

Guía 4: Teoría Cinética

Nota: Los problemas se explican en forma esquemática adrede para que se realice una lectura crítica y de elaboración personal. Sin embargo, si encuentra uno o varios errores por favor escriban a carlosv@df.uba.ar, gracias. Carlos Vigh

Problema 6: Un sistema está compuesto por N partículas. La energía de cada partícula depende de n coordenadas q_i y se escribe como $E = \sum_i c_i q_i^2$. Considerando que la función de distribución es la de Maxwell-Boltzmann, $F_{MB} = Ae^{-\beta E(q_1, q_2, \dots, q_n)}$, hallar:

1. La constante A
2. La energía promedio por partícula

Solución:

1-

$$F_{MB}(q_1, q_2, \dots, q_n) = Ae^{-\beta E(q_1, q_2, \dots, q_n)} \quad (1)$$

$$\text{con } E(q_1, q_2, \dots, q_n) = \sum_{i=1}^n c_i q_i^2$$

Se integra sabiendo que da 1:

$$\int \int \dots \int F_{MB}(q_1, q_2, \dots, q_n) dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1 \quad (2)$$

$$\int \int \dots \int Ae^{-\beta E(q_1, q_2, \dots, q_n)} dq_1 dq_2 \dots dq_n = A \prod_{i=1}^n \left(\frac{\pi}{\beta c_i} \right)^{1/2} = 1 \quad (3)$$

De modo que A es:

$$A = \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{n/2} \prod_{i=1}^n c_i^{1/2} \quad (4)$$

2- calculo de la energía:

$$\langle E \rangle = \int \int \dots \int E(q_1, \dots, q_n) F_{MB}(q_1, \dots, q_n) dq_1 \dots dq_n = \int \int \dots \int \sum_{i=1}^n \beta c_i q_i^2 Ae^{\sum_{i=1}^n c_i q_i^2} dq_1 \dots dq_n \quad (5)$$

$$\langle E \rangle = A \sum_{i=1}^n c_i \int \int \dots \int q_i^2 \prod_{i=1}^n e^{-\beta c_i q_i^2} dq_1 \dots dq_n \quad (6)$$

Cada término de la productoria solo es afectado por una de las integrales, la que corresponde a esa variable q_i . Del resto de las integrales se extrae ese término como se extrae cualquier constante. Entonces la integral múltiple es separable en n integrales simples:

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^n c_i A_i \int_{-\infty}^{\infty} q_i^2 e^{-\beta c_i q_i^2} dq_i = \sum_{i=1}^n c_i 2I_2(q_i) A_i \quad (7)$$

$$\text{sabíamos que } I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} q_i^2 e^{-\gamma q_i^2} dq_i = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \gamma^{-3/2}$$

Entonces:

$$\langle E \rangle = 2 \sum_{i=1}^n c_i \left(\frac{\sqrt{\pi}}{4} \right) (\beta c_i)^{-3/2} A_i \quad (8)$$

$$\langle E \rangle = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) \beta^{-3/2} \sum_{i=1}^n c_i^{1/2} A_i \quad (9)$$

Si se reemplaza el valor de A_i

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2\beta} \sum_{i=1}^n 1 = \frac{n}{2\beta} = \frac{nkT}{2} \quad (10)$$

Esto se podría haber obtenido facilmente aplicando el teorema de equipartición:

n términos cuadráticos de energía aportan $\frac{nkT}{2}$ a la energía media si no están vinculados.