

TÓPICOS EN MECÁNICA ESTADÍSTICA

TAREA 2 : TEORÍA ESTADÍSTICA DE FLUIDOS SIMPLES EN EQUILIBRIO

Semestre 2018-2

Para entregar el martes 11 de septiembre de 2018.

En todos los ejercicios siguientes, $v(r)$ es el potencial de pares entre partículas, $g(r)$ la función de distribución radial, $h(r)$ la función de correlación total y $c(r)$ la función de correlación directa.

1. Calcule el tercer coeficiente del virial para un gas de esferas duras impenetrables de radio σ .
Indicación : gran parte del problema se reduce a calcular el volumen común de dos esferas de radio σ , separadas por una distancia r .
2. Muestre que la aproximación de Percus y Yevick (PY) lleva a una expansión de $y(r) = e^{\beta v(r)}g(r)$ en potencias de la densidad de la forma :

$$y(r) = 1 + \text{diagrama} + 2 \text{diagrama} + O(n^3) \quad (1)$$

Cada punto negro tiene un factor de densidad n .

3. Muestre que la aproximación hipercadena (HNC) lleva a una expansión de $y(r) = e^{\beta v(r)}g(r)$ en potencias de la densidad de la forma :

$$y(r) = 1 + \text{diagrama} + \frac{1}{2} \text{diagrama} + 2 \text{diagrama} + O(n^3) \quad (2)$$

Cada punto negro tiene factor de densidad n .

4. Considerar la aproximación de Percus-Yevick (PY) para esferas duras de diámetro σ . Mostrar que $c(r) = 0$ para $r > \sigma$ y que $g(r) = 0$ para $r < \sigma$. Deducir que la función $y(r) = e^{\beta v(r)}g(r)$ satisface

$$y(r) = -c(r) \quad \text{para } r < \sigma \quad (3)$$

$$y(r) = g(r) \quad \text{para } r > \sigma \quad (4)$$

y que es solución de la ecuación

$$y(r) = 1 + n \int_{r' < \sigma} y(r') d\mathbf{r}' - n \int_{\substack{r' < \sigma \\ |\mathbf{r}' - \mathbf{r}| > \sigma}} y(r')y(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}'. \quad (5)$$