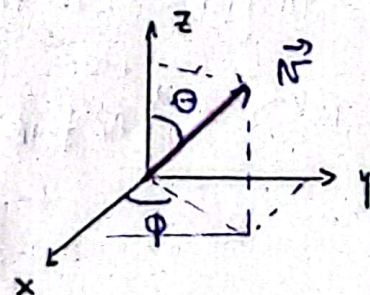
← RESULTAN SER GAUSSIANNAS DE VALOR MEDIO CERO (1 por cada Eje).

3) Velocidad Media Escalar: SI QUEREMOS UNA DISTRIBUCIÓN DE PROBABILIDAD PARA EL MÓDULO DE LA VELOCIDAD ENTONCES CONVIENE PASAR A ESFERICAS:

$$\left. \begin{aligned} N_x &= N \cos \phi \sin \theta \\ N_y &= N \sin \phi \sin \theta \\ N_z &= N \cos \theta \end{aligned} \right\}$$

$$N^2 = N_x^2 + N_y^2 + N_z^2$$

$$dN_x dN_y dN_z = N^2 dN d\Omega$$



$$f_{MB}(\vec{r}) d^3\vec{r} = A \cdot e^{-\frac{\beta m}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} dv_x dv_y dv_z$$

$$= A \cdot e^{-\frac{\beta m}{2} N^2} \cdot N^2 dN d\Omega \quad \leftarrow \text{si solo nos interesa } N, \text{ integro en el ángulo sólido (MARGINALIZO).}$$

$$\Rightarrow f_{MB}(N) dN = \int_0^{4\pi} d\Omega f(\vec{r}) dN$$

$$= 4\pi \cdot A \cdot e^{-\frac{\beta m}{2} N^2} N^2 dN$$

Habiendo ya calculado el valor de la constante 'A', tenemos que:

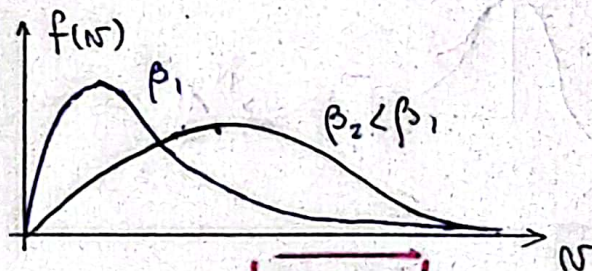
$$f_{MB}(\vec{r}) = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta m}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} \quad \leftarrow \text{DISTRIBUCIÓN VECTORIAL}$$

$$f_{MB}(N) = 4\pi \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} N^2 e^{-\frac{\beta m}{2} N^2} \quad \leftarrow \text{DISTRIBUCIÓN ESCALAR}$$

$$\langle N \rangle = \int_0^{+\infty} N f_{MB}(N) dN = 4\pi \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^{+\infty} N^3 e^{-\frac{\beta m}{2} N^2} dN}_{= I_3}$$

$$= \dots = \sqrt{\frac{8K_B T}{\pi m}} /$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle N \rangle = \sqrt{\frac{8K_B T}{\pi m}}}$$



$$\Rightarrow \boxed{T_2 > T_1}$$

$\hookrightarrow$ A MAYOR T , SE TIENE N MÁS ALTOS

4) DISPERSIÓN DE LA VELOCIDAD:

$$\langle N^2 \rangle = \int_0^{+\infty} N^2 f_{MB}(N) dN = 4\pi \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^{+\infty} N^4 e^{-\frac{\beta m}{2} N^2} dN}_{= I_4}$$

$$= \dots = \frac{3K_B T}{m} /$$

$$\Rightarrow \underline{\text{Var}(N) = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2} \Rightarrow$$

$$\text{Var}(N) = \left(3 - \frac{8}{\pi}\right) \frac{K_B T}{m} /$$

$$\Delta N \approx 0,67 K_B T / m /$$

5) VELOCIDAD CUADRÁTICA MEDIA:

$$v_{rms} \equiv \sqrt{\langle v^2 \rangle} \Rightarrow \boxed{v_{rms} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}}$$

6) ENERGÍA CINÉTICA MEDIA:

$$\langle E_c \rangle \equiv \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle \Rightarrow \langle E_c \rangle = \frac{1}{2} m \cdot 3 \frac{k_B T}{m}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E_c \rangle = \frac{3}{2} k_B T} \quad \text{ENERGÍA DE GAS IDEAL MONOATÓMICO}$$

7) PRESIÓN MEDIA:

$$P = \frac{N k_B T}{V} = \rho k_B T \Rightarrow \langle P \rangle = \rho \overbrace{k_B T}^{\frac{2}{3} \langle E_c \rangle} = \frac{2}{3} \rho \cdot \overbrace{\langle E_c \rangle}^{= \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle} = \frac{2}{3} \rho \cdot \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$$

(GAS IDEAL)

$$\Rightarrow \boxed{\langle P \rangle = \frac{1}{3} \rho m \langle v^2 \rangle} \quad \text{PRESIÓN MEDIA (GAS IDEAL)}$$

EJERCICIOS QUE

PUEDEN REALIZARSE:

1, 2, 5, 11

EJERCICIOS DE ESTE

• TEOREMA DE EQUIPARTICIÓN: → TEMA: 6, 7, 8, 9

• PARA LA TEORÍA CLÁSICA, y bajo las hipótesis de la DISTRIBUCIÓN DE MAXWELL-BOLTZMANN, EXISTE UNA PROPIEDAD MATEMÁTICA GENERAL QUE QUEREMOS REVELAR. PARA ELLO, SUPONGAMOS UN SISTEMA DE N PARTÍCULAS DONDE LA ENERGÍA PARA CADA UNA DE ELLAS PUEDE ESCRIBIRSE COMO:

$$E(\vec{q}) = \sum_{i=1}^D c_i q_i^2 \quad \leftarrow \text{ENERGÍA CON 'D' TÉRMINOS CUADRÁTICOS}$$

$q_i \equiv$ COORDENADA 'i'
(posición, velocidad)

$c_i \equiv$ COEFICIENTE 'i'
(PESO)

• ES MUY IMPORTANTE QUE TODOS LOS TÉRMINOS SEAN CUADRÁTICOS EN LAS COORDENADAS EN LA EXPRESIÓN DE LA ENERGÍA. LA DISTRIBUCIÓN ASOCIADA ES:

$$\begin{aligned} \int f_{MB}(\vec{q}) d\vec{q} &= A e^{-\beta E(\vec{q})} d\vec{q} = A e^{-\beta \sum_{i=1}^D c_i q_i^2} dq_1 \dots dq_D \\ &= A \prod_{i=1}^D e^{-\beta c_i q_i^2} dq_i \end{aligned}$$

1) Normalización:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} A \prod_{i=1}^D e^{-\beta c_i q_i^2} dq_i = A \prod_{i=1}^D \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta c_i q_i^2} dq_i$$

$= 2 I_{0,i}$

$$= A \cdot \prod_{i=1}^D \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta c_i}} = A \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \cdot \prod_{i=1}^D \frac{1}{\sqrt{c_i}} \Rightarrow$$

$$A = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \prod_{i=1}^D \sqrt{c_i}$$

2) VALOR MEDIO DE ENERGÍA: PARA PLANTEAR EL VALOR MEDIO DE LA ENERGÍA, PRIMERO PLANTEAREMOS LA MAGNITUD $\langle q_k^2 \rangle$, YA QUE:

$$\langle E \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^D c_i q_i^2 \right\rangle_{\text{unidad}} = \sum_{i=1}^D c_i \langle q_i^2 \rangle \rightarrow \text{calculemos } \langle q_k^2 \rangle !!$$

$$\begin{aligned}
 \langle q_k^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} q_k^2 f_{MB}(\vec{q}) d\vec{q} = \int_{-\infty}^{+\infty} q_k^2 \cdot A \cdot \prod_{i=1}^D e^{-\beta c_i q_i^2} dq_i \\
 &= A \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} q_k^2 e^{-\beta c_k q_k^2} dq_k}_{= 2I_{2,k}} \cdot \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^D \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta c_i q_i^2} dq_i}_{= 2I_{0,i}} \\
 &= A \cdot \cancel{2} \cdot \frac{1}{\cancel{2}} \sqrt{\frac{\pi}{(\beta c_k)^3}} \cdot \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^D \cancel{2} \cdot \frac{1}{\cancel{2}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta c_i}} \\
 &= \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \prod_{j=1}^D (\sqrt{c_j}) \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{(\beta c_k)^3}} \cdot \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^D \sqrt{\frac{\pi}{\beta c_i}} \\
 &= \frac{1}{2} \cdot \cancel{\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}} \cdot \cancel{\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_k}} \cdot \frac{1}{\beta c_k} \cdot \prod_{j=1}^D (\sqrt{c_j}) \cdot \cancel{\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}} \cdot \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^D \frac{1}{\sqrt{c_i}} \\
 &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\beta c_k} \cdot \cancel{\prod_{j=1}^D (\sqrt{c_j})} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_k}} \cdot \cancel{\prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^D \frac{1}{\sqrt{c_i}}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_B T}{c_k}
 \end{aligned}$$

por lo cual, el valor medio de energía resulta:

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^D c_i \langle q_i^2 \rangle = \sum_{i=1}^D c_i \frac{k_B T}{2 c_i} = \frac{1}{2} k_B T \sum_{i=1}^D 1 = \frac{1}{2} k_B T D$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = \frac{1}{2} D k_B T} \quad \text{TEOREMA DE EQUIPARTICIÓN}$$

(CADA TÉRMINO CUADRÁTICO EN LA ENERGÍA APORTA $\frac{k_B T}{2}$ AL VALOR MEDIO)

• VEMOS QUE EL VALOR MEDIO DE $\langle E \rangle$ NO DEPENDE DE LOS COEFICIENTES c_i NI SI SE TRATAN LAS COORDENADAS q_i DE POSICIÓN O VELOCIDADES, ÚNICAMENTE DEPENDE DE LA TEMPERATURA 'T' Y LA CANTIDAD DE TÉRMINOS CUADRÁTICOS 'D'.

• SI QUEREMOS SABER LA ENERGÍA DEL SISTEMA COMPLETO:

$$\underline{\langle E_{TOT} \rangle = N \langle E \rangle} \Rightarrow \langle E_{TOT} \rangle = \frac{1}{2} D \underbrace{N k_B T}_{= n R} \Rightarrow \boxed{\langle E_{TOT} \rangle = \frac{1}{2} D n R T}$$

LUEGO, SU CAPACIDAD CALORÍFICA RESULTA:

(2)

$$C_v \equiv \frac{\partial \langle E_{TOT} \rangle}{\partial T}$$

$\Rightarrow$

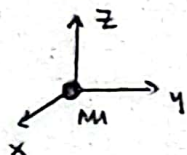
$$C_v = \frac{1}{2} D n R$$

CAPACIDAD CALORÍFICA
A $V = cte$ DEL SISTEMA

APLICACIONES: CAPACIDADES CALORÍFICAS DE GASES Y SÓLIDOS.

• GAS IDEAL MONOATÓMICO:

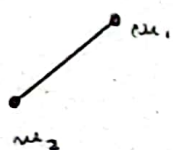
(T.C $\equiv$ TÉRMINOS CUADRÁTICOS)



$$E = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} \rightarrow 3 \text{ T.C (D=3)}$$

$$\Rightarrow C_v = \frac{3}{2} n R \quad \checkmark$$

• GAS IDEAL DIATÓMICO (SIN VIBRACIÓN):



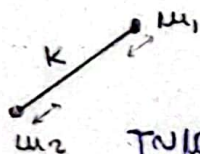
T.N.L.O.K se
'activan' las rotaciones.

$$E = \frac{P_x^2}{2M} + \frac{P_y^2}{2M} + \frac{P_z^2}{2M} + \frac{I_1 \dot{\theta}_1^2}{2} + \frac{I_2 \dot{\theta}_2^2}{2} \rightarrow (D=5)$$

masa total
($M = m_1 + m_2$)

$$\Rightarrow C_v = \frac{5}{2} n R \quad \checkmark$$

• GAS IDEAL DIATÓMICO (CON VIBRACIÓN):



T.N.L.O.K se
'activan' las vibraciones

$$E = \frac{P_x^2}{2M} + \frac{P_y^2}{2M} + \frac{P_z^2}{2M} + \frac{I_1 \dot{\theta}_1^2}{2} + \frac{I_2 \dot{\theta}_2^2}{2} + \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \frac{1}{2} K r^2$$

(D=7)

$$\Rightarrow C_v = \frac{7}{2} n R \quad \checkmark$$

masa reducida
($\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$)

• COEFICIENTE DE ADIABÁTICAS γ ?

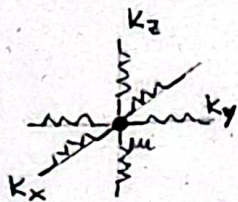
$$\left[\gamma \equiv \frac{C_p}{C_v} = \frac{C_v + nR}{C_v} = 1 + \frac{nR}{C_v} \right]$$

$|C_p = C_v + nR|$
(GAS IDEAL)

$$\text{si } C_v = \frac{7}{2} n R \Rightarrow$$

$$\boxed{\gamma = \frac{9}{7}}$$

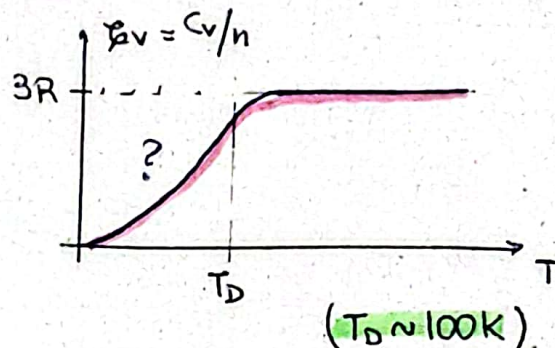
SÓLIDO CRISTALINO:



$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2} k_x x^2 + \frac{1}{2} k_y y^2 + \frac{1}{2} k_z z^2 \rightarrow (D=6)$$

$$\Rightarrow C_v = 3nR \quad \checkmark \quad (\text{LEY DE DULONG-PETIT})$$

- ESTE RESULTADO SE CONFIRMA EXPERIMENTALMENTE A TEMPERATURAS ALTAS ($T > T_D$). SIN EMBARGO, CUANDO $T \rightarrow 0$ SE TIENE QUE $C_v \rightarrow 0$, LO CUAL LA MECÁNICA CLÁSICA NO PUEDE EXPLICARLO.



MOLECULA TETRAÉDRICA:



NÚMERO DE GRADOS DE LIBERTAD: $\overset{= g.l.}{3 \cdot 4} = 12$ (3 por cada átomo)

g.l. TRaslación = 3 $\rightarrow$ cada uno aporta 1 T.C. (p^2)

g.l. ROTACIÓN = 3 $\rightarrow$ cada uno aporta 1 T.C. (θ^2)

g.l. VIBRACIÓN = $12 - 3 - 3 = 6$ $\rightarrow$ cada uno aporta 2 T.C. ($\dot{r}^2, r^2$)

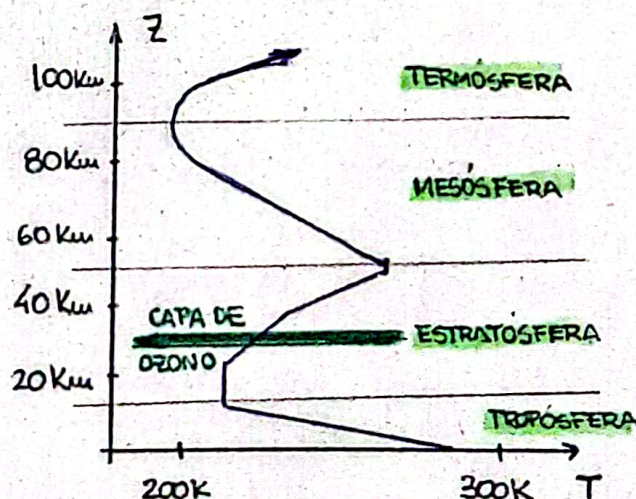
$$D = 3 \cdot 1 + 3 \cdot 1 + 6 \cdot 2 = 18$$

$$\Rightarrow \boxed{C_v = 9 k_B T}$$

$$\Rightarrow \boxed{\gamma = \frac{10}{9}}$$

ATMÓSFERA ISOTÉRMICA: APLICACIÓN DE MAXWELL-BOLTZMANN (Ej. 13)

- NUESTRA INTENCIÓN ES MODELAR A LA ATMÓSFERA CON UN MODELO BASTANTE BÁSICO PARA SU COMPLEJIDAD, PERO QUE SIRVE A FINES ACADÉMICOS: LA ATMÓSFERA ISOTÉRMICA ($T = cte$). PARA ALTURAS RELATIVAMENTE CERCANAS A LA SUPERFICIE TERRESTRE FUNCIONA BASTANTE BIEN.

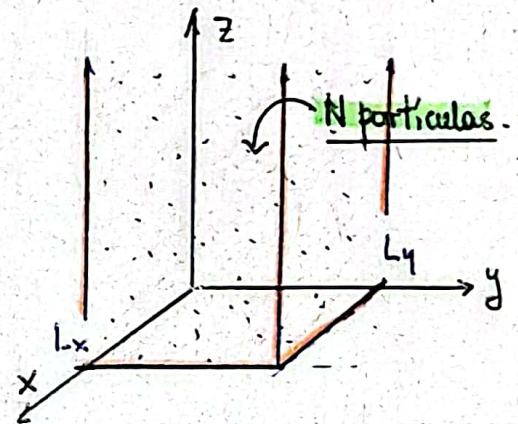


3) Las partículas las modelaremos como un gas ideal pero bajo la acción del potencial gravitatorio. Teniendo la energía por partícula, obtenemos la distribución:

$$E(\vec{x}, \vec{v}) = \frac{1}{2} m |\vec{v}|^2 + m g z = \frac{1}{2} m (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + m g z$$

$$\begin{aligned} f_{MB}(\vec{x}, \vec{v}) d^3\vec{x} d^3\vec{v} &= A \cdot e^{-\beta E(\vec{x}, \vec{v})} d^3\vec{x} d^3\vec{v} \\ &= A \cdot e^{-\frac{\beta m}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} e^{-\beta m g z} dv_x dv_y dv_z dx dy dz \end{aligned}$$

1) NORMALIZACIÓN: Si somos atentos, notaremos que si integramos en 'x' ó en 'y' en el intervalo $(-\infty, +\infty)$ entonces no habrá forma de normalizar la distribución (DIVERGE). La forma de solucionar esto es integrando en una porción que sea representativa de toda la atmósfera (ver figura):



$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{v} \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{+\infty} dz f_{MB}(\vec{v}, \vec{x}) \\ &= A \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dv_x e^{-\frac{\beta m}{2} v_x^2}}_{= 2I_0} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dv_y e^{-\frac{\beta m}{2} v_y^2}}_{= 2I_0} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dv_z e^{-\frac{\beta m}{2} v_z^2}}_{= 2I_0} \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{+\infty} dz e^{-\beta m g z} \\ &= A \cdot \left(\cancel{2} \cdot \frac{1}{\cancel{2}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta m/2}} \right)^3 \cdot L_x L_y \cdot \frac{e^{-\beta m g z}}{-\beta m g} \bigg|_0^{+\infty} = A \cdot \left(\frac{2\pi}{\beta m} \right)^{3/2} \cdot \frac{L_x L_y}{\beta m g} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{A = \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{\beta m g}{L_x L_y}}$$

Con esto, la distribución resulta:

$$f_{MB}(\vec{x}, \vec{v}) = \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{\beta m g}{L_x L_y} e^{-\frac{\beta m}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} e^{-\beta m g z}$$

= Supongamos que queremos conocer la densidad del gas. Como la distribución contiene una dependencia espacial, la densidad no será uniforme en todo el sistema. En particular, variará con 'z'.

$$\rho(\vec{x}) = \frac{d^3 N_{\vec{x}}}{dV} = \frac{d^3 N_{\vec{x}}}{d^3 \vec{x}}, \quad \text{pero} \quad \frac{d^6 N_{\vec{r}, \vec{x}}}{N} = f_{MB}(\vec{x}, \vec{r}) d^3 \vec{x} d^3 \vec{r}$$

(DENSIDAD DE PARTICULAS).

ENTONCES:

$$\rho(\vec{x}) = \frac{d^3 N_{\vec{x}}}{N d^3 \vec{x}} \cdot N = N \cdot \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3 \vec{r} f_{MB}(\vec{x}, \vec{r})$$

$$= A \cdot N \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r}_x e^{-\frac{\beta m}{2} \vec{r}_x^2}}_{= 2I_0} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r}_y e^{-\frac{\beta m}{2} \vec{r}_y^2}}_{= 2I_0} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r}_z e^{-\frac{\beta m}{2} \vec{r}_z^2}}_{= 2I_0} \cdot e^{-\beta m g z}$$

$$= N \cdot \left(\frac{\beta m}{2\pi} \right)^{3/2} \cdot \frac{\beta m g}{L_x L_y} \cdot \left(2 \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta m/2}} \right)^3 \cdot e^{-\beta m g z}$$

$$= \frac{N}{L_x L_y} \cdot \beta m g e^{-\beta m g z} = \rho(z) \Rightarrow \boxed{\rho(z) = \rho(0) e^{-\beta m g z}}$$

(DENSIDAD DE LA ATMÓSFERA)

$$\rho(0) = \frac{N}{L_x L_y} \beta m g$$

= Si quisiéramos la presión, solo haría falta usar la ecuación de estado de gases ideales:

$$P = \rho k_B T \Rightarrow \boxed{P(z) = P(0) e^{-\beta m g z}}, \quad P(0) = \rho(0) k_B T$$

(PRESIÓN DE LA ATMÓSFERA)

	z = 11 Km	z = 20 Km	z = 32 Km	z = 47 Km	
P _{ATM}	22632	5475	868	111	(Pa)
P(z)	28598	10159	2556	455	(Pa)

$$\begin{aligned} T &= 288 \text{ K} \\ \beta &\approx 2,52 \times 10^{20} \text{ J}^{-1} \\ m &\approx 4,65 \times 10^{-26} \text{ kg} \\ g &\approx 9,8 \text{ m/s}^2 \\ P(0) &\approx 101325 \text{ Pa} \end{aligned}$$

P_{ATM} = DATOS REALES DE LA ATMÓSFERA.