Mecánica Estadística II - Curso 2016
Práctica 3: Sistemas interactuantes clásicos. La importancia de las funciones de correlación.

1 Preguntas previas.

1. Para un gas ideal fue sencillo derivar la distribución de velocidades de Maxwell. Explique si espera que ese resultado se mantenga para un gas interactuante, para un líquido o para un sólido con vibraciones clásicas.
2. ¿Qué mide la densidad de una y de dos partículas $\rho_1(r)$ y $\rho_2(r_1, r_2)$?. ¿En qué casos $\rho_2(r_1, r_2) = \rho_2(r_1 - r_2)$? Puede ocurrir para un fluido encerrado en un recipiente?. ¿Se cumple lo anterior para un sólido?
3. Debido a la gravedad: cómo depende la densidad de partículas de un gas ideal de masa m con la altura h?
4. Qué forma tiene generalmente el potencial de interacción entre dos partículas (suponga que no hay grados de libertad internos)?. ¿Existe una T tal que $v(r) << k_B T$ para todo r?. ¿Cómo se retoma el límite del gas ideal? Sugiera un buen parámetro adimensional en términos del cual hacer un desarrollo.
5. Aún para el caso muy diluido: ¿cómo espera que sea $\rho_2(r)$ para r pequeña?
6. Dibuje a mano alzada lo que imagina que obtendría para $\rho_2(r)$ para el caso de un líquido, un vidrio, un sólido cristalino, una nanopartícula.
7. Explique qué significa, para un material paramagnético, que un campo sea intenso, o que una temperatura sea baja.
8. En un paramagneto perfecto no hay correlaciones espaciales entre partículas, a ninguna temperatura y para ningún valor de campo aplicado. ¿Cuánto espera que valga la función de correlación? Cuánto vale $< \sigma_i \sigma_j >$ (sin importar la distancia entre r_i y r_j) a baja T para un campo aplicado B intenso? Explique qué mide la función de correlación conectada.
9. De una análogo de lo anterior para un fluido de partículas, utilizando la densidad local en lugar de spines. Notará que en ese caso no hace falta aplicar un campo externo.
10. Explique por qué el modelo de Ising sin campo aplicado es un modelo intrínsecamente clásico. ¿Que ocurrirá si aplicamos un campo en la dirección de cuantificación de los spines? Qué ocurre si lo hacemos en una dirección perpendicular a esta?

2 Problemas.

Límite clásico: Consideremos un sistema clásico de N partículas. En mécanica clásica el estado del sistema queda definido por el conjunto de coordenadas generalizadas e impulsos generalizados: $\{q^{3N}, p^{3N}\}$ ($q^{3N} \equiv \{q1...q3N\}$, y análogamente p^{3N}) que definen los estados microscópicos o microestados. Se define la función densidad de probabilidad $D_N(q^{3N}, p^{3N})$ tal que la probabilidad de encontrar al sistema en un vol. $d\tau_N$ en torno al punto $\{q^{3N}, p^{3N}\}$ del espacio de fases está dada por

$$D_N(q^{3N}, p^{3N}) d\tau_N$$

.

1. Para un sistema de N partículas idénticas, se definen las distribuciones reducidas de $n < N$ partículas mediante
$$f_n(\mathbf{r}^n, \mathbf{p}^n, t) = \frac{1}{h^{3n}} \int d\tau_{N-n} D_N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, t)$$
   (a) Defina la función densidad en términos de deltas de Dirac $\rho(r) = \sum \delta(r - r_i)$ y muestre que esa definición coincide con la de densidad de una partícula, y que la correlación de pares lo hace con $\langle \rho(r_1)\rho(r_2)\rangle$.
   (b) ¿qué sucede en el caso de un sistema homogéneo? ¿qué sucede si además es isotrópico?.
   (c) Calcular $\rho_1(\vec{r})$ para el caso de un gas ideal en un campo gravitatorio externo.
   (d) Suponiendo una atmósfera isotérmica: ¿hasta que altura se podría sobrevivir suponiendo que el cuerpo se puede adaptar hasta una presión de 380mbar?.
   (e) Dado un gas clásico interactuante con Hamiltoniano dado por
$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j}^{N} v(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$$
   Calcular $\langle H \rangle = U$ en función de $\rho_1(\vec{r})$ y $\rho_2(\vec{r}, \vec{r}')$.

2. Considere un sistema con Hamiltoniano
$$H = K + \sum_{i<j} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$
.

   a- Pese a que las interacciones siempre están presentes en un sistema de partículas, bajo ciertas condiciones puede recuperarse la función de partición canónica del gas ideal. ¿Qué suposiciones hay que hacer para poder llegar al resultado conocido?

   b- Suponiendo que rigen las mismas condiciones que para el item anterior, evaluar $\rho_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Muestre que en ese límite $\rho_2 \approx e^{-\beta v(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)}$. Graficar. Luego recuperaremos ese mismo resultado (más completo) utilizando el desarrollo virial.

3. La sección eficaz diferencial de scattering por unidad de águlo sólido, asociada a una transición cuántica de una onda plana que es dispersada por partíclas en un retículo viene dada por
$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} \sim |U_\alpha(q)|^2\, I(\mathbf{q}).$$
   $U_\alpha(\mathbf{q})$ es el factor de forma atómico o la transformada de Fourier del potencial atómico, con $\hbar\mathbf{r}$ es el momento transferido de la partícula dispersada a la muestra. La función $I(\mathbf{q})$ esel factor de estructura definido por
$$I(\mathbf{q}) = \langle \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \rangle.$$
   Dicha función depende únicamente de las posiciones de los átomos del medio y no de la naturaleza de las interacciones.

   (a) Muestre qu $I(\mathbf{q})$ es la transformada de Fourier de la correlación de dos puntos $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.
   (b) Definiendo la función de distribución $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ de pares dada por
$$\langle \rho(\mathbf{r}_1)\rangle g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \langle \rho(\mathbf{r}_2)\rangle \equiv \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_i)\, \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_j),$$
   en un sistema homogéneo, muestre que el factor de estructura $I(\mathbf{q})$ y $g(\mathbf{r})$ está dado por
$$I(\mathbf{q}) \propto \langle \rho \rangle \left[1 + \langle \rho \rangle \int g(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^d r \right]$$

4. Considere el *modelo de Ising,* un sistema de espines clásicos en un retículo d-dimensional descripto por el hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle r_i, r_j \rangle} \sigma(r_i)\sigma(r_j), \qquad \sigma(r) = \pm 1, \tag{1}$$

donde r_i indica uno de los vectores que describen la posición de los sitios del retículo, y $\langle r_i r_j \rangle$ significa que la suma es sobre los pares de sitios que son primeros vecinos.

   (a) Muestre que el valor medio de la magnetización, calculado con peso de Boltzmann, es

$$m(T) = \frac{1}{N} \sum_{r_i} \langle \sigma(r_i) \rangle = 0 \qquad \forall T. \tag{2}$$

   El modelo de Ising en $d > 1$ es muy utilizado para entender, a nivel cualitativo, el comportamiento de sistemas ferromagnéticos, es decir sistemas que desarrollan una magnetización espontánea para temperaturas menores que una temperatura crítica T_c (la temperatura de Curie). ¿Le resulta esto extraño, en vista del resultado (2)?

5. Dada la función de correlación spin-spin

$$\langle \sigma_{r_i} \sigma_{r_j} \rangle$$

.

   (a) Para un matetrial ferromagnético a una temperatura T menor que la temperatura crítica T_c, ¿Cómo espera que se comporte la función de correlación en el lim. $|r_1 - r_2| \to \infty$? ¿por qué? ¿y para temperaturas mayores que la crítica?

   (b) ¿Qué indicador utilizaría para detectar la aparición de orden.?

Sistemas interactuantes: soluciones exactas

6. Considere un sistema de N esferas duras de diámetro D que se pueden mover en un anillo de circunferencia L, obedeciendo condiciones de contorno periódicas. El potencial de interacción de pares está dado por

$$w(r) = \begin{cases} \infty & \text{for} \quad r \leq D \\ 0 & \text{for} \quad r > D \end{cases}$$

   (a) Calcular la energía libre de Helmholtz y obtener las ecuaciones de estado del sistema.

   (b) Determine la función de correlación de pares suponiendo que una partícula está en el origen $x = 0$ y la otra a una distancia x.

   (c) Grafique la función re correlación para $n\,D = 0.25, 0.5$.

7. **Modelo de Ising en 1D**. Considere el modelo de Ising en un campo magnético externo con Hamiltoniano

$$H_N = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{1}{2} \mu\, B \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + \sigma_{i+1})$$

   (a) Escriba la función de partición del sistema.

   (b) Identificando cada t́ermino de la suma como elementos de una cierta matriz P, reescriba como la traza de los autovalores de P.

   (c) Determine la energía libre de Helmholtz, el calor específico y la magnetización. Determine la temperatura crítica para el cual a $T > T_c$ el sistema está ordenado, $M \neq 0$.