a pono mal funa o toda la luja HOJA S-SISTEMAS DE PARTICULAS INTERACTUANTES

EJERCICIO 1. La función de partición para un gas clásico con N particulas de unisma masa un con interacción entre sus particulas dependeente solo de distancias entre dos pares de átomos se puede aproximar a

Z = 1/(211m) 3N/2 VN (1+ N2. I(B)) doude I(B) = 411 /00 drv2 (e Bu(r)-1)

siendo Ulr) la dependencia de la energia de interacción con la distancia entre dos partícules. Calcula la energia media del sistema y la presión media para el potencial de sutherland:

u(r)= \ -u\_0(\frac{r\_0}{r})^3 \quad \quad r> v\_0 \quad \quad

c'Relación de los resultados de la presión diferida con la ecuación de Van der Laals?

ENERGÍA MEDIA DEL SISTEMA

6

Por definición tenemos que (E) = - Dluz. Primero vamos a calcular la

integral I(B) para este potencial:

$$I(\beta) = 4\pi \int_{0}^{\infty} dr r^{2} (e^{\beta u(r)} - 1) = \left[4\pi \int_{0}^{\infty} dr r^{2} (e^{\beta u(r)} - 1) + 4\pi \int_{0}^{\infty} dr r^{2} (e^{\beta u(r)} - 1) \right] =$$

$$= \left[-4\pi \int_{0}^{r_{0}} dr r^{2} + 4\pi \int_{0}^{\infty} dr r^{2} \beta u_{0} (\frac{r_{0}}{r})^{S} \right] = -4\pi \cdot \frac{1}{3} r^{3} \int_{0}^{r_{0}} + 4\pi \int_{0}^{\infty} u_{0} r_{0}^{S} \int_{0}^{\infty} r^{2-S} dr =$$

TRUCO! EXPANSION EN SORIE pomesto suponemos

DE LA INTEGRAL: como ex-12 X, vamos a separar la integral en dos

$$= -\frac{4\pi}{3} k_0^3 + 4\pi \beta u_0 k_0^3 \frac{1}{3-5} k_0^3 - \frac{4}{3} \pi k_0^3 - 4\pi \beta u_0 k_0^3 \frac{1}{3-5}$$

suppriemos \$ >3 para que Se amle aundo r > +00

Sustituyendo en la expresión de 2 mos queda:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln^2 z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[ \ln \frac{\Lambda}{N!} \left( \frac{2\pi m}{h_0^2} \right)^{3N/2} V^N - \frac{3N}{2} \ln \beta + \ln \left( 1 + \frac{N^2}{2V} \cdot I(\beta) \right) \right] =$$

$$= + \frac{3N}{2} \cdot \frac{1}{\beta} + \frac{N_{2V}^{2} \cdot I'(\beta)}{1 + \frac{N^{2}}{2V}} \cdot \frac{3N}{2\beta} + \frac{N_{2V}^{2} \cdot I'(\beta)}{2\beta} = \frac{3N}{3N} + \frac{N^{2}}{2V} \cdot 4\pi uo vo^{3} \cdot \frac{1}{3 - \beta}$$

$$= + \frac{3N}{2} \cdot \frac{1}{\beta} + \frac{N_{2V}^{2} \cdot I'(\beta)}{1 + \frac{N^{2}}{2V} \cdot I'(\beta)} = \frac{3N}{2\beta} + \frac{N^{2}}{2V} \cdot \frac{4\pi uo vo^{3}}{3 - \beta} \cdot \frac{1}{3 - \beta}$$

$$= \frac{3N}{2\beta} + \frac{N^{2}}{2V} \frac{4\pi u_{0} r_{0}^{3}}{3} \cdot \frac{1}{3-5} = \frac{3}{2} NkT + \frac{N^{2}}{V} 2\pi u_{0} r_{0}^{3} \cdot \frac{1}{3-5} \\ \left[ 1 - \frac{N^{2}}{2V} \left( \frac{4\pi}{3} r_{0}^{3} + 4\pi \beta u_{0} r_{0}^{3} \cdot \frac{1}{3-5} \right) \right] \frac{3}{18 u_{0}} \cdot \frac{1}{8 u_{0}} = \frac{3}{2} NkT + \frac{N^{2}}{V} 2\pi u_{0} r_{0}^{3} \cdot \frac{1}{3-5}$$

ES EX CICIO Z. En la aproximación de compo medio la función de partición para un

REZACIÓN CON VAN DER WARLS

La cuación de Van Der Waals es una modificación a la ley de los gases ideales que se emplea para describir gases reales, puesto que tiene en menta la interacción entre partículas:

$$(P+\frac{a'}{\sqrt{2}})(V-b')=kT \Longrightarrow (P+\frac{u^2a}{V^2})(V-nb)=nRT$$

Veamos el resultado que hemos obtenido y estudiemos cómo relacionarlos:  $\langle P \rangle \equiv P = \frac{1}{\beta} \left[ \frac{N}{V} + \frac{N^2}{V^2} \cdot \frac{2\pi r_0^3}{3} \left( 1 + \beta u_0 \frac{3}{3-3} \right) \right] \Rightarrow vamos a definir <math>b = \frac{2\pi r_0^3}{3} y a = bu_0 \frac{3}{3-3}$ 

de forma que:

$$P = \frac{1}{\beta} \left[ \frac{N}{V} + \frac{N^2}{V^2} (b - \beta a) \right] \Rightarrow definings une uneva magnitud  $V = \frac{V}{N}$  llanada volumen específico donde  $N = \frac{1}{V}$$$

 $P = KT[n + n^{2}(b - \frac{1}{kT}a)] \rightarrow P + an^{2} = kT[n + n^{2}b] \Rightarrow$ 

Repite el cálculo para el potencial de esferas nígidas: u(r) = 0 si v> ro

· CALWO INTEGRAL

$$I(\beta) = 4\pi \int_{0}^{\infty} dv v^{2} (e^{-\beta u(v)} - 1) = 4\pi \int_{0}^{\infty} dr v^{2} (e^{-\beta u(v)} - 1) = 4\pi \int_{0}^{\infty} dr v^{2} (e^{-\beta u(v)} - 1) = 4\pi \int_{0}^{\infty} dr v^{2} = -\frac{4\pi}{3} v^{3} \Big|_{0}^{\infty} = -\frac$$

EMPROIA MEDIA (E) =  $-\frac{2 \ln z}{2 \beta} = \frac{3N}{2 \beta} + \frac{N^2/2 V \cdot I'(\beta)}{1 + N^2/2 V \cdot I'(\beta)} \approx \frac{3N}{2 \beta} + \frac{N^2}{2 V} \cdot O = \frac{3}{2} N K T$ 

· PRESIÓN HEDIA < P> = + 2 luz 1 = ... = 1 [N + N2 . (- I(β))] = 1 [N + N2 . 2π ν3] trismo problema con Van der Waals.

EXERCICIO 2. En la aproximación de compo medio la función de partición para un gas no-ideal de N particulas a T constante es:

a) Explica el significado de Vx y de (Ue).

Para ver el significado físico havemos el desarrollo desde cero:

$$z = \frac{1}{N! h^{3N}} \iint d^{3}r d^{3}p \in \beta(\frac{p^{2}}{2m} + ue(\vec{r}))^{N} = \frac{1}{N! h^{3N}} \left( \iint d^{3}r d^{3}p \in \beta(\frac{p^{2}}{2m} + e(\vec{r}))^{N} \right) = \frac{1}{N! h^{3N}} \left( \iint d^{3}r d^{3}p \in \beta(\frac{p^{2}}{2m} + e(\vec{r}))^{N} \right)$$

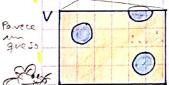
$$=\frac{1}{N! h^{3N}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}p e^{-\beta \frac{p^{2}}{2m}} \right)^{N} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}r e^{-\beta u e(r^{2})} \right) = \frac{1}{N! h^{3N}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}p e^{-\beta \frac{p^{2}}{2m}} \right)^{3N} \left( \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}r e^{-\beta u e(r^{2})} \right)$$
GAUSSIANA

$$=\frac{1}{N!h^{3N}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3N}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}d^3re^{\beta ll}e^{(\vec{r})}=\frac{1}{N!h^{3N}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3N}{2}}\left[(v-v_x)e^{\beta ll}e^{(\vec{r})}\right]^N$$

\* c'como resolvemos esta integral? TRUCO separamos el volumen total en

dos regiones: aquellas donde le - + co y por ello la partícula no

puede acceder, y otras donde sí puede estar.



 $V_X$ : regiones no accesibles ( $V = V_X \cup (V \setminus V_X)$ .

ue(r) = de e = <ue>

Cono la unión es disjunta, predo separar en dos la integral:

(1. 
$$\int_{V}^{3} e^{-\beta u e(r)} = \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} + \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = e^{-\beta u e(r)} \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} + \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = e^{-\beta u e(r)} \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} + \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = e^{-\beta u e(r)} \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} + \int_{V_{x}}^{3} e^{-\beta u e(r)} = e^{-\beta u e(r)} e^{-\beta$$

b) Terriendo en cuenta que «ue» = ½ «u», donde «u» es la evergia media entre moléculas, calcula (le) considerando el potencial de Sutherland.

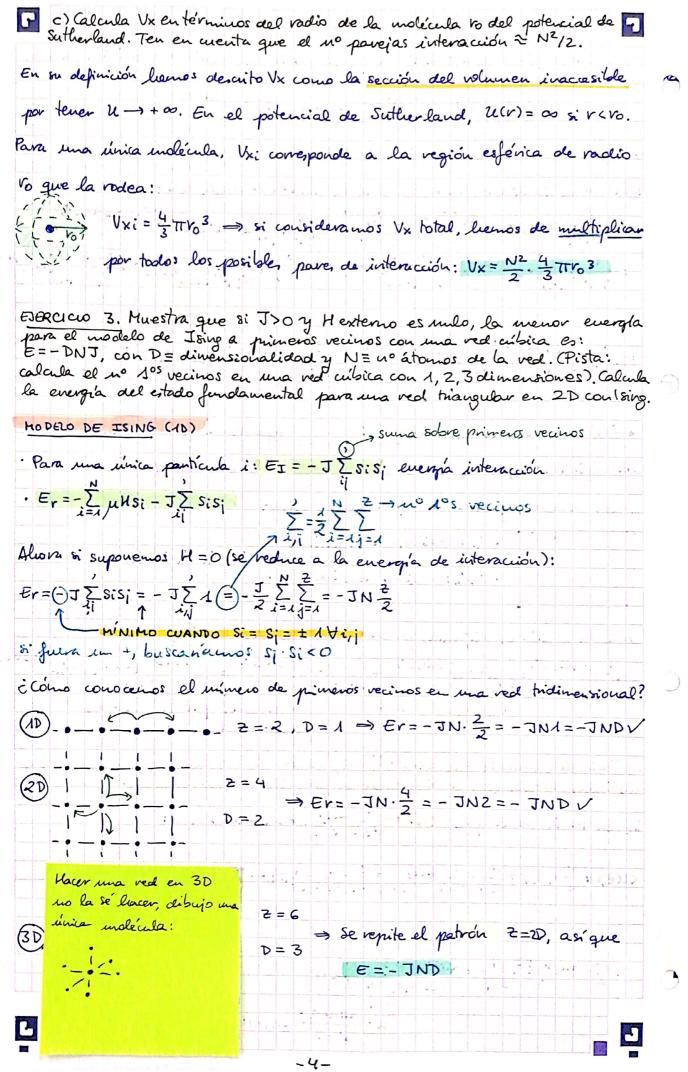
De la teoria vernos que  $(u) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left( \frac{I(\beta)}{V} \right)$ . Para Suther land:

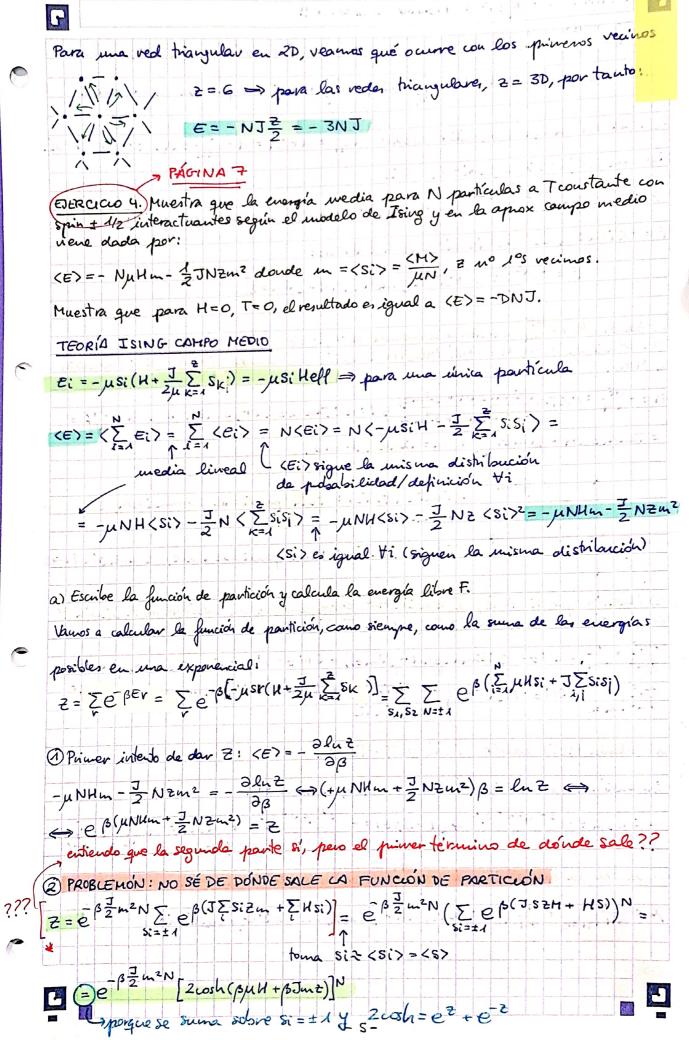
$$\langle ue \rangle = \frac{N}{2} \langle u \rangle = \frac{N}{2} \left( -\frac{2}{2\beta} \left( \frac{I(\beta)}{V} \right) \right) = \frac{N}{2} \left( -\frac{2}{2\beta} \left( -\frac{4\pi}{3V} \pi k_0^3 - \frac{4\pi}{V} \beta u_0 k_0^3 \cdot \frac{1}{3-5} \right) = \frac{N}{2} \left( -\frac{2}{2\beta} \left( -\frac{2}{3V} \pi k_0^3 - \frac{4\pi}{V} \beta u_0 k_0^3 \cdot \frac{1}{3-5} \right) = \frac{N}{2} \left( -\frac{2}{2\beta} \left( -\frac{2}{3V} \pi k_0^3 - \frac{4\pi}{V} \beta u_0 k_0^3 \cdot \frac{1}{3-5} \right) = \frac{N}{2} \left( -\frac{2}{2\beta} \left( -\frac{2}{2} \left( -$$

I(B) calculade. er el ej 1

$$= \frac{N}{2} \cdot \frac{4\pi u_0 v_0^3}{v_0^3} \cdot \frac{1}{3-5} = \frac{2\pi N u_0 v_0^3}{v_0^3 - N} = \frac{N}{V} a$$

a = 2 truoro 3 DISTANCIA MÍNIMA RELATIVA





JUSTIFICACIÓN \* : FOTO PIZARRA ALBERTO!  $H = -\mu H \sum_{i=1}^{N} S_i - J_{i+1} \sum_{i=1}^{N} S_i + J_{i+1} \sum_{j=1}^{N} S_j + J_{i+1} \sum_{j=1}$ definide una magnitud  $H = -\sum_{i,j} J_{sis_i} - \sum_{i} \langle H \rangle s_i$  tal que ese es su valor. Se trata del campo magnético efectivo Heff= H+CH= H+ \frac{7}{2\mu} 2 <5> ?? No lo sé. Sigo con el ejercicio a partir de alú. Tonamos Z= e B = m2N [2 cosh(Buil+ B Jmz)] " sin sober por que i. F = - KTluz es la energia litare de Helmholte: F = Jun NZ - NKTlu [2006 (BUH+BJunz)] b) Usando M =- OF muestra que avando H=0, 3 Te = 27 por sajo de la cual bay tres soluciones n=0, M = ± Ho. Muestra también que mando T>Te la mínica solución H=- OH = NKT. 2 sinh(Bull+BJm2) BH=uNtauh(Bull+BJm2). Como m= (M) = = tanh(BuH+BJunz) = m= tanh (BJunz) OTalta (T) Tc): tank perdiente promuciada, 3 OT baja (T(Tc): tanh pendiente suave, 1 solución H=0 c) Muestra que si TKTc, la solución M=0 corresponde a un máximo de F. Dibeja F en función de m para T>To y para T<To 2012 = 0m (InNZ- KNtanh (BuH+BJunz)) = JNZ- NCI-tanh2 (BJunz)) BJ2 22 = JN2-NBJ222 >0 & T>Tc -> linea solution, m=0 minino de F d) Calcula H(T) wounds T<Tc y T-Te20. Expansión tangente hipersolica a orden 3, con un 70.  $m^{\frac{2}{3}} J_{\beta}m^{\frac{2}{3}} - \frac{\beta^{3}m^{2}J^{3}z^{3}}{3} \Rightarrow (1 - J_{\beta}z) = -\frac{\beta^{3}m^{2}J^{3}z^{3}}{3} \Rightarrow 0$ e) Calcula la susceptibilidad X = DH (H=0) cuando. T-To20. X = 2H | N=0 = 2H (uNtan(BuH+BJut))... deniary rustituin

EDERCICIO 4: PLANTEAMIENTO ALEX => esto es lo princio que lizo Alberto, pero luego dijo que estaba mal (ya mosé en lo que queda, pero esto es lo que mejor parta tiere)

En la teoría se usa que E=-uH \(\si\_{i=1}^{N} \si - J \sisi \text{ sisi } y \si = (\si - <\si>) + <\si>.

El desarrollo es:

E = - uH. \( \si \) = - uH. \( \si \) = - uH \( \si \) = - uH \( \si \) = - uH \( \si \) si -

 $-\int_{1}^{2} [(s_{i}-(s_{i}))(s_{i}-(s_{i}))+(s_{i}-(s_{i}))(s_{i})+(s_{i})(s_{i})+(s_{i})(s_{i})+(s_{i})(s_{i})]=$ 

= - JH = si - J = [s; <s; > - (si><s; > + <s;>s; - (si) = + <s; > ] =

Aproxinación fluctuacione, muy pegereñas tal que (si-(si>)(si-(si>)) 20

 $= -\mu H \sum_{i=1}^{N} s_{i} - J \sum_{i=1}^{2} [s_{i} \langle s_{i} \rangle - \langle s_{i} \rangle \langle s_{i} \rangle + \langle s_{i} \rangle s_{i}] = -\mu H \sum_{i=1}^{N} - J m \sum_{i=1}^{2} s_{i} + J m^{2} \sum_{i=1}^{2} 1 - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N} - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N$ 

# - Ju  $\sum_{j=1}^{3} s_{i} = -\mu H \sum_{j=1}^{N} s_{i} - Ju \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{N} s_{i} - Ju \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{N} s_{i} + Ju^{i} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{N} 1 =$ 

= -  $\mu H \sum_{i=1}^{N} s_{i} - J_{m_{i}} \sum_{j=1}^{N} s_{j} + J_{m_{i}}^{2} \frac{N \cdot 2}{2}$ 

Y si tomamos el valor esperado:

(E) = - MHN·m - Jm22N + 1 Jm22N = - MHNm - 1 Jm22N

S:  $U=0 \Rightarrow \langle e \rangle = \frac{-2}{2} J_m V = - D J_m N'$ .

Por tanto, la función de partición es Z= \ Z e \ Z - BER, con ER = \*

c'Cua'l la sido mi enor? Yo le partido directamente del valor medio

sin desarrollar antes el valor de la energía, así que luego no sabía

qué parer en 2.