

Mecánica Estadística II - Curso 2016

Práctica 4: Sistemas interactuantes - Desarrollo del Virial

1 Preguntas Previas.

- ¿Qué forma tiene generalmente el potencial de interacción entre dos partículas?. Suponga que no hay grados de libertad internos. ¿Existe una T tal que $v(r) \ll k_B T$ para todo r ? ¿Cómo retomo el límite del gas ideal?. Sugiera un buen parámetro adimensional en términos del cual hacer un desarrollo perturbativo, y comente si espera que el mismo sea capaz de describir a la vez la fase gaseosa y la líquida.
- Escriba la ecuación de estado de van der Waals, y dibuje una isoterma p vs. v en la situación en la que la misma deja de ser monótona. Analizando cada término de la ecuación, y recordando el item anterior, identifique en el dibujo las siguientes regiones: i- domina la atracción entre partículas; ii- domina la repulsión entre partículas debido al carozo duro; iii- domina la energía cinética.
- ¿Qué condiciones tienen que cumplir las interacciones en un sistema para mostrar extensividad en el límite termodinámico? (Recuerde que hay condiciones tanto a distancias cortas como largas.).
- ¿Puede haber una transición gas-líquido si no hay atracción entre las partículas? Explique el rol de las interacciones repulsivas entre partículas en la estabilidad de un sistema. Además: ¿puede haber una transición de fase en un sistema de partículas en el que las interacciones son únicamente repulsivas? En caso afirmativo, de ejemplos.
- Utilizando isothermas de van der Waals, explique el fenómeno de sobreenfriamiento y qué sucede al alcanzar el sistema bruscamente el equilibrio.
- ¿Puede un sistema interactuante tener a todas las partículas condensadas en un estado con impulso definido? ¿Puede la totalidad de un líquido comportarse como un superfluido?
- Explique por qué decimos que un gas de esferas duras la temperatura no es un parámetro importante.
- Dado un sistema conformado por bosones: comente sobre algunas propiedades de la función de onda del estado fundamental que pueden conocerse a priori (por ejemplo: será real o compleja?) ¿Mencione dos de estas propiedades que permiten conectar a este sistema cuántico con otro clásico (el caso que vieron en la teoría fue un gas de esferas duras. ¿Cómo conectaría la matriz densidad de un gas de bosones con la correlación de pares de un gas de esferas duras? Explique que valor toma cada una de esas dos funciones en el límite de grandes separaciones.

2 Problemas.

[**Gases interactuantes**]. Consideremos un gas de N partículas idénticas cada una de masa m a una densidad $\rho = N/V$ y temperatura T . Para partículas interactuantes asumiremos que la energía potencial total U es suma de interacciones de dos cuerpos de la forma $u_{ij} = u(r_i - r_j)$, y escribiremos U de la forma

$$U = \sum_{i < j}^N u_{ij}$$

La forma exacta de $u(r)$ para moléculas y átomos puede ser construido mediante cálculos mecano-cuánticos de primeros principios. Tales cálculos son muy complicados, y para muchos propósitos es suficiente escoger

una forma fenomenológica para $u(r)$. Las características más importantes de $u(r)$ son la repulsión fuerte para valores pequeños de r y la débil atracción para valores grandes de r . Una aproximación usual semiclásica es la de Lennard-Jones (1924)

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

Una forma incluso más simple de interacción entre partículas es la interacción de *esferas duras*

$$u(r) = \begin{cases} \infty & (r < \sigma) \\ 0 & (r > \sigma) \end{cases}$$

Introduciendo la función de Meyer $f_{ij} = e^{-\beta u_{ij}} - 1$ es posible reescribir la función de partición como suma de términos de diferentes ordenes involucrando clusters de n -partículas ($n=1, \dots, N$). Tal expansión es llamada *cluster expansion* desarrollada en la teoría. Utilizando tal desarrollo se puede obtener la ecuación de estado de un sistema de partículas interactuantes dada por

$$\frac{PV}{k_B T} = \sum_{l=1}^{\infty} \tilde{b}_l(T) \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^{l-1}$$

con $\tilde{b}_1(T) = 1$ y $v = V/N$.

1. Utilizando una aproximación del potencial

$$u(r) = \begin{cases} \infty & (r < r_0) \\ -u_0 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 & (r > r_0) \end{cases}$$

a) Determine el segundo coeficiente del virial.

b) Determine la corrección de primer orden a la ecuación de estado del gas ideal y obtenga la ecuación de estado de van der Waals. Determine los coeficientes a, b de la ecuación en términos de r_0, u_0 .

2. Interacción atractiva vs repulsiva: Volviendo a la cuestión planteada al comienzo de la práctica (pregunta previa (b)).

a) Escriba la expansión del virial para la ecuación de estado considerando únicamente los dos primeros términos. Identifique dos regiones de la integral: una que tiende a incrementar la presión y otra que la baja. Encuentre la condición exacta en la que ninguno de estos comportamientos domina. [Ayuda: Escriba el segundo coeficiente del virial \tilde{b}_2 como una integral en d^3r .]

3. En la teoría se resolvió el modelo de Ising en $D = 1$ realizando el cambio de variables $\{\sigma_i\} \rightarrow \{\tau_i\}$, donde $\tau_i = \sigma_i \sigma_{i+1}$ son nuevas coordenadas generalizadas, ahora independientes una de las otras.

a) ¿Por qué no se puede utilizar ese truco para resolver el modelo de Ising para cualquier dimensión? [Ayuda: para una dada configuración τ_i , intente escribir la conf. σ_i correspondiente; le recomendamos ser modesto: comience para $D=1$ y unos pocos spines, y luego vea que sucede al aumentar D .]

b) Explique cómo puede ser que pese a que los $\{\tau_i\}$ son independientes y que un valor fijo de τ_i no fija un dado spin ($\sigma_i = \pm 1$), la función de correlación de pares $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ lleva a una longitud de correlación infinita para $T \rightarrow 0$. [Ayuda: qué valor toman los τ_i cuando $T \rightarrow 0$? Dibuje la configuración de spines correspondiente.]

4. **Fracción condensada de un superfluido.** Sea un superfluido homogéneo a $T = 0$ con $|\Psi_0\rangle$ la función de onda del estado fundamental:

a) Determine la matriz densidad y la densidad de una partícula en términos de $|\Psi_0\rangle$.

b) Suponiendo que $|\Psi_0\rangle$ es constante en todo el espacio salvo cuando las partículas están a una distancia menor una cota a ($a \simeq 2.56\text{Å}$). Reescribir $|\Psi_0\rangle$ en términos de una función que cumpla estas propiedades y determine la expresión para la constante de normalización Z_N (N es el número de partículas).

c) Escriba la densidad de una partícula $\rho_1(\vec{r})$ y la correlación de dos partículas $\rho_2(\vec{r}, 0)$ y convéznase que el límite $r \rightarrow \infty$ $\rho_1(\vec{r}) = C \rho_2(\vec{r}, 0)$ con $C = \frac{N!}{(N+1)!} \frac{Z_{N+1}}{Z_N}$. Relacione C con la fracción condensada en el límite $r \rightarrow \infty$.

d) Finalmente determine C mediante la expansión del Virial para el problema de esferas duras en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ con $v = V/N$ fijo.