

El Teorema de Equipartición Generalizado en un Gas de Electrones con Alta Temperatura

G. Ares de Parga¹, E. Salinas-Hernández²

¹Departamento de Física, ESFM-Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México

²Departamento de Formación Básica, ESCOM-IPN, Ciudad de México, México

Teléfono (55) 5729-6000 Ext. 55017 Fax (55) 5729-55015 E-mail: garesdepargaa@ipn.mx

Resumen — Se realiza un análisis del teorema de equipartición mostrando algunos de los diferentes casos en los que se puede aplicar exactamente o con cierto grado de aproximación. Sin embargo, el teorema de equipartición generalizado, aunque más complicado, se puede utilizar en ciertas circunstancias más físicas. En particular, se aplicará en el caso de un gas de electrones con altas temperaturas no relativista considerando la interacción coulúmbica.

Palabras Clave – Teorema de equipartición, plasma, alta temperatura

Abstract — An analysis of the equipartition theorem is carried out, showing some of the different cases in which it can be applied exactly or with a certain degree of approximation. However, the generalized equipartition theorem, although more complicated, can be used in certain more physical circumstances. In particular, it will be applied in the case of a non-relativistic electron gas with high temperature considering the coulombic interaction.

Keywords — Equipartition theorem, plasma, high temperature

I. INTRODUCCIÓN

El teorema de equipartición de la energía en física estadística se utiliza normalmente en el caso en que no exista interacción entre las partículas o la interacción se considere solamente como choques entre partículas consideradas como esferas rígidas [1]. Sin embargo, cuando existe una interacción externa o una interacción interna, que puede ser descrita por el mismo potencial, se puede utilizar bajo ciertas circunstancias [2], [3]. En efecto, para ciertos tipos de potenciales como en el caso del potencial armónico, $U = ax^2$, el teorema de equipartición es válido dando como resultado un factor más de $(N/2)kT$ por cada grado de libertad N con respecto a la contribución del potencial. Para un potencial $U = ax^2 + bx$, el factor $(N/2)kT$ puede ser sustituido por $(N/2)kT + Nb^2/4a$ y como el último término es una constante se puede eliminar dando lugar al mismo resultado que en el caso del oscilador armónico. Por otro lado para ciertos potenciales más complicados a bajas temperaturas, se obtiene el mismo factor y para altas temperaturas (caso no relativista)

se obtiene un factor $(N/4)kT$. También se puede a partir de un potencial general U que tiene un mínimo en un punto, realizar un desarrollo en serie en tal punto y obtener un resultado parecido al del oscilador armónico. Sin embargo, en todos estos casos se obtiene un resultado que valida el teorema de equipartición de la energía, pero con potenciales externos o ficticios físicamente [4], [5]. Cuando se considera un sistema con potenciales debido a interacciones internas que representan sistemas de mayor interés físico, se debe utilizar el teorema generalizado de equipartición. Considerando un gas de electrones con alta temperatura (para despreciar los efectos cuánticos), pero no relativista, el teorema generalizado de equipartición da resultados muy interesantes. Se considera que los electrones interactúan entre ellos bajo la fuerza de Coulomb y podremos obtener el valor de la energía con respecto a la temperatura. El teorema de equipartición generalizado nos indicará que no existe un gas clásico de electrones en equilibrio.

El trabajo se desarrolla de la siguiente manera: en la segunda sección se hará una breve exposición de ciertos resultados relacionados con el teorema de equipartición para ciertos potenciales; en la tercera sección, se expondrá el teorema de equipartición generalizado. En la cuarta sección, se utilizará el teorema de equipartición generalizado al caso del gas de electrones con alta temperatura no relativista obteniendo una energía negativa que dará una capacidad calorífica negativa. Lo cual implica que no puede existir un gas clásico de electrones en equilibrio. En la sección V, se analiza el resultado y se hace una comparativa con el caso de un plasma.

II. APLICABILIDAD DEL TEOREMA DE EQUIPARTICIÓN

Estudiemos primero el caso de un potencial sencillo y su relación con el teorema de equipartición y luego analicemos potenciales más complicados.

A. $U = ax^2 + b$

Como la contribución de la energía cinética a la energía interna del sistema, si el potencial no depende de las velocidades, es siempre $(N/2)kT$ donde N representa al número de grados de libertad, sólo nos preocuparemos por la contribución a la energía interna del potencial por grado de libertad y por ello para el caso sencillo en que $U = ax^2$ sólo debemos calcular

$$\bar{E}_U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (1)$$

donde

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta U} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta ax^2} dx = \frac{\text{const}}{\sqrt{\beta}}. \quad (2)$$

Por lo que se obtiene

$$\bar{E}_U = \frac{kT}{2}, \quad (3)$$

que representa un resultado muy bien conocido. En el caso en que $U = ax^2 + bx$ (ver Fig. 1), se tiene

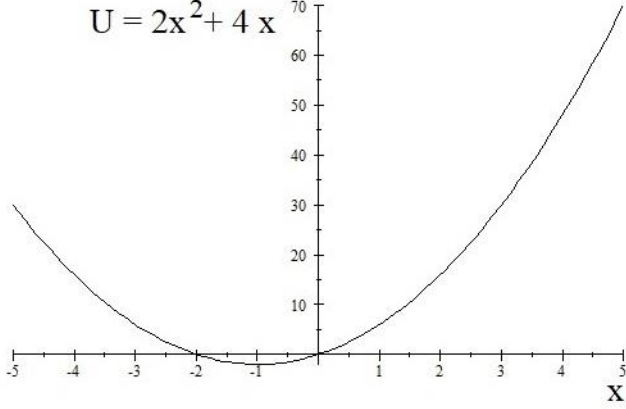


Figura 1. Potencial $U = 2x^2 + 4x$

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta U} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta ax^2 + bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta a}} e^{-\frac{\beta b^2}{4a}}. \quad (4)$$

Lo cual implica que

$$\bar{E}_U = \frac{kT}{2} + \frac{b^2}{4a}. \quad (5)$$

Como $b^2/4a^2$ es una constante, se puede eliminar y el teorema de la equipartición de la energía es válido.

B. $U = ax^2 + b/x^2$

Este caso es muy interesante pues no se obtiene el resultado regular del teorema de equipartición. En efecto, tenemos que

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta U} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta ax^2 + b/x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta a}} e^{-2\beta\sqrt{ab}}. \quad (6)$$

Lo cual sólo en el caso en que

$$T \gg \frac{2\sqrt{ab}}{k}, \quad (7)$$

se tiene

$$Z = \frac{\text{const}}{\sqrt{\beta}}, \quad (8)$$

que da el mismo resultado que en el caso simple del oscilador armónico y por lo tanto $kT/2$ para cada grado de libertad. Sin embargo, en para $T \ll 2(ab)^{1/2}k^{-1}$ no se cumple el teorema de equipartición. Es decir, sólo se cumple el teorema de equipartición si la temperatura es suficientemente grande.

C. $U = ax^2 + bx^4$

Lo interesante en este caso es que para bajas temperaturas se cumple el teorema de equipartición, pero para

temperaturas altas se cumple con un factor de $1/2$. Es decir, para

$$T \ll \frac{a^2}{8b} \Rightarrow \bar{E}_U = \frac{kT}{2}, \quad (9)$$

y para temperaturas altas

$$T \gg \frac{a^2}{8b} \Rightarrow \bar{E}_U = \frac{kT}{4}. \quad (10)$$

En este caso el teorema de equipartición no se cumple para temperaturas suficientemente altas. Nótese que se pueden calcular las capacidades caloríficas en forma sencilla; es decir:

$$T \ll \frac{a^2}{8b} \Rightarrow C_V = \frac{3Nk}{2}, \quad (11)$$

y

$$T \gg \frac{a^2}{8b} \Rightarrow C_V = \frac{3Nk}{4}. \quad (12)$$

D. U con un mínimo

Un caso más general es cuando tenemos un potencial que posee un valor mínimo en x_0 . En este caso se puede realizar una expansión alrededor del punto mínimo y utilizando el método del punto de silla se puede obtener para bajas temperaturas que

$$Z \approx \frac{\text{const}}{\sqrt{\beta}} e^{-\beta|U(x_0)|}, \quad (13)$$

que corresponderá a

$$\bar{E}_U = \frac{kT}{2} + |U(x_0)|, \quad (14)$$

Lo que implica que en el punto de equilibrio y a temperaturas bajas se cumple el teorema de equipartición pues la constante $|U(x_0)|$ no afecta y se puede eliminar como se hizo anteriormente.

Sin embargo, no se ha analizado el caso de interacción entre las partículas pues sólo se han tratado los casos en que tenemos potenciales externos. La razón es muy simple pues la gran problemática se presenta al momento de realizar la integración en varias dimensiones con una interacción entre las partículas. Es decir:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta U(x_1, \dots, x_{3N})} d^{3N}x. \quad (15)$$

III. EL TEOREMA DE EQUIPARTICIÓN GENERALIZADO

El teorema de equipartición generalizado se expresa de la siguiente manera [1]: para cualesquiera de las variables canónicas $x_i = q_i$ o $x_i = p_i$ de un Hamiltoniano $H(q, p)$, se tiene

$$\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \rangle = \delta_{ij} kT. \quad (16)$$

En particular cuando se utilizan los mismos índices para cada una de las variables canónicas (sin sumar), se tiene

$$\langle q_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \rangle = kT, \quad (17)$$

y

$$\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \rangle = kT. \quad (18)$$

Apliquemos esto último al sencillo caso en que cada una de las partículas está ligada a un punto de oscilación por medio de un potencial armónico; es decir:

$$H = \sum_{i=0}^{3N} (A_i P_i^2 + B_i Q_i^2). \quad (19)$$

Luego,

$$\sum_i^{3N} P_i \frac{\partial H}{\partial P_i} + Q_i \frac{\partial H}{\partial Q_i} = 2H. \quad (20)$$

Tenemos entonces

$$\langle H \rangle = \frac{3N}{2} kT + \frac{3N}{2} kT = 3NkT. \quad (21)$$

Como era de esperarse. El punto aquí es que no realizamos ninguna integración y esperemos poderlo aplicar a un sistema de cargas interactuando entre ellas por medio de un potencial coulombico.

IV. GAS DE ELECTRONES A ALTAS TEMPERATURAS

Consideremos un gas de electrones a una temperatura suficientemente grande para poder analizar el gas en forma clásica. Como veremos después no corresponderá a un plasma con una temperatura alta en donde se considera al conjunto de electrones como un gas ideal [6]. Notemos también que, con esta temperatura, los efectos relativistas son despreciables. Luego tenemos un gas clásico en equilibrio no relativista de electrones cuya interacción entre ellos es la coulombica y por lo tanto no se debe considerar ningún tipo de apantallamiento [7]. Finalmente, el potencial se puede expresar como

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (22)$$

donde \mathbf{r}_i , e representan a la posición del i -ésimo electrón y a la carga del electrón, respectivamente. La suma se realiza sobre todos los i y j distintos. Notemos que tenemos $3N$ grados de libertad. Sabemos que $\mathbf{P}_i = m\mathbf{v}_i$ y, por lo tanto,

$$\mathbf{P}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i} = 2\mathbf{P}_i^2, \quad (23)$$

y

$$\langle \mathbf{P}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i} \rangle = 3kT. \quad (24)$$

Para las posiciones, se tiene

$$\mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} = - \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{((\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2)^{3/2}} \mathbf{r}_i \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (25)$$

donde sólo se suma en j . Por lo que

$$\sum_i \mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} = - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{((\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2)^{3/2}} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2, \quad (26)$$

donde se suma en todas las i y j distintas. Tenemos que

$$\sum_i \mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} = - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (27)$$

donde se suma sobre todos los índices i y j distintos. Luego podemos expresar el Hamiltoniano como

$$2H = \sum_i^N \mathbf{P}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i} - 2\mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}. \quad (28)$$

Es decir:

$$\langle 2H \rangle = \langle \sum_i^N \mathbf{P}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i} - 2\mathbf{r}_i \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \rangle. \quad (29)$$

Usando a 17 y 18 en 29, llegamos a

$$\langle 2H \rangle = 3NkT - 6NkT. \quad (30)$$

Se llega a

$$\langle H \rangle = - \frac{3}{2} NkT. \quad (31)$$

Finalmente se puede calcular la capacidad calorífica de un gas clásico de electrones con una temperatura alta y es

$$C_V = - \frac{3}{2} Nk. \quad (32)$$

Lo cual demuestra que no existe un gas clásico de electrones en equilibrio termodinámico pues una capacidad calorífica negativa contradice a la segunda ley de la termodinámica.

V. CONCLUSIONES

Se mostró que, utilizando a la función de partición para ciertas interacciones, se obtienen los mismos resultados que da el teorema de equipartición en el caso del oscilador armónico. Sin embargo, se mostró la dificultad para obtener el promedio del potencial debido a la dificultad en general que aparece en la integral de la función de partición. El teorema de equipartición generalizado nos permitió evitar la integral y dio un resultado muy interesante descrito en las ecuaciones 31 y 32. La conclusión es que no existe un gas clásico de electrones en equilibrio pues el hecho de que la capacidad calorífica sea negativa implica una violación de la segunda ley de la termodinámica.

Hay que resaltar que un gas clásico de electrones no se puede comparar con una de las especies de un plasma a altas temperaturas como se podría pensar. En efecto, Balescu [8] dice lo siguiente: debe enfatizarse en este punto que la identificación de la energía interna (de cada especie) con la cantidad $n_\alpha \varepsilon_\alpha$ definida por

$$n_\alpha \varepsilon_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha \int d^3 v |v - u^\alpha(x, t)|^2 f^\alpha(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t), \quad (34)$$

donde n_α , ε_α , m_α , u^α y f^α representan a la densidad de partículas, a la energía por unidad de partícula, a la masa, a la velocidad de la especie y a la función de distribución de la especie α , respectivamente, presupone que la energía potencial promedio debida a las fuerzas de interacción entre las partículas es despreciable en comparación con su energía cinética. En este caso, el plasma se comporta termodinámicamente como un sistema ideal. Esta suposición se justifica para plasmas quiescentes de baja densidad y/o alta temperatura, es decir, cuando se cumple la condición de acoplamiento débil descrita por

$$\mu_p = \left(\frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 n_i \right)^{-2/3} \ll 1. \quad (35)$$

En efecto, la sección de dispersión está relacionada con el llamada logaritmo de Coulomb $\ln \Lambda$ definido por

$$\ln \Lambda = \ln \frac{b_{max}}{b_{min}}, \quad (36)$$

donde b_{max} representa a la longitud de Debye [9] que toma en cuenta el apantallamiento que realizan los electrones sobre los iones y b_{min} que se toma como la longitud de acercamiento más cercano o la longitud de De Broglie. Por otro lado, se relaciona la sección de dispersión con el tiempo de colisión [1]; es decir:

$$\tau = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{n \sigma_{tot} v}, \quad (37)$$

donde σ_{tot} representa la sección de dispersión y v es la velocidad térmica. Se calculan los tiempos de colisión entre electrones con electrones, entre iones y electrones y entre iones con iones, y tenemos:

$$\tau_{ee} = \frac{12\sqrt{2}\epsilon_0^2 m_e^{1/2} T^{3/2}}{\ln\Lambda e^4 n_e}, \quad (38)$$

$$\tau_{ei} = \tau_{ie} = \frac{6\sqrt{2}\epsilon_0^2 m_e^{1/2} T^{3/2}}{\ln\Lambda e^4 n_e}, \quad (39)$$

$$\tau_{ii} = \frac{12\sqrt{2}\pi^{3/2}\epsilon_0^2 m_i^{1/2} T^{3/2}}{\ln\Lambda e^4 n_i}. \quad (40)$$

El logaritmo de Coulomb es [10]

$$\ln\Lambda = 25.3 - 1.15\ln n + 2.3\ln T_e \text{ para } T_e > 50 \text{ eV.} \quad (41)$$

Un análisis demuestra que efectivamente para temperaturas mayores de 50 eV, la especie conformada por los electrones se comporta como un gas ideal pero la interacción está reducida a choques descritos por una sección transversal que equivale a esferas rígidas con un radio a . Aunque el tiempo de choque de iones con iones es muy grande, y por lo tanto los electrones ven a los iones estáticos. Como los tiempos de colisión tanto entre electrones y electrones como de electrones con iones es pequeño, la interacción de los electrones con la especie formada por los iones existe, pero considerada como choques entre esferas rígidas y por lo tanto como un gas ideal. Por ello el gas de electrones a temperaturas altas es muy distinto a la especie de electrones en un plasma.

REFERENCIAS

- [1] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New York) ch 7, pp. 149–151, 1963.
- [2] E. W. Bormashenko and O Gendelman, "On the applicability of the equipartition theorem," *Thermal Science*, vol 14, no. 3 pp. 855–858, 2010.
- [3] R. Baierlein, *Thermal Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, UK) 2003.
- [4] Martínez, S., *et al.*, "On the Equipartition and virial Theorems," *Physica A*, 305, 1-2, pp. 48-51, 2022.
- [5] A. R. Plastino and J. A. S. Lima, "Equipartition and Virial Theorems within General Thermostatistical Formalisms," *Physics Letters A*, 260, 1999.
- [6] T. S.I. Braginskii, "Transport processes in a plasma," edited by MA Leontovich, *Rev. Plasma Phys.* 1, 205, 1963.
- [7] J. F. García-Camacho, G. Ares de Parga, Karen Arango-Reyes, E. Salinas-Hernández and S. Domínguez-Hernández, "Modification of the Electron Entropy Production in a Plasma," *Entropy*, 22, 935, 2020.
- [8] R. Balescu, *Transport Processes in Plasmas* (North-Holland, New York) pp 137, 1988.
- [9] F. Fitzpatrick, *Plasma Physics An Introduction* (Taylor and Francis Group), 2015.
- [10] F. L. Hilton and R. D. Hazeltine, *Reviews of Modern Physics*, 48, 2, Part I, 1976