Mecánica Estadística de no Equilibrio
Tarea 2 — Entrega 27 de marzo de 2025

Profesor: Rodrigo Soto
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

[P1] Fases hexáticas. Investigue sobre las fases hexáticas, indicando en qué consisten y cómo las correlaciones de orden orientacional y de posiciones a largas distancias caracterizan las distintas fases (líquida, hexática y sólida). Asociado a lo anterior, explique la teoría Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY) de la transición sólido–líquido en dos dimensiones.

[P2] Movimiento browniano con saltos continuos. Una variante del movimiento browniano usual consiste en tener una partícula que en cada paso de tiempo, separados por Δt, hace saltos en una dirección completamente aleatoria, con largos que tienen una distribución $p(\ell)$. Cada salto es independiente del anterior.

(a) Calcule el desplazamiento cuadrático medio al cabo de n saltos. El resultado va a depender de p.

(b) A partir de este resultado, obtenga el coeficiente de difusión D en función de la distribución p.

(c) Indique qué condiciones debe cumplir la distribución p para que D sea finito.

(d) Finalmente, calcule D si $p(\ell) = (1/L)e^{-\ell/L}$.

[P3] Solución numérica de la ecuación de Langevin. Se desea encontrar un método numérico que integre la ecuación de Langevin. Sea la ecuación

$$\dot{x} = f(x) + \xi(t)$$

donde $f(x)$ es cualquiera y ξ es un ruido blanco de correlación $\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \Gamma\delta(t-t')$. Se toman intervalos de tiempo dados por $t_n = nh$, donde h es el paso de tiempo. Integrando la ecuación anterior entre t_n y t_{n+1} se obtiene

$$x_{n+1} - x_n = \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(x(t))dt}_{I_{1,n}} + \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} \xi(t)dt}_{I_{2,n}}$$

que entrega una regla de interación para x_{n+1} si se pueden calcular las dos integrales. La integral I_1 se puede aproximar de diferentes formas, con mayor o menor precisión y estabilidad. Se consideran dos métodos:

Euler Se aproxima $f(x(t)) \approx f(x_n)$. Este método es explícito, pero puede ser inestable

Implícito Se aproxima $f(x(t)) \approx (f(x_n) + f(x_{n+1}))/2$. Este método es estable, pero requiere despejar x_{n+1} de la ecuación.

La integral I_2 es más delicada y se deben determinar sus propiedades.

(a) Argumenten por qué $I_{2,n}$ son variables estocásticas gaussianas.

(b) Determine las propiedades estadísticas de I_2. Es decir, calcule $\langle I_{2,n}\rangle$ e $\langle I_{2,n}I_{2,m}\rangle$.

(c) Muestre entonces que un método explícito para la ecuación es

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n) + \sqrt{\Gamma\Delta t}J_n$$

donde J_n son variables gaussianas independientes de promedio nulo y varianza 1.

[P4] Partículas activas brownianas. Un modelo para bacterias y otras partículas microscópicas autopropulsadas, es el de Partículas Activas Brownianas (ABP, por su sigla en inglés). En dos dimensiones, una ABP está caracterizada por su vector posición $\vec{r} = x\hat{\imath} + y\hat{\jmath}$ y el ángulo θ que indica su dirección de movimiento. La partícula se mueve a rapidez constante V, de manera que el vector posición evoluciona como

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = V\hat{n}(t) \tag{1}$$

donde $\hat{n} = \cos\theta\hat{\imath} + \sin\theta\hat{\jmath}$ es el vector unitario que apunta en la dirección de movimiento. Por otro lado, el ángulo θ evoluciona estocásticamente

$$\frac{d\theta}{dt} = \xi(t) \tag{2}$$

donde $\xi(t)$ es un ruido blanco gaussiano, de correlación $\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = 2D_r\delta(t-t')$. Acá, D_r es el coeficiente de difusión rotacional.

Se busca que calculen el MSD de una ABP. Para eso:

(a) Muestre que la función correlación de velocidades $C(t) \equiv \langle \vec{v}(t') \cdot \vec{v}(t+t')\rangle$ se puede escribir en términos de la función $G(t) \equiv \langle e^{i\Delta\theta(t)}\rangle$, donde $\Delta\theta(t) = \theta(t+t') - \theta(t') = \theta(t) - \theta(0)$. Queda entones calcular $G(t)$.

(b) Calcule el desplazamiento cuadrático medio del ángulo θ.

(c) Como θ es una variable gaussiana, encuentre una expresión para $\langle \Delta\theta(t)^n \rangle$, para n par y para n impar.

(d) Expanda en potencias la exponencial en $G(t)$ y use los resultados anteriores. Con esto obtenga $G(t)$ y $C(t)$.

(e) Integrando $C(t)$ obtenga el MSD de la partícula.

Puede ser útil revisar el material suplemenrario del artículo "Brownian Motion of an Ellipsoid", de Y. Han et al. Science **314**, 626 (2006).