

1. Teorema de equipartición

Para la demostración, ver la clase.

En el caso de $E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m$, tenemos

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{p_y^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{p_z^2}{2m} \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

En el segundo caso, tenemos

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} k x^2 \right\rangle = k_B T$$

2. Experimento de Kapler

La función de partición es

$$Z = \frac{1}{h} \int dp_\varphi d\varphi e^{-\beta \left(\frac{p_\varphi^2}{2I} + \frac{1}{2} C \varphi^2 \right)} = \frac{k_B T}{h} \sqrt{\frac{I}{C}}$$

Lo que implica

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = k_B T$$

y

$$\langle \varphi^2 \rangle = \frac{\int dp_\varphi d\varphi \varphi^2 e^{-\beta \left(\frac{p_\varphi^2}{2I} + \frac{1}{2} C \varphi^2 \right)}}{\int dp_\varphi d\varphi e^{-\beta \left(\frac{p_\varphi^2}{2I} + \frac{1}{2} C \varphi^2 \right)}} = -\frac{2}{\beta} \frac{\partial_C Z}{Z} = -\frac{2}{\beta} \partial_C \log Z = \frac{k_B T}{C}$$

De forma similar, usando el teorema de equipartición, tenemos

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p_\varphi^2}{2I} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} C \varphi^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T + \frac{1}{2} k_B T = k_B T$$

y

$$\left\langle \frac{1}{2} C \varphi^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T = k_B T$$

lo que implica

$$\langle \varphi^2 \rangle = \frac{k_B T}{C}$$

El análisis de las fluctuaciones angulares da $\langle \varphi^2 \rangle = 4.178 \cdot 10^{-6} \text{ rad}^2$ con $C = 9.428 \cdot 10^{-9} \text{ g.cm}^2.\text{s}^{-2}$ a una temperatura de $T = 287.1 \text{ K}$. Lo que implica

$$k_B = 1.372 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

lo que es suficientemente cercano a $k_B = 1.380 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$.

3. Densidad de estado de los fonones

La ecuación de movimiento es

$$m\ddot{u}_n + \lambda(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) = 0$$

En el limite continuo, si llamamos $u_n = f(x)$, tenemos

$$u_{n+1} = f(x+a) \simeq f(x) + af'(x) + \frac{a^2}{2}f''(x)$$

$$u_{n-1} = f(x-a) \simeq f(x) - af'(x) + \frac{a^2}{2}f''(x)$$

lo que implica

$$2u_n - u_{n-1} - u_{n+1} = a^2 f''(x)$$

y por lo tanto

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \frac{\lambda a^2}{m} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0$$

lo que nos permite identificar la velocidad de propagación $c_s = a\sqrt{\frac{\lambda}{m}}$.

Buscamos soluciones de la ecuación para u_n de la forma de ondas planas $u_n = Ae^{i\omega t - ikna}$

$$\begin{aligned} -m\omega^2 &= -\lambda \underbrace{(2 - e^{ika} - e^{-ika})}_{2 - 2\cos ka} = -2\lambda(1 - \cos ka) \\ &= -4\lambda \sin^2 \frac{ka}{2} \Leftrightarrow \omega(k) = 2\sqrt{\frac{\lambda}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \end{aligned}$$

Consideramos condiciones periódicas $u_{n+N} = u_n$ (cadena cerrada)

$$\Rightarrow e^{ikNa} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{Na} \cdot l \quad l \in \mathbb{Z}$$

Pero como Na es el tamaño de la cadena (L)

$$\Rightarrow k = \frac{2\pi}{L} \cdot l \quad l \in \mathbb{Z}$$

Para $k \ll 1$; $\omega \simeq \sqrt{\frac{\lambda}{m}} \cdot ak \equiv c_s \cdot k$

Podemos ahora calcular la densidad de estados $\rho(\omega)$

En 3D, tenemos $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(l_x \vec{e}_x + l_y \vec{e}_y + l_z \vec{e}_z)$, por lo tanto

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_{\vec{l}} &\simeq \int d^3l = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{V4\pi}{(2\pi)^3} \int k^2 dk \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \frac{1}{c_s^3} \int \omega^2 d\omega \\ &= \int \rho(\omega) d\omega \\ \Rightarrow \rho(\omega) &= \frac{V}{2\pi^2 c_s^3} \omega^2 \end{aligned}$$

En realidad, las oscilaciones son de 3 formas distintas, una oscilación transversa (misma dirección que \vec{k}) y 2 longitudinales (ortogonales a \vec{k}) con velocidades c_t y c_l , lo que implica

$$\rho(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \omega^2 \quad \text{con} \quad \frac{3}{c^3} \equiv \frac{2}{c_t^3} + \frac{1}{c_l^3}$$

Lo que nos reproduce el resultado usado por Debye.