Curso de dinámica molecular 2.
Semestre de primavera del 2016.
Instructor: Iván Guerrero, Facultad de Ciencias de la UASLP.

Tarea 4: Ejercicios.

1.- Demuestre que la transformada de Fourier de la ecuación

$$\frac{\partial P(\vec{r},t)}{\partial t} = D\nabla^2 P(\vec{r},t) \tag{1}$$

puede escribirse como:

$$\frac{\partial F_s(\vec{k},t)}{\partial t} = -k^2 D F_s(\vec{k},t) \tag{2}$$

2.- Derive la expresión

$$F_s(\vec{k},t) = \int_V e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} P(\vec{r},t) d\vec{r} \tag{3}$$

con respecto a k y obtenga:

$$\left[\frac{\partial^2 F_s}{\partial k^2}\right]_{k=0} = -\frac{1}{3}\int_0^\infty 4\pi r^4 P(\vec{r},t) dt = -\frac{1}{3} < r^2(t) > \tag{4}$$

3.- Demuestre que

$$\left[\frac{\partial^2 F_s(\vec{k},t)}{\partial k^2}\right]_{k=0} = \frac{1}{N}\left(-\frac{1}{3} < |r\vec{(t)} - \vec{r}_0|^2 >\right) \tag{5}$$

a partir de la interpretación de la función de densidad de probabilidad de N partículas identicas por unidad de volumen:

$$P(\vec{r},t) = \frac{1}{N}\left\langle \sum_{j=1}^{N} \delta(\vec{r} - [\vec{r}_j(t) - \vec{r}_j(0)]) \right\rangle \tag{6}$$

donde δ es una delta de Dirac, y $F_s(\vec{k},t)$ y $P(\vec{r},t)$ son un par de transformadas de Fourier definidas como:

$$F_s(\vec{k},t) = \int_V e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} P(\vec{r},t) d\vec{r} \tag{7}$$

$$P(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_V e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} F_s(\vec{k},t) d\vec{k} \tag{8}$$

4.- A partir de la definición de función de autocorrelación de la velocidad

$$< [\vec{r}(t) - \vec{r}_0]^2 >= \int_0^t dt' \int_0^t dt'' < \vec{v}(t')\cdot\vec{v}(t'') > \tag{9}$$

donde $< ... >$ denota el valor promedio en equilibrio, muestre que si usamos el cambio de variable $\tau = t'' - t$, cambiamos el orden de integración e integramos una vez, es posible escribir:

$$< [\vec{r}(t) - \vec{r}_0]^2 >= 2t \int_0^t d\tau \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) < \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(\tau) > \tag{10}$$

Ayuda: Note que

$$f(\tau) =< \vec{v}(t'' - t') \cdot \vec{v}(0) >=< \vec{v}(t' - t'') \cdot \vec{v}(0) > \tag{11}$$

por lo que $f(\tau) = (-\tau)$, de acuerdo a la estacionariedad del promedio en equilibrio y a la reversibilidad de las ecuaciones de movimiento de la mecánica clásica como se discutió en clase.

Para más detalles ver las notas dadas en clase.

La fecha de entrega es el jueves 7 de abril de 2016 a las 14:00 en clase. Si la entrega se realiza después de esta hora y antes de las siguientes 24 horas habrá una penalización del 50%. Después de este tiempo no tendrá valor.