

Universidad Nacional de Córdoba
Facultad de Matemática, Astronomía y Física
Trabajo Especial de la Licenciatura en Astronomía

Evaluación de Funciones de Distribución de Pares en un Modelo
Mecánico Estadístico de Gases Basado en Particiones del Espacio.

Autor: Ernesto Zurbriggen
Director: René Daniel Rohrmann

Índice general

Resumen	4
Introducción	5
1. Modelos de Gases	7
1.1. Diagrama Densidad-Temperatura del Hidrógeno	7
1.2. Condición de Equilibrio Termodinámico Local	9
1.3. Contribución de los Modelos de Gases	9
1.4. Efectos no-Ideales	11
1.5. Función de Partición Interna	12
1.6. Modelo de Átomo Perturbado	13
1.6.1. Átomo Confinado	13
1.6.2. Potencial de Debye-Hückel	13
1.6.3. Modelos más Detallados	15
1.7. Representaciones Física y Química	17
2. Método de Minimización de la Energía Libre	19
2.1. Estado de Equilibrio	19
2.2. Aspectos Generales del Método de Minimización	20
2.3. Método de Hummer & Mihalas	22
2.4. Pseudo-Continuo	25
3. Estadística Espacial	27
3.1. Aplicaciones	29
3.1.1. Patrones Espaciales en la Flora y Fauna	29
3.1.2. Redes Celulares Aleatorias	30
3.1.3. Modelos de Celdas para Fluidos	31
3.1.4. Distribución Espacial de Objetos Astronómicos	31
4. Representación de Gases con Particiones del Espacio	33
4.1. Particiones del Espacio	34
4.1.1. Entropía	35
4.1.2. Energía Cinética	35
4.1.3. Energía de Interacción y Funciones de Distribuciones de Pares	35
4.1.4. Energía Libre de Helmholtz Total	37
4.1.5. Distribución de Equilibrio Termodinámico	37
4.1.6. Identificación de v	38
4.1.7. Función Distribución $g_v(\omega)$ para un Gas Ideal	38
4.2. Gas de Esferas Duras	39
4.3. Fluidos Compuestos	40

5. Funciones de Distribución de Pares	42
5.1. Análisis Teórico	44
5.1.1. Funciones de Peso Constantes	46
5.1.2. La Fracción de Vecinos Mutuos	48
5.1.3. La Fracción de Primer Vecino Compartido	50
5.1.4. Gas Unidimensional	51
5.1.5. Gases Multidimensionales	51
5.2. Simulaciones Numéricas	52
5.2.1. Puesta a Prueba de las Simulaciones	54
5.2.2. Resultados Numéricos para $g_{vv'}(\omega)$	56
5.2.3. Funciones de peso en $g_{vv'}(\omega)$	58
Síntesis y Conclusiones	64
Referencias	66

05.20.Jj Statistical mechanics of classical fluids.

95.30.Tg Thermodynamic processes, conduction, convection, equations of state.

Resumen

La estructura microscópica de un fluido en equilibrio puede ser descrita por una clase de partición del espacio en la cual a cada partícula se le asigna un volumen v . La combinación de particiones del espacio con el método de minimización de la energía de Helmholtz, permite obtener un formalismo que contiene información termodinámica y estructural del sistema. En este formalismo termo-estadístico el cálculo de la energía de interacción del fluido, requiere la implementación de la función de distribución de pares condicional $g_{vv'}$. Esta cantidad describe la densidad de probabilidad de hallar un par de partículas con volúmenes individuales v y v' como una función de la distancia que las separa. El objetivo del presente trabajo es determinar por medio de análisis teóricos y simulaciones numéricas la función $g_{vv'}$ para un sistema de partículas independientes distribuidas aleatoriamente en el espacio.

Palabras claves: Fluidos; Estadística; Distribución.

Introducción

La evaluación de las propiedades termodinámicas, de transporte y ópticas de fluidos densos es de gran interés para caracterizar el comportamiento de la materia en diferentes condiciones físicas. Debido a sus múltiples aplicaciones, la elaboración de modelos teóricos de gases ha sido frecuente desde los inicios de la termodinámica y de la mecánica estadística. La mayoría de los modelos de gases están dirigidos a determinar las ecuaciones de estado que gobiernan la conducta macroscópica de un sistema. En casos más específicos y dentro del campo astrofísico, la representación teórica de fluidos compuestos por mezclas de diferentes sustancias químicas debe proveer además un cálculo detallado de poblaciones atómicas y moleculares el cual permita determinar la opacidad monocromática, una cantidad que es esencial para calcular la propagación de la radiación en estrellas (Iglesias & Rogers 1996, Marigo & Aringer 2009) y planetas gaseosos (Sharp & Burrows 2007). También se busca obtener por este medio espectros estelares sintéticos que, por comparación con espectros observados, ayuden a diagnosticar las propiedades de los objetos emisores.

El mayor desafío al que se enfrenta el desarrollo de un modelo de gas es el tratamiento adecuado de los llamados efectos no-ideales. Estos son todos aquellos provocados por las interacciones entre las partículas que componen el sistema. Los efectos no-ideales más habitualmente conocidos son los que modifican las relaciones entre variables termodinámicas, dando lugar a ecuaciones de estado distintas de las que presenta un gas ideal o perfecto formado por partículas que no interactúan. Tales efectos acontecen en sistemas densos como el interior de planetas gigantes (ej., Nettelmann *et al.* 2008) y en regiones profundas de las envolturas de estrellas enanas blancas frías (ej., Kowalski *et al.* 2007). Existen muchos otros efectos no-ideales que pueden observarse aún en los gases de relativamente baja densidad presentes en atmósferas e interiores de estrellas de secuencia principal. Estos efectos son los que dan lugar a rasgos espectrales distintivos en la absorción y emisión térmica del gas, entre los que cabe citar el ensanchamiento y la deformación de líneas espectrales y los avances del continuo de fotoionización hacia longitudes de onda largas (ej. Griem 1997).

El presente trabajo se enmarca dentro de un modelo de gas basado en particiones del espacio (Rohrmann 2005, Rohrmann & Zorec 2006) cuya elaboración fue motivada por las dificultades de los modelos preexistentes en evaluar coeficientes de opacidad no-ideales en forma autoconsistente con el cálculo de poblaciones atómicas. La característica novedosa de este nuevo modelo es la introducción de una más refinada información estructural sobre el medio ambiente de una dada partícula a través de un parámetro extra, el “volumen disponible” v , el cual está determinado por la distancia de la partícula de referencia a su vecino más cercano. El actual trabajo tiene por objetivo principal evaluar un elemento básico de la teoría: la función distribución de pares $g_{vv'}$, la cual caracteriza la probabilidad de encontrar pares de partículas con volúmenes disponibles v y v' separadas por cierta distancia. Esta función es necesaria para determinar la energía del gas originada por las interacciones entre las partículas. Debido a su complejidad y a la ausencia de evaluaciones previas, la función $g_{vv'}$ es estudiada aquí para el sistema más simple, consistente en un conjunto de

partículas independientes distribuidas aleatoriamente. Los resultados de esta investigación servirán de referencia para la identificación de la función $g_{vv'}$ en sistemas compuestos por partículas interactuantes bajo distintas leyes.

El trabajo está organizado en la siguiente forma. En el Capítulo 1, se analiza el diagrama de fases del hidrógeno abarcando todas las condiciones físicas en las que esta sustancia puede presentarse en la naturaleza de acuerdo al conocimiento actual de la ciencia. Este análisis pone de relieve las dificultades para elaborar un modelo de gas. Se detallan también algunas de las aplicaciones astrofísicas básicas de los modelos de fluidos, la caracterización de efectos no-ideales y algunas de sus consecuencias a través de la descripción de unos pocos modelos de átomos que son perturbados por fuerzas externas. Este capítulo finaliza con la descripción de las dos representaciones teóricas de gases más importantes en astrofísica estelar.

En el Capítulo 2 se describen los aspectos generales del método de minimización de la energía libre de Helmholtz, ampliamente usado en el desarrollo de modelos de gases con fines astrofísicos. Se particulariza además la versión del método de minimización adoptada por Hummer & Mihalas (1988), que se aplica en la actualidad en el cálculo de modelos detallados de atmósferas estelares (ej. Bergeron *et al.* 1991, Hubeny *et al.* 1994, Rohrmann *et al.* 2002). Algunas de las dificultades del uso del método de Hummer & Mihalas en cálculos de la opacidad radiativa de un gas de hidrógeno se señalan al final de este capítulo.

El Capítulo 3 presenta antecedentes de diferentes estudios basados en la subdivisión del espacio ocupado por colecciones de objetos. Allí podemos observar que el estudio de la estadística espacial de sistemas complejos tiene una enorme variedad de aplicaciones en las ciencias exactas y naturales.

En el Capítulo 4 se analizan los aspectos generales del método termo-estadístico basado en particiones del espacio. Allí se deriva de forma general la función distribución N_v de volúmenes disponibles v para un gas en el equilibrio termodinámico. Se considera brevemente la aplicación de este formalismo a gases formados por partículas sin interacción, a fluidos formados por esferas duras, y la extensión a mezclas gaseosas.

El Capítulo 5 está destinado a presentar las evaluaciones de la función distribución de pares $g_{vv'}$. El estudio se realiza por medio de análisis teóricos y por el uso de experimentos numéricos. Las conclusiones de esta investigación se exponen al final del trabajo.

Capítulo 1

Modelos de Gases

Muchos problemas astrofísicos requieren el conocimiento de las propiedades de la materia en equilibrio termodinámico o cerca de él. Los modelos de gases tienen la finalidad de describir las propiedades termodinámicas de un fluido conjuntamente con sus capacidades de absorción y de emisión de radiación. Ellos son fundamentales para estudiar, por ejemplo, el estado térmico y mecánico de las estrellas.

En este capítulo revisamos los conceptos básicos necesarios para el desarrollo de modelos de fluidos astrofísicos. Vamos a analizar los desafíos a los que se enfrentan tales desarrollos como, por ejemplo, tener en cuenta la destrucción de estados atómicos perturbados por el gas; los fenómenos de ionización y disociación por efecto de presión, entre otros. Finalmente, discutiremos brevemente los dos métodos más importantes usados actualmente en la representación de gases para interiores y atmósferas estelares.

1.1. Diagrama Densidad-Temperatura del Hidrógeno

La Fig. 1.1 muestra un diagrama de fases de hidrógeno en una región de interés para la astrofísica estelar. Consideramos H porque es el elemento más abundante y da una enseñanza genérica de lo que ocurre con otras sustancias, tanto puras como compuestas. En este dia-

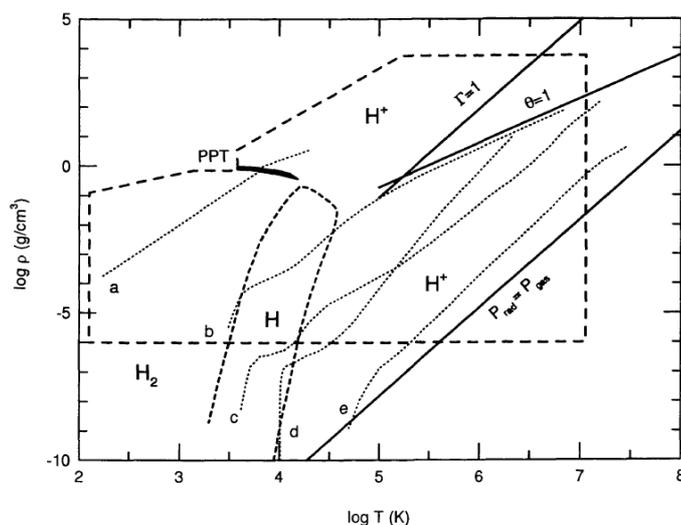


Figura 1.1: Diagrama de fases para el Hidrógeno. (Tomado de Saumon et al. 1995).

grama podemos observar que en la región de baja densidad y de baja temperatura, el H se

encuentra esencialmente neutro y en la forma de átomos y moléculas. Las moléculas dominan a bajas temperaturas ($\log T \lesssim 3.5$) y ellas se disocian en átomos si la temperatura crece. A temperaturas más altas aún ($\log T \gtrsim 4.3$), los átomos se ionizan para formar un plasma de protones y electrones. La curva de segmentos cortos que delimita estas tres regiones en la figura corresponde a un grado de disociación o de ionización del %50. Para densidades superiores a $\rho \approx 0.01 \text{ g cm}^{-3}$, átomos y moléculas están sujetos a fuertes interacciones y forman un fluido no-ideal. En particular, las ecuaciones de equilibrio de Saha para la ionización y disociación son completamente inapropiadas para $\rho > 0.1 \text{ g cm}^{-3}$, por lo que no es posible estimar el equilibrio químico en esta región densa con dicha ley. A densidades más altas, cercanas a 1 g cm^{-3} , las funciones de onda electrónicas de átomos vecinos se superponen, los electrones son empujados hacia estados libres y el fluido se convierte en un plasma por el efecto de ionización por presión.

Dos parámetros importantes que caracterizan al plasma son: la degeneración electrónica θ y la intensidad del acople Coulombiano Γ entre partículas cargadas. El parámetro de degeneración $\theta = kT/\epsilon_F$ (k constante de Boltzmann y ϵ_F la energía de Fermi) da una idea del grado de manifestación de la naturaleza cuántica de las partículas. El acople Coulombiano, $\Gamma = e^2/akT$ (e carga del electrón), es el cociente entre la energía de interacción de un par de partículas cargadas con separación media a y la energía térmica media por partícula. Arriba de la línea continua designada con $\theta = 1$ (Fig. 1.1), los electrones están degenerados. Por ser más masivos, los protones pueden ser descriptos adecuadamente con la estadística clásica en la mayor parte del diagrama. Por encima de la línea designada con $\Gamma = 1$, las interacciones del tipo Coulombianas juegan un rol importante.

A temperaturas intermedias ($\log T \approx 5$) y densidades de 1 g cm^{-3} , la ionización térmica y la ionización por presión son de importancia comparable. En este régimen, la excitación térmica de los átomos de H es significativa. Ellos están inmersos en un plasma moderadamente acoplado ($\Gamma \approx 1$) en el cual los electrones están parcialmente degenerados ($\theta \approx 1$). Este régimen es particularmente difícil de estudiar porque los estados internos de los átomos están fuertemente perturbados por el plasma que los rodea. Aquí los modelos de gases suelen dar resultados menos precisos.

En la región abarcada por el diagrama de la Fig. 1.1, la velocidad de los electrones es no-relativista. Por otro lado, a bajas densidades y altas temperaturas, la presión de radiación se vuelve mayor que la presión del gas (margen inferior derecho). Finalmente, el margen superior izquierdo del diagrama representa condiciones que al conocimiento actual de la ciencia no se encuentran en el contexto astrofísico. Allí se prevé que el H puede ser un sólido molecular o posiblemente forma una red de Coulomb (Ross 1974).

La Fig. 1.1 presenta además modelos de interiores y envolturas estelares de varios objetos ricos en H. Las curvas b , c y e corresponden a estrellas de secuencia principal con masas de 0.3 , 1 y $15 M_{\odot}$. Para la estrella más masiva, e , es posible usar un modelo de gas simple sin degeneración ni efectos de ionización por presión. En este caso el gas está completamente ionizado a lo largo de su interior, el acople Coulombiano ($\Gamma \ll 1$) y la degeneración electrónica ($\theta \gg 1$) son débiles y la contribución de la presión de radiación es significativa. El modelo solar (c) es más frío y denso que el anterior. Un modelo preciso para el mismo requiere considerar efectos no-ideales relativamente débiles y degeneración electrónica parcial cerca del centro. La curva b correspondiente a la estrella de baja masa, ingresa a áreas más complejas del diagrama de fases. Los electrones están degenerados parcialmente a lo largo de casi toda la estrella y las interacciones electrostáticas en el plasma son significativas. Este modelo cruza un régimen difícil de modelar, donde Γ y θ son del orden de la unidad. Las estrellas enanas marrones, que son objetos con masas comprendidas entre planetas gigantes y estrellas de secuencia principal, ocupan la región entre las curvas a y b .

La curva d representa una envoltura de enana blanca de $T_{ef} = 12000K^1$, con capas ricas en H en la superficie y ricas en helio hacia el interior, rodeando un núcleo de carbono. En la figura sólo se muestra lo que acontece para la capa más superficial, que consiste en un plasma de H puro débilmente acoplado y no degenerado.

Fue sugerido originalmente y en forma independiente por Wigner & Huntington (1935) y por Landau & Zeldovitch (1943) que la ionización por presión del H podría ser un proceso discontinuo, a través de una transición de fase de primer orden conocida como transición de fase del plasma. La línea oscura en la Fig. 1.1 muestra esta discontinuidad calculada por Saumon & Chabrier (1992). La curva a señala la envoltura gaseosa de Júpiter, la cual es dominada por H molecular y pasa a través de la región de ionización por presión. Es interesante notar que si la transición de fase del plasma realmente ocurre en la naturaleza, debería encontrarse en la envoltura de Júpiter. Por lo pronto no existen pruebas al respecto.

1.2. Condición de Equilibrio Termodinámico Local

Las estrellas se encuentran fuera de equilibrio termodinámico (ET). Ellas pierden energía principalmente en forma de radiación. Los flujos netos emergentes de energía son consecuencia de gradientes de temperatura en los interiores estelares². Si en una porción gaseosa de una estrella el gradiente de temperatura es pequeño en comparación con el camino libre medio que recorre un fotón desde su emisión hasta su absorción o dispersión, entonces la condición de ET puede ser considerada localmente como una buena aproximación (Mihalas 1978). La condición de equilibrio termodinámico local (ETL) considera que el conjunto de relaciones entre poblaciones de estados libres y ligados, las leyes de opacidad y de emisividad, y de hecho todas las propiedades termodinámicas del fluido estelar, son las mismas que en el ET para valores locales de temperatura y densidad.

La condición de ETL es satisfecha con precisión a lo largo de todo el interior estelar en todas las estrellas, como así también pero en menor medida en las capas profundas de sus atmósferas. Esto es debido a que el camino libre medio de un fotón se reduce considerablemente para las altas densidades del gas presente en estas regiones (Cox & Giuli 1968 Vol. 1, pag. 170). En el caso particular del Sol, el ETL puede considerarse como una aproximación buena en su interior, relativamente aceptable en la fotosfera, pero mala para la cromosfera y la corona.

1.3. Contribución de los Modelos de Gases en Astrofísica Estelar

En esta sección mostraremos dos ejemplos en los cuales los modelos gases intervienen en problemas de astrofísica estelar.

Primero, si deseamos conocer la estructura interna básica de una estrella³, es decir, las distribuciones de presión (P), masa encerrada dentro de un radio r (M_r), luminosidad (L_r) y temperatura en función del radio estelar, debemos resolver el conjunto de ecuaciones de

¹La temperatura efectiva (T_{ef}) de una estrella es la temperatura que debe tener un cuerpo negro con igual radio para radiar la misma cantidad de energía por unidad de tiempo.

²Si una estrella se encontrara en ET como un todo, la temperatura (y cualquier variable de estado intensiva) sería uniforme en toda su extensión y no habría un flujo energético neto saliente.

³Con estructura básica nos referimos a una estrella en estado estacionario, con simetría esférica y sin campos magnéticos.

equilibrio provistas por la teoría de interiores estelares (Schwarzschild 1958; Cox & Giuli 1968 Vol. 2). Estas ecuaciones se refieren al equilibrio hidrostático, conservación de la masa, equilibrio térmico y la condición de transporte de energía cuando ésta se propaga por radiación (exclusivamente) o por convección, cuyas expresiones respectivas son:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dr} &= -\rho \frac{GM_r}{r^2}, \\ \frac{dM_r}{dr} &= 4\pi r^2 \rho, \\ \frac{dL_r}{dr} &= 4\pi r^2 \rho \varepsilon, \\ \frac{dT}{dr} &= -\frac{3}{4\sigma c} \frac{\bar{\chi} \rho}{T^3} \frac{L_r}{4\pi r^2}, \quad (\text{radiativo}) \\ \frac{dT}{dr} &= \left(1 - \frac{1}{\gamma}\right) \frac{T}{P} \frac{dP}{dr}, \quad (\text{convectivo}) \end{aligned} \tag{1.1}$$

donde G y σ son las constantes de gravitación y de Stefan-Boltzmann, c es la velocidad de la luz, γ ($=c_p/c_v$) es el cociente entre los calores específicos a presión y volumen constantes, ε es el coeficiente de generación de energía por procesos nucleares y $\bar{\chi}$ la opacidad promediada en frecuencia.

Para elaborar un modelo de interior estelar por resolución del sistema de ecs. (1.1), resulta evidente que se necesitan conocer condiciones de contorno e información sobre las propiedades del gas. Entre las condiciones de contorno figuran los parámetros fundamentales de la estrella: masa estelar y composición química (generalmente abundancias másicas relativas de H, He y demás elementos; X, Y, Z respectivamente). Por otro lado, es necesario disponer de tres relaciones características del gas: una ecuación de estado (EE) (generalmente la relación P - ρ - T); la opacidad media (sección eficaz radiativa promediada en frecuencia) y el coeficiente de generación de energía por procesos nucleares, las cuales representamos formalmente por:

$$\begin{aligned} P &= P(T, \rho, X, Y, Z), \\ \bar{\chi} &= \bar{\chi}(T, \rho, X, Y, Z), \\ \varepsilon &= \varepsilon(T, \rho, X, Y, Z). \end{aligned} \tag{1.2}$$

En el caso de medios convectivos se requiere también de una EE para la energía interna del gas, de la cual puedan evaluarse los calores específicos c_p y c_v .

Por lo tanto, uno de los objetivos principales que se persigue en el desarrollo de modelos de gases para uso astrofísico, es proveer las relaciones (1.2) que permitan determinar las estructuras de los interiores estelares.

Como segundo ejemplo cabe destacar la elaboración de modelos de atmósferas para determinar teóricamente el espectro de radiación emitido por las estrellas. Para tal fin, en el caso más simple⁴, se necesitan resolver las ecuaciones de equilibrio hidrostático y del transporte de energía de radiación:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dr} &= -g\rho, \\ \cos \theta \frac{dI_\nu}{dr} &= \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu, \end{aligned} \tag{1.3}$$

donde g es la gravedad superficial de la estrella, χ_ν la opacidad monocromática, η_ν el coeficiente de emisión monocromático e $I_\nu=I_\nu(r, \theta)$ la intensidad específica monocromática de la

⁴Modelos de atmósferas estacionarios, de capas plano paralelas, no convectivos (Mihalas 1978).

radiación a una distancia baricéntrica $r = |\vec{r}|$ y que se propaga en la dirección del ángulo θ medido respecto a \vec{r} .

Para resolver el sistema (1.3) se necesitan conocer tres parámetros fundamentales de la atmósfera estelar (T_{ef} , g y composición química) y tres relaciones características del gas: una EE, la opacidad χ_ν y la emisividad η_ν , las cuales representamos formalmente por:

$$\begin{aligned} P &= P(T, V, \{N_{\alpha ij}\}), \\ \eta_\nu &= \eta_\nu(T, V, \{N_{\alpha ij}\}), \\ \chi_\nu &= \chi_\nu(T, V, \{N_{\alpha ij}\}). \end{aligned} \tag{1.4}$$

La evaluación de η_ν y χ_ν requiere el uso de abundancias detalladas donde se especifica la distribución de poblaciones de partículas en sus diferentes estados internos $\{N_{\alpha ij}\}$, donde $N_{\alpha ij}$ es el número total de partículas de la especie α con grado de ionización i y en el estado de excitación j .

Así, para determinar el espectro de radiación que emite una estrella se necesita de antemano un modelo de gas que provea las relaciones características (1.4).

Síntesis

La información básica que aporta un modelo de gas para problemas de astrofísica estelar es la siguiente.

- *Ecuaciones de estado.* Particularmente aquellas referidas a la presión $P = P(T, V, \{N_{\alpha ij}\})$ y a la energía interna $U = U(T, V, \{N_{\alpha ij}\})$, las cuales se aplican por ejemplo en condiciones de equilibrio hidrostático y en el transporte de energía convectiva.
- *Funciones de respuesta (calores específicos, compresibilidad, coeficientes de expansión térmica, gradiente adiabático, etc.).* Ellas sirven por ejemplo para determinar si el transporte de energía por convección es importante en una estrella y evaluarlo si así lo fuera.
- *Distribución de poblaciones atómicas y moleculares en estados internos $\{N_{\alpha ij}\}$.* Los conjuntos de poblaciones se requieren para determinar la capacidad de un gas de absorber y emitir radiación.
- *Opacidades monocromáticas χ_ν y emisividades monocromáticas η_ν .* Estas son necesarias para poder evaluar espectros sintéticos estelares a través de un modelo de atmósfera.
- *Opacidades promediadas $\bar{\chi}$ en frecuencias.* Utilizadas particularmente en la determinación de la estructura interna de una estrella. La más habitual es la llamada opacidad media de Rosseland.

1.4. Efectos no-Ideales

Uno de los mayores desafíos a los que se enfrenta el desarrollo de un modelo de gas astrofísico, es obtener de manera auto-consistente poblaciones atómicas y coeficientes de opacidad teniendo en cuenta los efectos no-ideales. Entendemos por efectos no-ideales aquellos que proceden de las interacciones entre las partículas del gas y que se manifiestan en diversas propiedades del mismo. Las fuentes de efectos no-ideales en fluidos astrofísicos son

las interacciones Coulombianas entre partículas cargadas y las interacciones de corto alcance entre partículas neutras y neutras-cargadas. El efecto del volumen excluido debido a partículas con estructura electrónica, la perturbación y destrucción de los estados ligados atómicos y moleculares, la ionización y disociación por efectos de presión, entre otros fenómenos, provocan cambios en las propiedades térmicas y ópticas del gas.

Los efectos no-ideales más conocidos son aquellos que se presentan en las EE, por ejemplo, en el apartamiento de la relación P - ρ - T a la ley del gas ideal $P \propto \rho T$. En un fluido de H puro, esto ocurre para $\rho \gtrsim 0.3 \text{ g cm}^{-3}$ y en simultáneo con el proceso de ionización por presión. A densidades considerablemente bajas como las existentes en las atmósferas de estrellas de secuencia principal (donde la densidad difícilmente supera 0.001 g cm^{-3}) las propiedades termodinámicas son prácticamente las de un gas ideal, sin embargo, efectos no-ideales están presentes en el espectro de radiación emitido por el gas. Un ejemplo puede verse en la Fig. 1.2. En el panel izquierdo de la figura se muestran varios espectros en emisión de un plasma de H incandescente en la región de la serie de Balmer obtenidos en un laboratorio para distintas densidades electrónicas N_e . Allí se puede apreciar el incremento del ensanchamiento Stark de las líneas y la desaparición de líneas cerca del límite de la serie a medida que crece N_e . Estos cambios son producto de las interacciones entre las partículas del plasma.

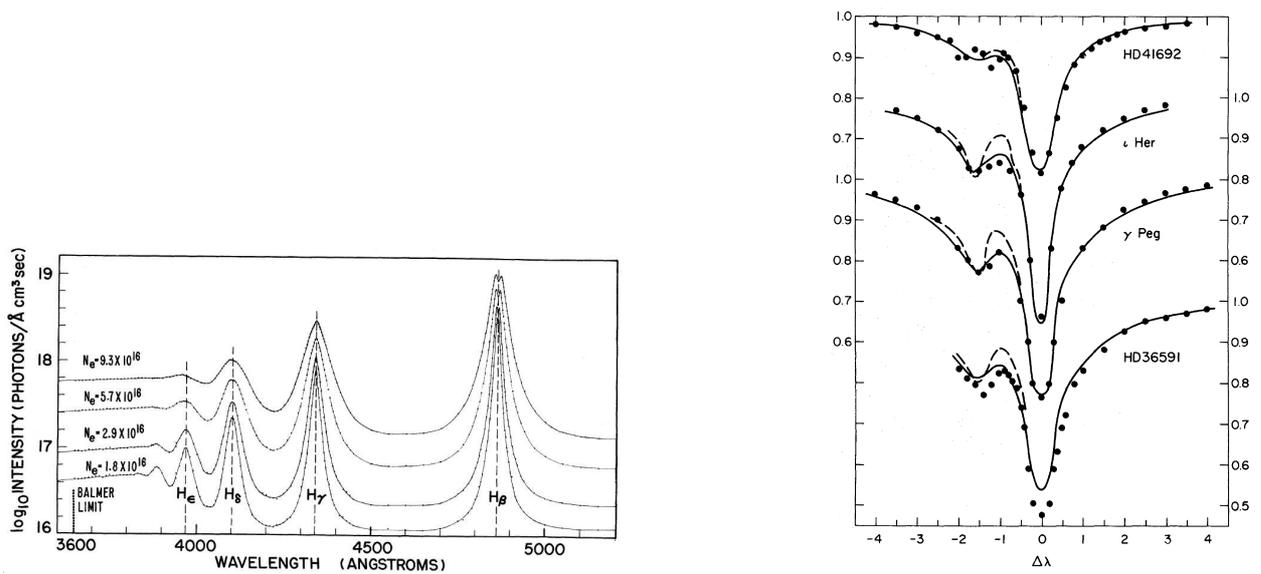


Figura 1.2: Izquierda: *Espectros de Hidrógeno entre 3600-5200 Å.* (Tomado de Wiese et al. 1972). Derecha: *Perfiles de la línea del He I $\lambda 4471$ de distintas estrellas. Datos observacionales (puntos), perfiles teóricos (curvas continuas y de trazos).* (Tomado de Mihalas et al. 1974).

La Fig. 1.2 (*derecha*) muestra otro ejemplo con la ilustración del perfil de la línea He I $\lambda 4471$ perteneciente a las estrellas HD 41692, ϵ Her, γ Peg y HD 36591. En este caso, el efecto Stark ensancha las líneas y genera la aparición de una segunda componente, la cual es producto de la ruptura de la degeneración del estado electrónico inicial en la transición. Si el gas en las atmósferas estelares se comportara estrictamente como un gas ideal, las líneas de absorción estarían ensanchadas únicamente por la convolución del ensanchamiento natural y el efecto Doppler, y la segunda componente no estaría presente.

1.5. Función de Partición Interna

La función de partición interna Z_{int} es una función que está habitualmente presente en modelos mecánico-estadísticos de gases que contienen partículas con estructura electrónica.

Para cada especie de átomo o molécula se dispone de una Z_{int} con la siguiente forma

$$Z_{int} = \sum_{\text{niveles}-j} g_j \exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{kT}\right). \quad (1.5)$$

La suma abarca todos los posibles niveles de energía internos, siendo g_j el peso estadístico y ε_j el autovalor de energía del nivel j (con j nos referimos al número cuántico principal en átomos con un electrón, o a una colección de números cuánticos en el caso de partículas multi-electrónicas).

La aplicación del modelo de gas ideal conduce a la divergencia de Z_{int} . Esto es fácil de visualizar en el caso de átomos con un electrón donde $g_j = 2j^2$ y $\varepsilon_j = -\frac{\varepsilon_o}{j^2}$ (con ε_o el autovalor del nivel fundamental), con lo cual $Z_{int} \rightarrow \infty$. Esto es físicamente inaceptable ya que implica la divergencia de distintas cantidades termodinámicas, y se debe a la utilización del modelo de átomo aislado. La no divergencia de Z_{int} es un resultado directo de las interacciones entre las partículas (y por lo tanto un efecto no-ideal) las cuales conducen a la eliminación de estados altamente excitados como veremos en algunos ejemplos de la siguiente sección.

1.6. Modelo de Átomo Perturbado

En la sección anterior vimos que es de mucho interés considerar el fenómeno de perturbación y destrucción de los estados internos de átomos o moléculas inmersos en un fluido. En la literatura encontramos varios modelos de átomo perturbado. Describiremos algunos de los más representativos y que predicen resultados interesantes.

1.6.1. Átomo Confinado

El modelo de átomo confinado fue desarrollado por Harris *et al.* (1960) y consiste en un átomo hidrogenoide confinado a una celda esférica de radio r_o con paredes rígidas. La celda representa en forma aproximada las interacciones con partículas vecinas, otros átomos o moléculas, y por lo tanto es un modelo destinado principalmente a gases neutros. El potencial de interacción entre el núcleo atómico y el electrón es dado por:

$$u(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & : 0 \leq r \leq r_o \\ \infty & : r \geq r_o. \end{cases} \quad (1.6)$$

Hay diferentes criterios para determinar el valor del radio de la celda r_o , uno de ellos consiste en considerar que la celda ocupa un volumen equivalente al volumen medio por partícula en el fluido ($\frac{4}{3}\pi r_o^3 = 1/n$: $n = \frac{N}{V}$). Lo importante es que el confinamiento conduce a que las auto-funciones electrónicas se anulen para $r \geq r_o$, en vez de hacerlo en el infinito como en el caso de un átomo aislado. Por su parte, los autovalores de energía resultan dependientes del radio de la celda r_o .

En la Fig. 1.3 se muestran los seis autovalores de energía más bajos para el átomo de H y para la molécula H₂ obtenidos por Graboske *et al.* (1969). Para $r_o > 10 \text{ \AA}$ los valores tienden a los de la solución del problema de autovalores del átomo/molécula aislado. Para $r_o < 10 \text{ \AA}$, a medida que r_o disminuye los autovalores tienden a crecer principalmente para los estados excitados, y la degeneración electrónica es destruida.

1.6.2. Potencial de Debye-Hückel

La utilización del potencial de Debye-Hückel es una opción simple para considerar átomos perturbados por partículas con carga eléctrica (iones y electrones libres). Para un ión con

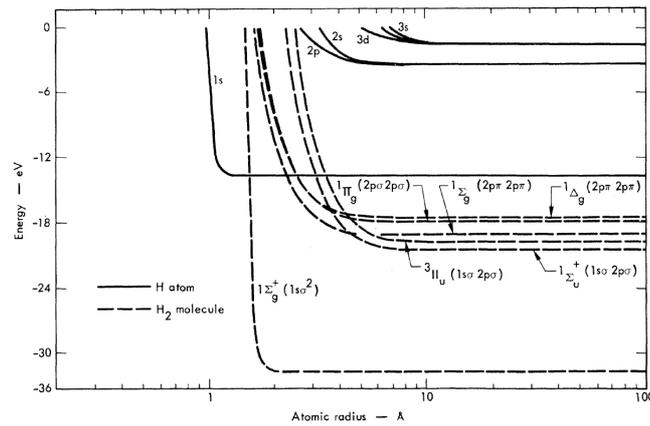


Figura 1.3: Niveles ligados de energía predichos por el modelo de átomo confinado para el átomo de H y la molécula H_2 . (Tomado de Graboske et al. 1969).

número atómico Z inmerso en un plasma compuesto de varias especies (α) de partículas cargadas (con densidades numéricas n_α y números atómicos Z_α), el modelo de Debye-Hückel expresa que la interacción de dicho ion con un electrón es dada por el potencial de Debye (Balescu 1975; Mihalas 1978)

$$u_D(r) = -\frac{Ze}{r}e^{-r/D}, \quad (1.7)$$

donde D es la llamada longitud de Debye,

$$D = \left(\frac{4\pi e^2}{kT} \sum_{\alpha} n_{\alpha} Z_{\alpha}^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.8)$$

La suma sobre α comprende todas las especies de partículas cargadas.

Los efectos perturbativos de iones y electrones sobre un átomo hidrogenoide han sido tratados por Rogers *et al.* (1970) y Barcza (1979) considerando que el electrón y el núcleo del átomo interactúan con un potencial efectivo u_D . Con este potencial se toma en cuenta un apantallamiento de la interacción electrón-núcleo en un gas parcialmente ionizado, efecto que aumenta con la distancia electrón-núcleo. Algunos autovalores de baja energía obtenidos con este método por Barcza para el H, se presentan en la Fig. 1.4 (*izquierda*) como una función de la inversa de la longitud de Debye ($\mu = 1/D$). En fluidos de baja densidad, la longitud de Debye es suficientemente grande tal que los autovalores convergen a los del átomo aislado (potencial atómico Coulombiano no apantallado).

Un test de este modelo consiste en la evaluación del corrimiento al rojo de las líneas de Balmer y su comparación con mediciones en laboratorio para un plasma parcialmente ionizado (Wiese *et al.* 1971). Como puede observarse en la Fig. 1.4 (*derecha*) los corrimientos aumentan con μ y por lo tanto con la densidad de partículas cargadas. Sin embargo, la predicción del modelo de átomo perturbado con potencial interno de Debye predice desplazamientos de líneas considerablemente mayores a los medidos.

Tanto el modelo de átomo confinado como el basado en el potencial de Debye-Hückel producen funciones de partición interna convergentes, pero presentan deficiencias en la evaluación de los autovalores de energía (Graboske *et al.* 1969 y Hummer & Mihalas 1988).

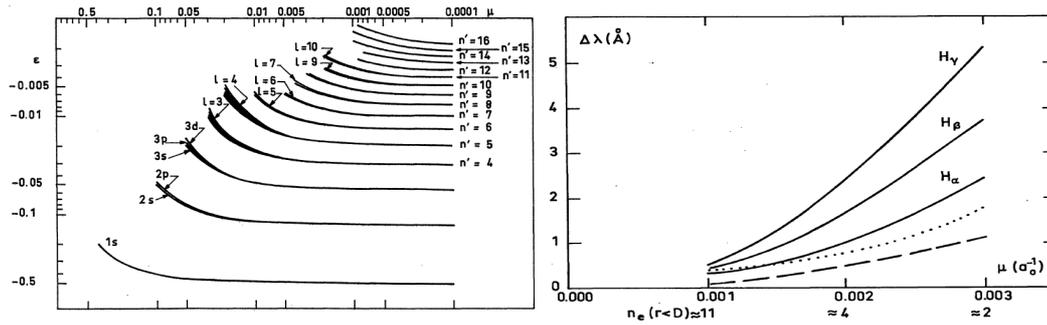


Figura 1.4: Izquierda: Dependencia de los niveles de energía con la longitud de Debye. (Tomado de Barcza 1979).

Derecha: Corrimientos hacia el rojo de $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma$ predichas por el modelo de Debye (curvas continuas). Corrimiento de H_γ medido experimentalmente (Wiese et al. 1971) (curva de segmentos). $n_e(r < D)$ es el número de electrones libres dentro de la esfera de Debye. (Tomado de Barcza 1979).

1.6.3. Modelos más Detallados

Un análisis más fundamental de las perturbaciones del gas sobre un átomo, consiste en realizar cálculos mecánico cuánticos para la estructura electrónica de un arreglo multi-atómico que incluye al átomo de interés y sus partículas vecinas. Un estudio de este tipo fue realizado por Younger *et al.* (1988). Ellos consideraron un arreglo espacial de nueve átomos de He en forma de cubo centrado en el átomo de interés, como se ilustra en la Fig. 1.5. Las posiciones de los núcleos permanecen fijas en el tiempo y los núcleos en los vértices tienen la intención de representar los perturbadores más cercanos de la vecindad del átomo. La estructura electrónica se determina con un código molecular Hartree-Fock-Slater basado en aproximaciones de Rosen *et al.* (1976). Los resultados obtenidos por Younger *et al.* muestran que hay cuatro regímenes en el comportamiento del átomo perturbado que dependen de la separación entre núcleos, ver Fig. 1.6. Distribuciones representativas de las nubes electrónicas correspondientes a estas cuatro configuraciones se observan en la Fig. 1.7. Para separaciones entre núcleos suficientemente grandes (representando un fluido de baja densidad) la estructura multi-electrónica se separa en un conjunto de átomos donde los electrones están asociados a pozos de potenciales de núcleos individuales [régimen atómico en la Fig. 1.6; Fig. 1.7-(a)]. Conforme disminuye la separación entre núcleos (representativo de un aumento de la densidad en un fluido) las nubes electrónicas correspondientes a núcleos

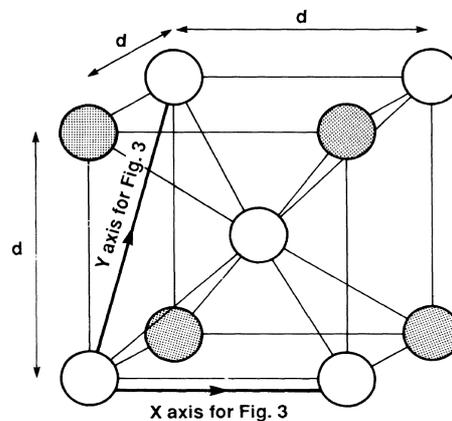


Figura 1.5: Configuración geométrica de un arreglo de nueve átomos de He. (Tomado de Younger et al. 1988).

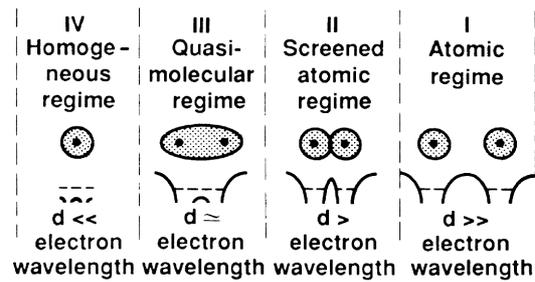


Figura 1.6: Ilustración de los cuatro regímenes del plasma de He en términos de la intersección atómica, la estructura de las curvas de potencial que determinan el movimiento electrónico y la relación entre la distancia entre núcleos y la longitud de onda característica del electrón. (Tomado de Younger et al. 1988).

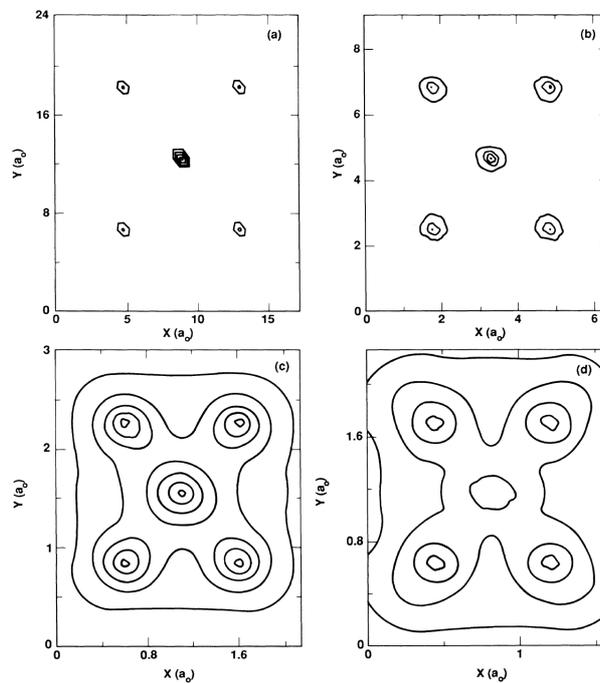


Figura 1.7: Disposiciones de las nubes electrónicas en un plano que contiene el átomo central y cuatro de los vértices del arreglo. (a) Régimen atómico con $d = 8a_0$. (b) Régimen de apantallamiento atómico con $d = 3a_0$. (c) Régimen cuasi-molecular con $d = a_0$. (d) Régimen de gas de electrones homogéneo con $d = 0.75a_0$. a_0 radio de Bohr. (Tomado de Younger et al. 1988).

vecinos comienzan a solaparse y la configuración del sistema pasa sucesivamente por los regímenes de átomos apantallados y cuasi-moléculas, para finalmente alcanzar un régimen homogéneo en que los electrones son compartidos por los distintos núcleos.

Este estudio puede ayudar a comprender los cambios experimentados por un átomo perturbado en un fluido, y en especial la conducta global de un fluido cuando la densidad crece alcanzándose la condición de ionización/disociación por presión.

1.7. Representaciones Física y Química

Los desarrollos teóricos de modelos de gases pueden ser clasificados en dos categorías, las llamadas representaciones física y química.

En la *representación física*, los electrones y núcleos atómicos son considerados partículas fundamentales (especies independientes) que interactúan a través de potenciales de Coulomb. El estado del fluido se obtiene resolviendo la correspondiente ecuación de Schrödinger del sistema como un todo. Se utilizan teorías basadas en mecánica estadística cuántica, de las que se obtiene un espectro de autovalores de energía como función paramétrica de la densidad del fluido. A partir de los resultados y cuando las condiciones físicas del sistema lo permiten se podrán identificar estados electrónicos ligados, que forman átomos y moléculas, y estados electrónicos libres. Este procedimiento resuelve los problemas cuántico y mecánico-estadístico simultáneamente. El modelo de fluido más usado actualmente en astrofísica dentro de la representación física se conoce como OPAL (Rogers *et al.* 1996). El mismo está orientado al estudio de interiores estelares. Otros modelos fueron desarrollados por Ebeling *et al.* (1985); Holst *et al.* (2008); Wang *et al.* (2010).

En la *representación química*, los átomos, moléculas, iones y electrones libres son considerados partículas elementales del sistema termodinámico. Así pues, se asume de antemano que partículas compuestas retienen sus identidades tales como las conocemos de modelos atómicos y moleculares. Se considera además que las interacciones son de a pares con potenciales específicos para cada clase de par. El método equivale a resolver primero el problema cuántico correspondiente a átomos y moléculas perturbados, y posteriormente el problema mecánico-estadístico para un conjunto prefijado de especies químicas, de donde se obtiene finalmente la termodinámica del sistema. Algunos trabajos basados en la representación química son: Mihalas *et al.* (1988); Saumon *et al.* (1992); Potekhin (1996); Holst *et al.* (2007).

Las ventajas y desventajas de estas representaciones son sintéticamente las siguientes.

Representación física.

- *Es un método formalmente exacto.*
- *Se pueden utilizar potenciales de interacción realistas, sin necesidad de introducir aproximaciones.*
- *Aún no ha sido aplicado a las temperaturas y densidades en las que ocurre el fenómeno de ionización por presión, debido a que las teorías físicas están basadas en expansiones las cuales no convergen en estas condiciones.*
- *Es difícil aplicar en problemas realistas debido a que el conjunto de ecuaciones a resolver es sumamente complejo, a menos que se realicen aproximaciones considerables.*

Representación química.

- *Ofrece la posibilidad de aplicar técnicas mecánico-estadísticas versátiles, por ejemplo el método de minimización de la energía libre de Helmholtz que se verá en el Capítulo 4.*
- *Es una alternativa útil ante las limitaciones prácticas de la representación física para densidades inferiores a la de ionización por presión.*

- Tiene consistencia microscópica limitada en condiciones próximas a la ionización por presión. En ese caso no provee un tratamiento adecuado para configuraciones grupales tales como formas cuasi-moleculares (Hummer & Mihalas (1988), Sec. IV), o estados electrónicos débilmente ligados (Fig. 1.8).

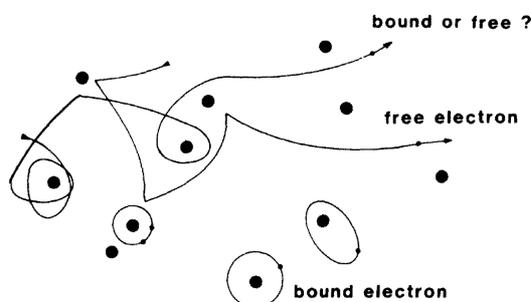


Figura 1.8: *Historias de electrones en un plasma: ¿cuáles son libres y cuáles son ligados?* (Tomada de Busquet 1982).

- A densidades en las que ocurre el efecto de ionización por presión, átomos y moléculas pierden su identidad debido a que sus electrones se vuelven no localizados, consecuentemente las interacciones de a pares entre partículas con estructura electrónica comienzan a perder su significado (similar a lo que se observó en la Fig. 1.7).

En el siguiente capítulo describiremos el método de minimización de la energía libre de Helmholtz, ampliamente utilizado en la representación química.

Capítulo 2

Método de Minimización de la Energía Libre de Helmholtz

En equilibrio termodinámico (ET) un modelo de gas queda caracterizado con su ecuación fundamental (EF¹) (Callen 1981; Reichl 1998). La EF es una relación funcional entre variables de estado (térmicas, mecánicas, químicas, etc.) la cual contiene toda la información termodinámica del sistema. Existen distintas representaciones formalmente equivalentes para la EF como son la entrópica, la energética, y otras basadas en potenciales termodinámicos (energía libre de Helmholtz, potencial de Gibbs, entalpía, etc.). La elección de una representación depende del conjunto de variables termodinámicas independientes que resultan convenientes para un problema dado. En el estudio de interiores y envolturas estelares suelen adoptarse como variables independientes la temperatura T , el volumen V y las poblaciones de partículas $\{N_{\alpha ij}\}^2$ (Griem 1962). En ese caso la EF es representada por la energía libre de Helmholtz $A(T, V, \{N_{\alpha ij}\})$.

El método de minimización de la energía libre de Helmholtz (*A-min*) es uno de los más usados dentro de la llamada representación química. Fue desarrollado originalmente por Harris [Harris (1959, 1962, 1964); Harris *et al.* 1960] y ha resultado ser una herramienta poderosa y flexible para el desarrollo de modelos de fluidos destinados al estudio de envolturas estelares (Graboske *et al.* 1969; Fontaine *et al.* 1977, Magni *et al.* 1979; Hummer & Mihalas 1988; Potekhin 1996; Winisdoerffer & Chabrier 2005).

En las siguientes secciones describiremos los aspectos generales del *A-min*, que como veremos permite cierta libertad de elección en los términos de energía libre que intervienen en el modelo de un gas. En la Sec. 2.3 particularizaremos *A-min* en la forma adoptada por Hummer & Mihalas (1988) que es la más usada en la actualidad en el cálculo de modelos detallados de atmósferas estelares.

2.1. Estado de Equilibrio

La aproximación del *A-min* es particularmente simple. Dado un modelo matemático para la energía libre $A(T, V, \{N_{\alpha ij}\})$ de un sistema, el equilibrio químico de una mezcla es obtenido por minimización de A a valores fijos de V y T , sujeto a las condiciones estequiométricas impuestas por las reacciones químicas que tienen lugar en el sistema. En particular, si consideramos un proceso de excitación/des-excitación $j \rightleftharpoons j'$ para una determinada especie α y

¹Es importante aclarar que en la literatura astrofísica suele usarse el nombre EOS (*siglas en Inglés de ecuación de estado*) a lo que aquí nos referimos como EF.

²Desglosadas en especies α , estado de ionización i y estado interno j .

en un dado estado de ionización i , la minimización de A se expresa

$$\frac{\partial A}{\partial N_{\alpha ij}} dN_{\alpha ij} + \frac{\partial A}{\partial N_{\alpha ij'}} dN_{\alpha ij'} = 0. \quad (2.1)$$

Luego, por conservación del número de partículas $dN_{\alpha ij} = -dN_{\alpha ij'}$, el equilibrio de excitación para el modelo de energía libre adoptado será dado por

$$\frac{\partial A}{\partial N_{\alpha ij}} = \frac{\partial A}{\partial N_{\alpha ij'}}. \quad (2.2)$$

Procediendo de manera similar y teniendo en cuenta la conservación de la carga total, un proceso de ionización/recombinación $i \rightleftharpoons (i+1) + e$ conduce a la siguiente ecuación

$$\frac{\partial A}{\partial N_{\alpha i}} - \frac{\partial A}{\partial N_{\alpha(i+1)}} - \frac{\partial A}{\partial N_e} = 0. \quad (2.3)$$

En el caso de un proceso de disociación/recombinación $\alpha\alpha' \rightleftharpoons \alpha + \alpha'$, se obtiene

$$\frac{\partial A}{\partial N_{\alpha\alpha'}} - \frac{\partial A}{\partial N_{\alpha}} - \frac{\partial A}{\partial N_{\alpha'}} = 0. \quad (2.4)$$

La resolución numérica simultánea de los sistemas de ecs. (2.2), (2.3) y (2.4) provee las poblaciones en el equilibrio $\{N_{\alpha ij}\}$. En el caso especial de considerar un gas ideal, este conjunto de ecuaciones conduce respectivamente a las leyes de excitación de Boltzmann, de ionización de Saha y de disociación, esta última conocida en física como ley de acción de masas.

Por otro lado, como bien sabemos, la diferenciación parcial de A respecto a cada una de sus variables independientes produce distintas ecuaciones de estado. En especial se obtienen las relaciones termodinámicas

$$\begin{aligned} P(T, V, \{N_{\alpha ij}\}) &= - \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_{\{N_{\alpha ij}\}, T}, \\ S(T, V, \{N_{\alpha ij}\}) &= - \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_{\{N_{\alpha ij}\}, V}, \\ U(T, V, \{N_{\alpha ij}\}) &= -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{A}{T} \right)_{\{N_{\alpha ij}\}, V}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

las cuales permiten calcular la presión, la entropía y la energía interna como función de las variables de estado independientes.

2.2. Aspectos Generales del A -*min*

La representación química combinada con el A -*min* representa un compromiso razonable entre el tratamiento riguroso y la aplicación práctica en el estudio de fluidos. En general, se toman en cuenta un conjunto de hipótesis de trabajo y de aproximaciones. En especial, se considera un gas a densidad baja o moderada ($\rho \lesssim 1 \text{ g cm}^{-3}$) y a temperatura alta ($T \sim 10^4$ - 10^7 K). Se utiliza además el ensamble canónico (Reichl 1998), con lo cual el potencial termodinámico A se obtiene a través de una descripción microscópica por intermedio de la llamada función de partición del sistema (Z),

$$A(T, V, \{N_{\alpha ij}\}) = -\frac{1}{\beta} \ln [Z(T, V, \{N_{\alpha ij}\})], \quad (2.6)$$

donde $\beta = \frac{1}{kT}$. La hipótesis fundamental del método *A-min* es poder expresar la función de partición Z como una factorización en partes traslacional o cinética (Z_{tras}), configuracional (Z_{conf}) e interna (Z_{int}),

$$Z = Z_{tras}Z_{conf}Z_{int}. \quad (2.7)$$

A continuación pasaremos a describir brevemente las cuatro aproximaciones que asume esta técnica en su forma más habitual para que sea posible tal factorización.

1^{er} Aproximación: Z se expresa como una integral en el espacio de fases $(\vec{r}^N; \vec{p}^N)$ que contiene el Hamiltoniano clásico (H) del sistema de N partículas,

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{h^{3N}} \frac{1}{N!} \int d\vec{r}^N d\vec{p}^N e^{-\beta H(\vec{r}^N, \vec{p}^N)}, \\ \vec{r}^N &= (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l, \dots, \vec{r}_N), \\ \vec{p}^N &= (\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_l, \dots, \vec{p}_N), \end{aligned} \quad (2.8)$$

siendo \vec{r}_l y \vec{p}_l los vectores posición y momento lineal de la partícula l . Esta expresión de Z es válida si se cumple la desigualdad

$$\lambda_T n \ll 1,$$

donde

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}$$

es la longitud de onda térmica, n la densidad de partículas y m la masas de éstas. En caso contrario, la naturaleza cuántica de las partículas empieza a ser importante en la EF y la ec. (2.8) deja de ser válida.

2^{da} Aproximación: el Hamiltoniano del sistema es separable

$$H(\vec{r}^N, \vec{p}^N) = \sum_{l=1}^N \frac{\vec{p}_l^2}{2m_l} + \Phi(\vec{r}^N) + \sum_{l=1}^N \varepsilon_l(\vec{r}^N), \quad (2.9)$$

el primer sumando en el segundo miembro de esta igualdad es la contribución cinética, Φ es la energía de interacción total en el gas y el último término considera que las partículas pueden tener grados de libertad internos con energías ε_l . En (2.9) se admite explícitamente que la parte cinética del Hamiltoniano está desacoplada de la de interacción.

3^{er} Aproximación: sólo interacciones de a pares de partículas se consideran importantes, por lo que la energía de interacción se puede escribir como

$$\Phi(\vec{r}^N) = \sum_{l < l'=2}^N u_{l,l'}(\vec{r}_l, \vec{r}_{l'}), \quad (2.10)$$

siendo $u_{l,l'}$ el potencial de interacción entre las partículas l y l' .

4^{ta} Aproximación: los autovalores de energía no dependen de las posiciones de las partículas en el gas, $\varepsilon_l \neq \varepsilon_l(\vec{r}^N)$. Esto no es estrictamente válido, pero es necesario para facilitar los cálculos. Físicamente, esto es aceptable si el potencial Φ genera sólo pequeñas perturbaciones

en los niveles de energía.

Con estas cuatro aproximaciones, la función de partición resulta

$$\begin{aligned}
 Z = & \underbrace{\frac{1}{h^{3N}} \int \exp\left(-\beta \sum_{l=1}^N \frac{\vec{p}_l^2}{2m_l}\right) \prod_{l=1}^N d\vec{p}_l}_{Z_{tras}} \times \underbrace{Z_{int} Z_{rot} Z_{vib} Z_{rot-vib}}_{interna} \\
 & \times \underbrace{\frac{1}{N!} \int \exp\left(-\beta \sum_{l<l'} u(\vec{r}_l, \vec{r}_{l'})\right) \prod_{l=1}^N d\vec{r}_l}_{Z_{conf}},
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

donde Z_{rot} y Z_{vib} tienen en cuenta grados de libertad rotacionales y vibracionales en el caso de moléculas, y $Z_{rot-vib}$ es una corrección que toma en cuenta que estos grados de libertad no son independientes. La expresión (2.11) considera partículas de una única especie, pero su generalización a mezclas es inmediata.

Reemplazando (2.11) en (2.7) obtenemos:

$$A = A_{tras} + A_{conf} + A_{int}. \tag{2.12}$$

La descripción termodinámica del sistema estará completa si conocemos cada uno de los términos de la ec. (2.12). Es importante enfatizar que el *A-min* no pone restricción alguna de cómo se evalúan tales términos, característica que lo hace un método muy flexible.

El modelo de EF resultante del *A-min* es siempre termodinámicamente consistente aunque no siempre mecánico-estadísticamente consistente. Consistencia mecánico-estadística se refiere al modelo usado para la física microscópica del gas y se relaciona con el requerimiento que las fuerzas que modifican la estructura interna de átomos y/o moléculas (con sus consecuencias sobre Z_{int}) deben ser tratadas apropiadamente en la parte configuracional de la función de partición (Z_{conf})³. En contraste, se habla de consistencia termodinámica si los potenciales termodinámicos cumplen las relaciones de Maxwell (Callen 1981, Cap. 7).

Una ventaja del *A-min* es que permite el tratamiento de todos los efectos no-ideales simultáneamente y las mejoras sistemáticas teóricas de cualquiera de los términos en la ec. (2.12) se pueden incorporar fácilmente sin alterar el resto del modelo. En este sentido, la finalidad del presente trabajo es contribuir en el desarrollo de un modelo de gas que posea mayor consistencia microscópica en la evaluación de los términos A_{conf} y A_{int} que los modelos actualmente en uso (Capítulo 4).

2.3. Método de Hummer & Mihalas

Presentamos a continuación la forma de *A-min* adoptada por Hummer & Mihalas (H-M) que se aplica a gases dentro de los siguientes límites: $T \lesssim 10^7$ K y $\rho \lesssim 10^{-2}$ g cm⁻³ (Hummer & Mihalas 1988). La energía libre de Helmholtz consta de cuatro términos

$$A = \sum_{l=1}^4 A_l. \tag{2.13}$$

³Dos ejemplos simples de consistencia mecánico-estadística son: 1) si las partículas no interactúan (gas ideal), $u=0$ por lo tanto las energías internas ε_l deben ser las del átomo aislado; 2) en el caso de partículas que interactúan eléctricamente según el modelo de Debye-Hückel, estas energías ε_l deben ser calculadas con el correspondiente potencial atómico interno u_D (Sec. 1.6.2).

El término A_1 se refiere a la contribución cinética aportada por el total de partículas clásicas en el gas, entre las cuales se excluyen a los electrones libres. De acuerdo a la estadística de Maxwell-Boltzmann se expresa en la forma

$$A_1 = -\frac{1}{\beta} \sum_{\alpha} N_{\alpha} \left\{ 1 + \ln \left(\frac{g_{\alpha}}{n_{\alpha} \lambda_{T,\alpha}^3} \right) \right\}, \quad (2.14)$$

la suma sobre α comprende todas las especies de partículas clásicas y g_{α} es el peso estadístico debido al spin. El término A_2 corresponde a la contribución cinética de los electrones libres, los cuales se consideran partículas no relativistas pero se admite la posibilidad de que presenten degeneración cuántica. Por medio de la estadística de Fermi-Dirac resulta

$$A_2 = -\frac{N_e}{\beta} \left(\frac{2I_{3/2}(\eta)}{3I_{1/2}(\eta)} - \eta \right), \quad (2.15)$$

$$I_{\nu}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{x^{\nu} dx}{e^{x-\eta} + 1},$$

donde I_{ν} es la integral de Fermi-Dirac de orden ν y η el parámetro de degeneración relacionado al potencial químico μ_e de fermiones ideales, $\eta = \mu_e/kT$. El término A_3 toma en cuenta la energía configuracional que procede de interacciones Coulombianas entre partículas cargadas de acuerdo al modelo de Debye-Hückel modificado. La diferencia que posee este modelo respecto del modelo clásico (Sec. 1.6.2) es que incluye la estadística de Fermi-Dirac para los electrones libres, mientras que los iones son tratados clásicamente. El resultado es

$$A_3 = -\frac{1}{3\beta} \sum_{\alpha} N_{\alpha} \Lambda \tau(x), \quad (2.16)$$

$$\Lambda = 2\pi^{1/2} e^3 \beta^{3/2} \left(\sum_{\alpha} Z_{\alpha}^2 n_{\alpha} \theta_{\alpha} \right)^{1/2},$$

$$x = r_{min}/D_F,$$

$$D_F = \left(4\pi e^2 \beta \sum_{\alpha} Z_{\alpha}^2 n_{\alpha} \theta_{\alpha} \right)^{-1/2},$$

donde la suma sobre α comprende sólo especies de partículas con carga eléctrica, Λ es el parámetro de interacción del plasma con $\theta_{\alpha}=1$ para iones y $\theta_e = I_{-1/2}(\eta)/I_{1/2}(\eta) \leq 1$ para electrones, la función $\tau(x)$ es una corrección que tiene en cuenta el tamaño finito de los iones, r_{min} es la distancia de mínimo acercamiento entre partículas, y D_F es la longitud de Debye generalizada. Este modelo para A_3 permite cálculos de precisión razonable para $\Lambda \lesssim 0.5$ y $\eta \lesssim 2$ (Graboske *et al.* 1971).

Los términos de energía considerados hasta acá son similares a los de los trabajos clásicos publicados con anterioridad (Harris *et al.* 1960; Graboske *et al.* 1969). La novedad del método H-M radica en la forma de evaluar la energía libre interna A_4 . Esta se realiza por medio de una función de partición interna modificada (Sec. 1.5),

$$\tilde{Z}_{int} = \sum_j w_j g_j \exp(-\beta \epsilon_j), \quad (2.17)$$

donde el factor de peso adicional w_j se conoce como coeficiente de probabilidad ocupacional del nivel j y representa la probabilidad de encontrar a un átomo (molécula o ión) en el estado

j relativa a la probabilidad de encontrarlo en un sistema similar compuesto por partículas no interactuantes. Primeras evaluaciones de w_j fueron realizadas por Fermi (1924), Urey (1924), Fowler (1936), entre otros. Los autovalores ε_j que se utilizan en la evaluación de \tilde{Z}_{int} son los correspondientes a átomos aislados. Para cada especie química α y con grado de ionización i hay una expresión de $\tilde{Z}_{int}^{\alpha i}$. Entonces, en el caso de una sustancia simple

$$A_4 = -\frac{N}{\beta} \ln \tilde{Z}_{int}. \quad (2.18)$$

La flexibilidad del método *A-min* permite calcular los factores w_j mediante la expresión

$$w_j = \exp \left(-\beta \frac{\partial \tilde{A}}{\partial N_j} \right), \quad (2.19)$$

donde \tilde{A} es un término de energía libre que incluye todas las interacciones que perturban a los estados internos de átomos o moléculas. La interpretación probabilística de w_j permite combinar la acción de interacciones estadísticamente independientes, como aquellas originadas por partículas neutras (átomos, moléculas) y cargadas (iones, electrones, etc.). Para el primer tipo se utiliza el modelo de esferas duras, obteniéndose $w_j^{neutras}$. Para el segundo tipo, el factor resultante $w_j^{cargadas}$ se calcula con la distribución de intensidad del micro-campo eléctrico producido por las partículas cargadas⁴. Así

$$w_j = w_j^{neutras} \times w_j^{cargadas} \quad (2.20)$$

y todos los efectos de ambos modelos de interacción resultan contenidos en \tilde{Z}_{int} .

Reuniendo todos los resultados precedentes, la energía libre total en el método H-M se expresa

$$A = -\frac{1}{\beta} \sum_{\alpha \neq e} N_\alpha \left\{ 1 + \ln \left(\frac{g_\alpha}{n_\alpha \lambda_{T,\alpha}^3} \right) \right\} - \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha \neq e, i} N_{\alpha i} \ln \tilde{Z}_{int}^{\alpha i} \quad (2.21)$$

$$- \frac{N_e}{\beta} \left(\frac{2}{3} \frac{I_{3/2}(\eta)}{I_{1/2}(\eta)} - \eta \right) - \frac{1}{3\beta} \sum_{\alpha} N_\alpha \Lambda \tau(x).$$

La EF (2.21) posee cierto grado de consistencia mecánico-estadística. La introducción de los coeficientes de probabilidad ocupacional producen una transición continua y físicamente razonable entre estados atómicos débilmente ligados y libres. Esto asegura una respuesta continua y suave de todas las propiedades termodinámicas del gas ante la acción de los efectos no-ideales. Además, los coeficientes w_j son continuos y monótonamente decrecientes si la intensidad de las interacciones aumenta, así proveen tanto un corte natural y suave a la función de partición interna como también una representación plausible del efecto de ionización y de disociación por presión.

Como un ejemplo, en la Fig. 2.1 (*izquierda*) se grafican los factores w_j en función de la presión del gas para H y H₂, en condiciones que acontecen en la atmósfera de una estrella enana blanca con una masa de 0.292M_⊙ y $T_{ef} = 2500\text{K}$. Allí vemos cómo los estados menos excitados del H y H₂ son perturbados con el aumento de la presión, mientras que los estados más excitados del H son fácilmente destruidos.

⁴Originalmente se usó la distribución de Holtmark (1919). Una distribución más apropiada, la cual incluye efectos de correlación entre las partículas, fue presentada por Nayfonov *et al.* (1999).

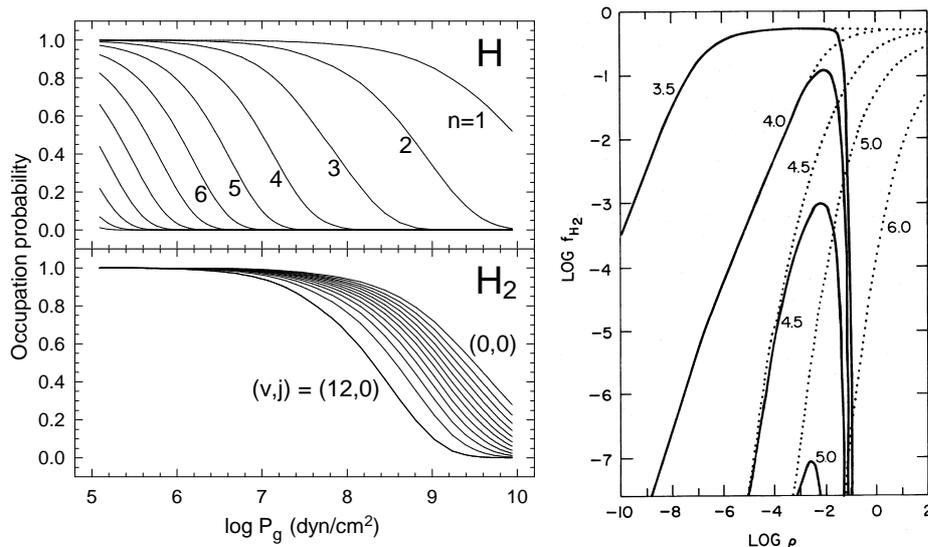


Figura 2.1: Izquierda: Probabilidad ocupacional de los niveles más bajos del H y estados vibracionales v más bajos del H₂ ($0 \leq v \leq 12$, estado de excitación fundamental y número cuántico rotacional $j = 0$). (Tomado de Rohrmann *et al.* 2002).

Derecha: Fracción de hidrógeno molecular $f_{H_2} \equiv N(H_2)/(\text{número total de átomos de H})$ en función de la densidad. Equilibrio predicho por H-M (curvas sólidas), equilibrio predicho por Saha (curvas de puntos). Todas las curvas están señaladas con el valor $\log T$. (Tomado de Mihalas *et al.* 1988).

A su vez, la Fig. 2.1 (*derecha*) muestra resultados obtenidos por Mihalas *et al.* (1988). Allí observamos la dependencia de la fracción f_{H_2} de moléculas H₂ con la densidad para distintas temperaturas, calculadas por el método H-M (líneas continuas) y la ley de disociación de Saha (líneas punteadas). A densidades suficientemente altas el estado de equilibrio según la fórmula de Saha es de total recombinación para todas las temperaturas, lo cual es físicamente absurdo. Por el contrario, H-M predice completa ionización, como consecuencia de las fuertes interacciones entre las partículas.

2.4. Pseudo-Continuo

Es bien conocido que las atmósferas de estrellas enanas blancas se caracterizan por poseer altas densidades (tan altas como $\rho \approx 0.1 \text{ g cm}^{-3}$). En estas condiciones los niveles atómicos más bajos permanecen no perturbados, de manera que el equilibrio químico no es seriamente afectado por efectos no-ideales. Sin embargo, las interacciones entre partículas tienden a destruir los niveles más altos y afectan los límites de las series de líneas espectrales. Como consecuencia la opacidad continua originada de fotoionizaciones avanza hacia longitudes de onda largas más allá del límite de una serie de líneas, formando lo que se conoce como pseudo-continuo (Däppen *et al.* 1987; Hubeny *et al.* 1994). Este avance de la opacidad continua es importante en enanas blancas (Bergeron *et al.* 1991).

La Fig. 2.2 muestra espectros de enanas blancas con atmósferas de H en la región de la serie de Balmer calculados con modelos que incluyen la teoría H-M. Dos espectros fueron determinados despreciando la opacidad de líneas para ilustrar la importancia de la opacidad del pseudo-continuo. Usando el modelo de gas ideal, la distribución de energía muestra una discontinuidad de Balmer abrupta (*curva de segmentos*). La inclusión de la opacidad del pseudo-continuo calculada con un modelo óptico de Däppen *et al.* (1987) que se basa en la teoría H-M, extiende las absorciones hacia longitudes de onda más largas (*curva de puntos*), proporcionando así un cambio marcado en el espectro continuo. El efecto producido

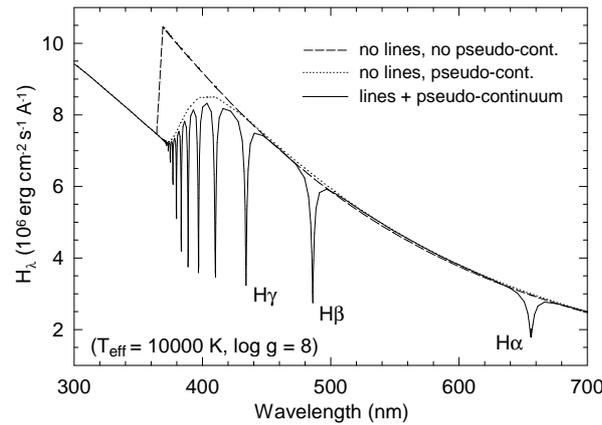


Figura 2.2: Flujos emergentes en la región de la serie de Balmer calculados con diferentes simplificaciones en las fuentes de opacidad, para un modelo de atmósfera de enana blanca con temperatura efectiva (T_{eff}) y gravedad superficial (g) indicadas en la ilustración. (Tomado de Rohrmann et al. 2002).

por el pseudo-continuo se debe a que el umbral de energía de ionización es menor para un átomo perturbado que para un átomo aislado⁵. Cuando se incluye la opacidad de las líneas espectrales, se observa que el espectro en la región donde las líneas se superponen está completamente dominado por la opacidad del pseudo-continuo (*curva continua*). Por otro lado, la intensidad de las líneas altas de la serie de Balmer se reducen como resultado de la baja probabilidad ocupacional de los estados finales en las transiciones ligado-ligado.

Al estudiar enanas blancas con atmósferas ricas en H más frías que $T_{\text{eff}} \sim 17000\text{K}$, donde gran parte del H se encuentra ocupando el nivel fundamental, el formalismo de probabilidad ocupacional de H-M no produce resultados satisfactorios. Más específicamente, la opacidad del pseudo-continuo predicha para el nivel $j = 1$ no es físicamente aceptable (Bergeron et al. 1997; Bergeron 2001). De ser correcta la simulación óptica de Däppen et al., la misma implicaría que la opacidad del pseudo-continuo de Lyman domina todas las otras fuentes de opacidad hasta las longitudes de onda tan largas como el infrarrojo (ver Fig. 4 de Bergeron 2001). Es de esperar que también exista una sobre evaluación de las opacidades de los pseudo-continuos de Balmer y Paschen pero de una magnitud mucho menor. Es posible que estos defectos en el cálculo de los pseudo-continuos se deban a un inadecuado uso del formalismo H-M por parte de Däppen et al. (1987). En forma sintética, en la simulación óptica de Däppen et al. se asume la existencia de fracciones de átomos con niveles de energía perturbados, mientras que el formalismo de H-M ha sido desarrollado para especies de partículas con niveles de energía no perturbados. En especial, la población atómica que contribuye a la absorción de un pseudo-continuo es sobre evaluada, porque las abundancias de átomos perturbados son calculadas con energías internas inferiores que aquellas asumidas en sus transiciones radiativas al continuo (Rohrmann et al. 2002).

El problema de los pseudo-continuos es aún hoy un problema abierto. Éste fue el motivo por el cual se desarrolló un nuevo modelo de gases que combina la técnica *A-min* con particiones del espacio. Es parte del objetivo del presente trabajo contribuir a este formalismo que será descrito en el Capítulo 4. Previamente, en el siguiente capítulo describiremos algunos ejemplos de estudios basados en la subdivisión de espacios para colecciones de objetos.

⁵Este efecto es el que intentan reproducir los modelos de átomo confinado y de átomo con potencial interno de Debye-Hückel, Secs. 1.6.1 y 1.6.2.

Capítulo 3

Estadística Espacial

Una propiedad fundamental de una colección de objetos es el reparto del espacio ocupado por ellos. La estadística espacial, entre otras cosas, se ocupa del análisis de esta propiedad que es de importancia para el estudio de una variedad de sistemas físicos. Es de particular interés para nosotros saber cómo se distribuyen en el espacio las partículas de un fluido en equilibrio. En este sentido, en el Capítulo 4 presentaremos el método de partición del espacio orientado a la descripción de fluidos astrofísicos, el cual es un desarrollo mecánico-estadístico que toma en cuenta la distribución del espacio físico entre las partículas. En el actual capítulo revisaremos conceptos que utilizaremos más adelante, presentaremos antecedentes de modelos de fluidos con particiones del espacio ya existentes, y mostraremos resultados de investigaciones que incluyen distribuciones espaciales de objetos en la naturaleza.

Si en un instante dado observamos la distribución espacial de partículas de un gas, vemos que ésta es desordenada aún en equilibrio termodinámico. Es decir, aunque la distribución espacial de partículas en ausencia de fuerzas externas es homogénea desde el punto de vista macroscópico, a escala microscópica es espacialmente heterogénea. Un ejemplo se puede observar *arriba a la izquierda* en la Fig. 3.1, que muestra una colección de partículas distribuidas de forma aleatoria en una superficie. Allí notamos que algunas partículas están separadas de su vecino más cercano por una distancia pequeña, mientras que otras partículas están alejadas de sus vecinos más cercanos.

Si se desea realizar una división del espacio ocupado por una colección de objetos en un conjunto de celdas imaginarias, donde a cada objeto se le asigna una celda que da idea o tiene en cuenta la cercanía de sus vecinos más cercanos, podemos imaginar varias posibilidades. Una posibilidad intuitiva y probablemente la más conocida es la partición de espacio de Voronoï. La celda de Voronoï de un determinado objeto se define como el conjunto de puntos en el espacio que se encuentran más cerca de dicho objeto que de cualquier otro de la colección. El conjunto completo de celdas de Voronoï forman lo que se conoce como diagrama de Voronoï. Un ejemplo se observa en la Fig. 3.1 (*arriba a la derecha*), que corresponde a la muestra de partículas incluidas en el recuadro de la imagen superior izquierda.

La distribución espacial de las partículas en un gas depende del tipo de fuerzas de interacción entre ellas. En el caso del gas ideal, su distribución en el equilibrio es representada por una distribución o proceso de Poisson, también llamada distribución aleatoria (como se muestra en el panel superior izquierdo de la Fig. 3.1). Gases formados por partículas interactuantes se caracterizan por diseños espaciales diferentes. Por ejemplo, los *paneles inferiores* en la Fig. 3.1 muestran las distribuciones que adquiere un fluido formado por discos duros a distintas densidades. A mayor densidad (panel inferior derecho) el diseño espacial se torna más regular.

Existen un conjunto de herramientas matemáticas que se han desarrollado para el análisis

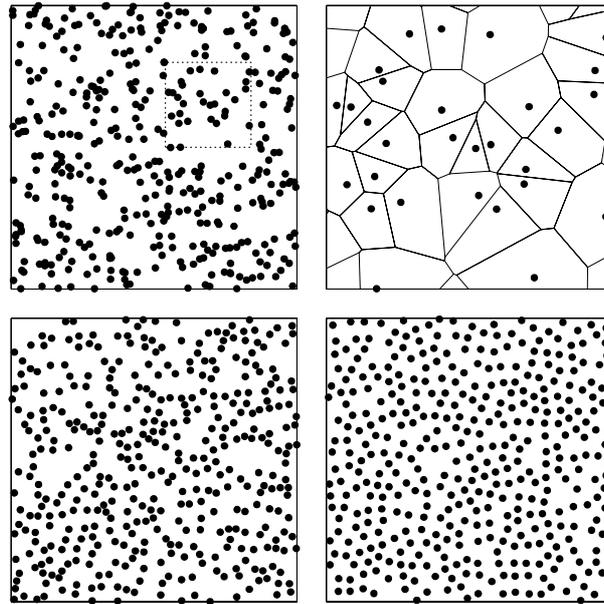


Figura 3.1: *Panel superior izquierdo: distribución de Poisson de 400 puntos en un plano. Panel superior derecho: diagrama de Voronoi para una distribución de Poisson. Paneles inferiores: diseño espacial de un fluido de discos duros a baja (izquierda) y alta densidad (derecha). (Tomado de Rohrmann 2005)*

de la estructura espacial de colecciones de objetos. Aquí introduciremos algunos de los conceptos más elementales. Supongamos que observamos la configuración de un fluido formado por N partículas clásicas en un volumen V . La probabilidad que una partícula (cualquiera) se encuentre dentro del elemento de volumen $d\vec{r}_1$ ubicado en la posición \vec{r}_1 , a su vez una segunda partícula se encuentre dentro de $d\vec{r}_2$ ubicado en \vec{r}_2 , etc., es dada por

$$P^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l) d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_l, \quad (3.1)$$

donde $P^{(l)}$ es la función distribución de densidad de probabilidad que describe al fluido. Si la distribución de partículas responde a una distribución de Poisson (es decir, es completamente aleatoria), entonces

$$P^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l) d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_l = \frac{d\vec{r}_1}{V} \cdot \frac{d\vec{r}_2}{V} \cdots \frac{d\vec{r}_l}{V}. \quad (3.2)$$

Por lo tanto, para una distribución de Poisson resulta

$$P^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l) = \frac{1}{V^l}. \quad (3.3)$$

Por otro lado, si la probabilidad que una partícula cualquiera se encuentre dentro de un elemento de volumen $d\vec{r}_1$ ubicado en \vec{r}_1 es independiente de que otra partícula se encuentre dentro de $d\vec{r}_2$ en \vec{r}_2 , etc., entonces

$$P^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l) d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_l = [P^{(1)}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1] \cdots [P^{(1)}(\vec{r}_l) d\vec{r}_l]. \quad (3.4)$$

Una distribución de Poisson es por lo tanto necesariamente una distribución de probabilidades independientes. En cambio, no toda distribución independiente es de Poisson (por ejemplo, como ocurre para un gas ideal en un campo de fuerza externo). Cuando la distribución no es independiente es útil introducir la función distribución $g^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l)$ que

representa la cantidad en la cual $P^{(l)}$ se aparta del valor dado en la ec. (3.4). De este modo

$$P^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l) = P^{(1)}(\vec{r}_1) \cdots P^{(1)}(\vec{r}_l) g^{(l)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_l). \quad (3.5)$$

La función $g^{(l)}$ permite analizar la presencia de correlaciones en la ubicación de un conjunto de partículas. Por correlación se entiende que las probabilidades de encontrar partículas en determinadas posiciones están influenciadas en forma colectiva.

Las teorías de fluidos clásicos usualmente limitan su atención al estudio de correlaciones de a pares de partículas, donde se utiliza la función $g^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ que recibe el nombre de función distribución de pares (fdp) y se designa $g(\vec{r})$, donde $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. En muchos casos los fluidos son isotrópicos, en el sentido que la función $g^{(2)}$ sólo depende de la distancia entre el par de partículas $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, por lo cual

$$g(r) = g^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.6)$$

Para el gas ideal la fdp resulta $g(r) = 1$, es decir no hay correlaciones entre pares de partículas. La fdp porta información de la estructura de un fluido, además se puede determinar indirectamente para diversas sustancias por medio de experimentos de dispersión de rayos X, electrones y neutrones. Entre algunos de los experimentos pioneros en ese campo cabe citar Eisenstein & Gingrich (1942) y Gingrich (1943).

3.1. Aplicaciones

El estudio de la distribución espacial de objetos es de amplio interés en ciencias biológicas, sociales, matemáticas, físicas y astronómicas. En la siguientes secciones presentamos una muestra no exhaustiva pero si representativa de las múltiples aplicaciones que comprende el análisis de la subdivisión de espacios y de vínculos espaciales entre objetos.

3.1.1. Patrones Espaciales en la Flora y Fauna

El diseño de la distribución de una población de plantas o de animales es una característica fundamental de tal población. Las distribuciones exhibidas por las poblaciones de organismos vivientes en sus medios naturales incluye una enorme variedad de diseños. Esto responde a las diferentes habilidades y estrategias de dispersión y colonización de cada especie.

Los estudios realizados en este campo comprenden la obtención de datos de la distribución espacial de poblaciones naturales, y la utilización de distintos modelos matemáticos que buscan representar las fuerzas naturales que actúan en la formación de los diseños espaciales observados. La Fig. 3.2 muestra un ejemplo del diseño espacial de la flora en un bosque de la isla de Vancouver (Getzin *et al.* 2008).

Originalmente el estudio de la subdivisión espacial en flora fue abordado principalmente con la medición de la distancia de cada individuo a su vecino más cercano (Skellan 1952, Clark & Evans 1954). Esto motivó el estudio de distribuciones aleatorias basadas en procesos de Poisson bidimensionales, con el análisis de diferentes relaciones de vínculo entre objetos vecinos, vecino mutuo, vecino compartido, etc. (Clark 1956, Dacey 1969, Cox 1981, Schilling 1986). Más recientemente se está incorporando el uso de herramientas teóricas originalmente desarrolladas en teorías mecánico-estadística para líquidos. Por ejemplo, Getzin *et al.* (2008) aplican la función distribución de pares $g_{12}(r)$ con la cual miden la probabilidad de que una planta de tipo 1 se encuentre a una distancia r de una planta de tipo 2 (Fig. 3.2, derecha).

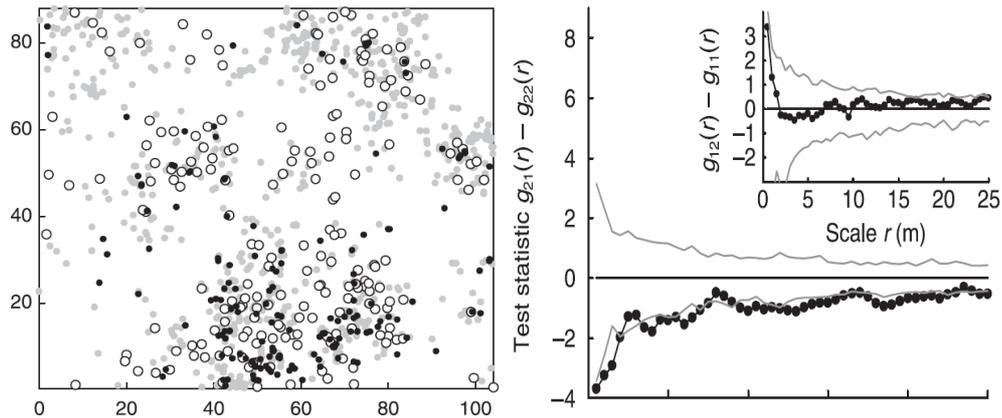


Figura 3.2: *Izquierda: Distribución espacial de árboles adultos (círculos vacíos), arbustos (puntos grises) y plantas menores (puntos negros) obtenidos para un bosque del sur de la isla de Vancouver. Derecha: Diferencias de funciones de distribución de pares $g_{21} - g_{22}$ obtenidas para la distribución espacial que se muestra en el panel izquierdo. (Ver Getzin et al. 2008).*

3.1.2. Redes Celulares Aleatorias

Una considerable atención ha recibido la aplicación de la estadística espacial en el estudio de la materia condensada topológicamente amorfa o desordenada. Esto abarca el campo de la cristalografía (Farjas & Roura 2008), agregados metalúrgicos o rocas graníticas (Sheppard *et al.* 2006), esponjas o espumas (Aste *et al.* 1996) y tejidos celulares (Mombach *et al.* 1990). Ejemplos de distribuciones desordenadas se muestran en la Fig. 3.3, donde en la *parte izquierda* se observa la estructura que adquiere una espuma, mientras que en la *parte derecha* la correspondiente a una sal fluvial.

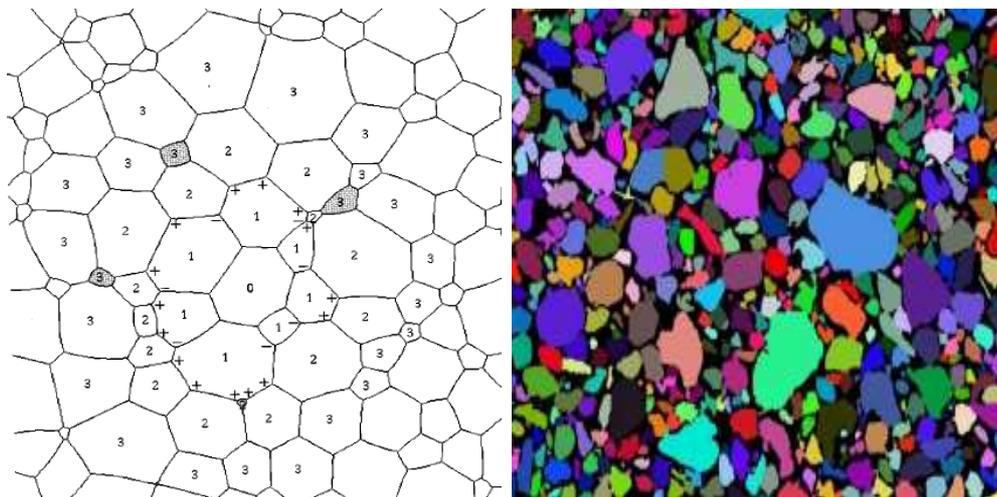


Figura 3.3: *Izquierda: Representación bidimensional de la estructura de una espuma. (Tomada de Aste et al. 1996). Derecha: Representación bidimensional del diseño formado por los granos de una sal fluvial. (Tomada de Sheppard et al. 2006).*

En esta clase de sistemas, la subdivisión de espacio consiste en un conjunto de regiones disjuntas creadas por un proceso de nucleación y crecimiento, y que generalmente cubre en forma completa el espacio ocupado por el sistema. La división del espacio se caracteriza por

medio de una función de probabilidad $f(s)$, la cual indica la probabilidad de que una celda posea un tamaño entre s y $s + ds$. La celda puede significar un grano en una roca porosa, una burbuja en una espuma, una célula en un tejido, etc., y suele caracterizarse por el tamaño pero también por los números de caras y de vértices. En sistemas que presentan evolución, la división del espacio puede incluir procesos de aparición, desaparición, división y coalescencia de celdas.

Los estudios de redes celulares aleatorias han dado lugar a un conjunto de leyes tales como la ley de Lewis sobre la estadística del área de las celdas, la ley de Neumann sobre la tasa de crecimiento de celdas de n -lados, la ley de escala sobre la distribución de probabilidad de las celdas, y la ley de Aboav-Weaire sobre la correlación del vecino más cercano. El uso de algoritmos de partición de poros espaciales constituye, por ejemplo, una herramienta útil para caracterizar la micro estructura de rocas que da información sobre las variaciones en el tamaño y forma de los granos, y sobre la eficiencia de su empaquetado en el material (Sherppard et al. 2006).

3.1.3. Modelos de Celdas para Fluidos

Un antecedente importante del uso de particiones del espacio en el estudio de fluidos es la llamada *teoría de celdas*, que está orientada principalmente a describir las propiedades termodinámicas de líquidos simples. Esta teoría fue desarrollada originalmente por Eyring & Hirschfelder (1937) y por Lennard-Jones & Devonshire (1937, 1938). Ambos estudios fueron elaborados con bases principalmente empíricas (tomando de ejemplo la estructura de celdas que adquieren algunos sistemas a altas densidades), y posteriormente fueron ubicadas sobre los principios generales de la mecánica estadística por medio de aproximaciones bien definidas, lo cual estuvo a cargo de Kirkwood (1950).

En términos simplificados, la teoría de celdas asume que la distribución espacial de partículas en un líquido o en un gas denso puede ser considerada como un arreglo regular, semejante al de un cristal, pero donde no existe orden a grandes distancias. Se considera un celdificado imaginario del espacio ocupado por el fluido, con una partícula confinada en cada celda pero libre de moverse en su interior. En esta teoría la división del espacio es preimpuesta y se establece una relación de propiedad entre regiones del espacio y las partículas. La imposibilidad de intercambio de partículas entre celdas introduce un error en la evaluación de la entropía del fluido, el cual se corrige introduciendo un factor llamado entropía comunal.

3.1.4. Distribución Espacial de Objetos Astronómicos

La mayor parte de la literatura astronómica que incluye estadística espacial de objetos está destinada a describir sistemas de relativamente grandes grupos de objetos, y es aplicada mayormente al estudio de la estructura del Universo en gran escala. Sin embargo, existen trabajos orientados al análisis de relaciones entre pocos vecinos próximos, por ejemplo en la búsqueda de objetos que suelen presentarse en pequeños grupos, siendo los sistemas estelares binarios el caso más común. Si se dejan de lado los estudios de la estructura del Universo y de grandes grupos de galaxias, los trabajos astronómicos sobre estadística espacial son muy variados y dispersos. Citamos como ejemplos, el estudio de la fragmentación de nubes interestelares basado en el uso de diagramas de Voronoi creados por procesos Poisson (Kiang 1966), el análisis de datos astronómicos en la búsqueda de fuentes de rayos X (Scott & Toud 1989) y binarias estelares de gran período (Bahcall & Soneira 1981), consideraciones teóricas

en la dinámica de sistemas estelares (Chandrasekhar 1943), y estudios de diseños espaciales en la granulación solar (Schrijver *et al.* 1997).

El diseño tridimensional formado por la distribución espacial de galaxias en el Universo ha sido descrito y cuantificado por distintos métodos. Entre ellos cabe citar la utilización de funciones de correlación y conteos en celdas (Peebles 1993); función de probabilidad de vacío (White 1979); espectro multifractal (Martínez *et al.* 1990); funcionales de Minkowski (Mecke *et al.* 1994); etc. A manera ilustrativa, la cantidad $J(r)$ evaluada por Kerscher *et al.* (1999) mide el grado de concentración espacial de objetos para una muestra en comparación con una distribución aleatoria o proceso de Poisson [$J(r) = 1$]. Su aplicación a una muestra de galaxias se presenta en la Fig. 3.4. La línea continua que cae fuera del área sombreada en la *parte izquierda* de la Fig. 3.4, corresponde a los valores de la función $J(r)$ para una muestra compuesta de 817 galaxias tomada del relevamiento Perseo-Piscis. Mientras que el área sombreada abarca valores de $J(r)$ para diferentes muestras producidas por procesos de Poisson usando el mismo número de puntos. Estos resultados son debidos a que la distribución de galaxias presenta una fuerte correlación que se manifiesta visualmente en la formación de grumos. Por otro lado, el diseño de la distribución espacial de galaxias es habitualmente estudiado teniendo en cuenta las estructuras de burbujas. El nombre burbuja hace referencia al siguiente hecho, el cual ha sido proporcionado por observaciones astronómicas. El espacio cósmico se compone en su mayor parte por grandes regiones vacías de galaxias, mientras que éstas parecen distribuirse en forma de cáscaras en las superficies de las regiones vacías. En la *parte derecha* de la Fig. 3.4 se puede apreciar una representación bidimensional de la estructura de burbujas que adoptan las galaxias, según una simulación que utiliza un modelo desarrollado por Yoshioka & Ikeuchi (1989).

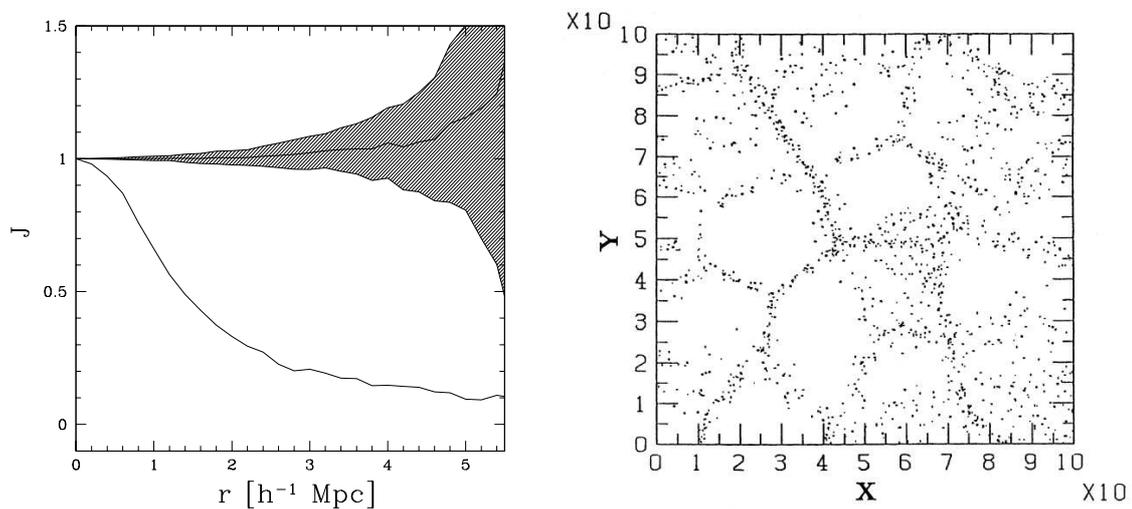


Figura 3.4: *Izquierda:* Cálculo del parámetro estadístico $J(r)$ como función de la distancia r (ver texto). La curva continua inferior muestra el resultado obtenido para la muestra de las galaxias PSS79, mientras que la región sombreada es el valor de $J(r)$ para diferentes procesos de Poisson. (Tomada de Kerscher *et al.* 1999).

Derecha: Resultados de una simulación que muestra la distribución espacial de galaxias en forma de burbujas. (Tomado de Yoshioka & Ikeuchi 1989).

Capítulo 4

Representación de Gases con Particiones del Espacio

En este capítulo nos referiremos al método de partición del espacio introducido en Rohrmann (2005) y Rohrmann & Zorec (2006), el cual fue desarrollado para la descripción de gases en equilibrio. Este método fue motivado por las dificultades que existen actualmente para predecir cuantitativamente las propiedades ópticas de las atmósferas estelares. En los modelos de gases convencionales como aquellos descritos en el Capítulo 2, la opacidad se obtiene a través de cálculos una vez que la ecuación fundamental (EF) y las poblaciones atómicas medias han sido determinadas. Este procedimiento puede producir inconsistencias internas en un modelo como hemos visto en la Sec. 2.4.

Por un lado, mientras algunas propiedades del gas (EF y funciones de respuesta, por ejemplo calores específicos) pueden ser determinadas a partir de las abundancias medias de partículas ($\{N_\alpha\}$), otras, tales como la emisividad y la opacidad, dependen del desglose de la población de cada especie α en estados internos de ionización i y de excitación j ($\{N_{\alpha ij}\}$). Más aún, como hemos mencionado en la Sec. 2.4, la opacidad en frecuencias próximas al límite de una serie espectral, por ejemplo, llega a ser dependiente de sub-grupos de cada población $N_{\alpha ij}$ caracterizados por el grado de perturbación al que se encuentran sometidas las partículas por las interacciones con sus vecinas. Por lo tanto es deseable avanzar en el desarrollo de un formalismo teórico que sea capaz de clasificar a los átomos y a las moléculas en subgrupos, según los diferentes grados de perturbaciones que experimenten.

El método de partición del espacio nace de estas consideraciones. Consiste en un desarrollo mecánico-estadístico para gases que toma en cuenta la distribución del espacio físico entre las partículas. La idea central y fundamental es que a cada partícula se le asigna un volumen v que describe en cierta forma el espacio libre de partículas alrededor de ella. Por lo tanto, v se relaciona estrechamente con la cercanía de las partículas vecinas, y es tratado como un parámetro configuracional en la descripción mecánica estadística del gas. De esta forma, una partícula con espacio v pequeño tendrá vecinos muy cercanos por lo que experimentará en promedio fuertes perturbaciones, mientras que una partícula estará aproximadamente aislada si tiene un espacio v grande. Por lo tanto, la variable v constituye una cantidad física que puede ser usada para clasificar poblaciones atómicas según el grado de perturbación que experimentan (simbólicamente $\{N_{\alpha jv}\}$). Esta descripción puede ofrecer un marco apropiado para el estudio de propiedades ópticas de gases no-ideales. Por lo pronto el método de partición del espacio ha sido desarrollado para fluidos de baja densidad y con modelos simples para las fuerzas de interacción entre partículas.

Presentamos a continuación los aspectos generales de la teoría estadística de fluidos desarrollada en Rohrmann (2005) y Rohrmann & Zorec (2006), con una readaptación del

cálculo de la energía de interacción (Rohrman 2008). La propuesta es construir un modelo de energía libre para gases que contenga una noción de espacio por partícula, luego analizar el estado de equilibrio y las propiedades termodinámicas del sistema.

4.1. Particiones del Espacio

Consideraremos en primer lugar un sistema simple. Sea entonces un gas formado por N partículas clásicas, idénticas y sin estructura interna que ocupan un recinto con D dimensiones espaciales y tamaño V . La región V es un segmento, una superficie o un volumen para $D=1, 2$ o 3 , respectivamente, aunque será llamado genéricamente volumen. El método de partición del espacio se basa en las siguientes hipótesis:

- La estructura de un gas en equilibrio puede ser descripta por alguna clase de partición del espacio N_v , donde a cada partícula se le asigna un volumen v . De esta manera, el estado del gas queda caracterizado por una distribución de momentos lineales $f_{\vec{p}}$ y una distribución de volúmenes N_v , siendo $f_{\vec{p}}d\vec{p}$ la fracción de partículas con momentos lineales entre \vec{p} y $\vec{p} + d\vec{p}$, $N_v dv$ el número de partículas con volúmenes entre v y $v + dv$, y $vN_v dv$ el volumen total asignado a estas últimas. Las funciones de distribución $f_{\vec{p}}$ y N_v físicamente aceptables deben cumplir las siguientes condiciones, conservación del número de partículas

$$N = \int_0^V N_v dv, \quad (4.1)$$

conservación del volumen

$$V = \int_0^V v N_v dv, \quad (4.2)$$

y normalización de la función distribución de momentos

$$\int f_{\vec{p}} d\vec{p} = 1. \quad (4.3)$$

- La distribución de espacio N_v que representa un estado de equilibrio es la más probable que cumple las condiciones (4.1) y (4.2), y puede ser inferida usando métodos de la mecánica estadística clásica (*A-min*).

Una definición exacta de v , llamado de aquí en más el volumen disponible (**vd**) de una partícula, no es trivial de antemano. Como veremos depende de la ley de interacción que siguen las partículas en el gas. Sin embargo, el estudio estadístico de la partición del espacio se puede llevar adelante considerando sólo las restricciones sobre N_v que proceden de las conservaciones del número de partículas y del volumen, postergando para una etapa posterior la definición exacta de v de acuerdo a las características del gas bajo consideración. Las condiciones (4.1) y (4.2) llevan consigo la afirmación de que el dominio de valores que puede adoptar v comprende desde 0 (partícula sin espacio libre alrededor) hasta V (partícula que posee un vd equivalente al volumen total asignado al gas). La condición (4.2) afirma que la suma sobre todos los vd debe ser igual a V , siendo la partición del espacio especificada por la distribución N_v .

El siguiente paso en la caracterización del método de partición del espacio es la especificación de la energía libre de Helmholtz tomando en cuenta la distribución N_v . Para ese fin expresamos la energía libre en la siguiente forma

$$A = U_{total} - TS_{total} = (K + \Phi) - T(S_{tras} + S_{conf}) \quad (4.4)$$

donde K , Φ representan la energía interna cinética y configuracional del gas, y S_{tras} y S_{conf} son las entropías cinética y configuracional. Describimos brevemente a continuación la evaluación de cada uno de estos términos.

4.1.1. Entropía

Según la mecánica cuántica, en un elemento de volumen del espacio de fases de una partícula existen $d\vec{l} = V d\vec{p}/h^3$ estados diferentes para la misma. Esto sugiere que el conjunto de estados que dispone una partícula con vd entre v y $v + dv$ y con momento lineal en un volumen $d\vec{p}$ del espacio de momentos alrededor de \vec{p} es $dv d\vec{p}/h^3 = dv d\vec{l}/V$, lo cual expresa que la fracción de estados configuracionales existentes entre v y $v + dv$ es dv/V , siendo $N_v dv$ el número de partículas en el gas que pueden acceder a estos estados. A partir de esto y siguiendo los métodos conocidos de evaluación de la mecánica estadística clásica, se obtiene la siguiente expresión para la entropía configuracional del gas

$$S_{conf} = -k \int_0^V N_v \ln \left(\frac{N_v V}{N} \right) dv. \quad (4.5)$$

La entropía de origen cinético es derivada por un procedimiento similar obteniéndose

$$S_{tras} = -k \int_0^V N_v \left[\ln \left(\frac{\lambda_T^D}{V} \right) - \frac{D}{2} \right] dv, \quad (4.6)$$

siendo λ_T la longitud de onda térmica de las partículas y D la dimensionalidad del espacio físico.

4.1.2. Energía Cinética

Es posible verificar que en la actual descripción estadística, la energía traslacional del gas en equilibrio es dada por la forma conocida

$$K = \frac{3N}{2\beta}. \quad (4.7)$$

4.1.3. Energía de Interacción y Funciones de Distribuciones de Pares

Para la evaluación de la energía de interacción se hace uso de las funciones de distribución de pares (fdp) ampliamente usadas en las teorías de líquidos y plasmas (Ichimaru 1982; Hansen & McDonald 1986; Hill 1987). Para la definición de las fdp consideremos una partícula arbitraria de referencia y un volumen esférico ω centrado en la misma. Sea $n = N/V$ la densidad de partículas del gas. Introducimos tres fdp que llamamos $g(\omega)$, $g_v(\omega)$ y $g_{vv'}(\omega)$ las cuales quedan definidas a partir de las cantidades que describimos a continuación:

- $ng(\omega)d\omega \equiv$ número medio de partículas ubicadas entre las superficies de ω y $\omega + d\omega$ de la partícula de referencia.
- $ng_v(\omega)d\omega \equiv$ número medio de partículas entre ω y $\omega + d\omega$ de una partícula de referencia con vd v .
- $n_{v'}g_{vv'}(\omega)dv'd\omega \equiv$ número medio de partículas con vd entre v' y $v' + dv'$ ubicadas entre ω y $\omega + d\omega$ de una partícula de referencia con vd v .

La función $g(\omega)$ corresponde a la fdp típicamente usada en teorías de líquidos, mientras que $g_v(\omega)$ y $g_{vv'}(\omega)$ son fdp condicionales pues los pares de partículas están seleccionados por una información adicional (los vd v y v'). Estas fdp condicionales han sido introducidas por el método de partición del espacio, siendo $g_{vv'}(\omega)$ particularmente útil para caracterizar la energía configuracional del gas.

Sea $u_{vv'}(\omega)$ la energía de interacción entre una partícula con vd v y otra partícula con vd v' ubicada en la superficie del volumen ω centrado en la primera partícula. Haciendo uso de la función $g_{vv'}(\omega)$, es posible evaluar la energía de interacción entre la partícula con vd v y los siguientes grupos de partículas:

- todas las partículas con vd entre v' y $v' + dv'$ ubicadas entre ω y $\omega + d\omega$

$$u_{vv'}(\omega)n_{v'}g_{vv'}(\omega)d\omega dv', \quad (4.8)$$

- todas las partículas con vd entre v' y $v' + dv'$ que hay en el gas

$$\int u_{vv'}(\omega)n_{v'}g_{vv'}(\omega)d\omega dv', \quad (4.9)$$

donde la integral se realiza sobre ω y abarca todo el volumen del gas,

- todas las partículas en el gas, para lo cual v' se integra entre 0 y V ,

$$\int_0^V \int u_{vv'}(\omega)n_{v'}g_{vv'}(\omega)d\omega dv'. \quad (4.10)$$

Para evaluar la energía de interacción total Φ sólo resta sumar las contribuciones sobre todas las partículas con vd v desde 0 a V ($\int_0^V N_v \dots dv$), y dividir por dos para evitar la doble contabilización de pares, el resultado es

$$\Phi = \frac{1}{2} \int_0^V \int_0^V N_v n_{v'} \int u_{vv'}(\omega)g_{vv'}(\omega)d\omega dv' dv. \quad (4.11)$$

Si denominamos

$$\phi_v \equiv \frac{1}{V} \int_0^V N_{v'} \phi_{vv'} dv', \quad \phi_{vv'} \equiv \int u_{vv'}(\omega)g_{vv'}(\omega)d\omega, \quad (4.12)$$

podemos escribir alternativamente

$$\Phi = \frac{1}{2V} \int_0^V \int_0^V N_v N_{v'} \phi_{vv'} dv' dv = \frac{1}{2} \int_0^V N_v \phi_v dv. \quad (4.13)$$

La dependencia asumida del potencial u con los parámetros v y v' no es superflua. Con esto es posible considerar fuerzas inter-atómicas que no sólo dependen de la distancia entre el par de partículas sino también simular interacciones donde intervienen efectos de densidad (Ross *et al.* 1983).

La energía interna total en el gas es

$$U_{total} = K + \Phi = \int_0^V N_v \left(\frac{3}{2\beta} + \frac{\phi_v}{2} \right) dv. \quad (4.14)$$

4.1.4. Energía Libre de Helmholtz Total

Finalmente, si reemplazamos las expresiones obtenidas para las distintas contribuciones en la ec. (4.4) resulta

$$A = \int_0^V N_v \left[\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{N_v \lambda_T^D}{N} \right) + \frac{1}{2V} \int_0^V N_{v'} \phi_{vv'} dv' \right] dv, \quad (4.15)$$

donde la energía libre de Helmholtz queda expresada como una funcional de la partición del espacio N_v .

4.1.5. Distribución de Equilibrio Termodinámico

La distribución de espacio más probable que caracteriza al gas en equilibrio termodinámico es aquella que minimiza a la energía libre dada por (4.15) con las restricciones (4.1) y (4.2). Según el método de multiplicadores de Lagrange, las variaciones en los valores de A , N y V alrededor del estado de equilibrio cumplen que

$$\delta A - \mu \delta N + P \delta V = 0. \quad (4.16)$$

Es posible demostrar que los multiplicadores de Lagrange μ y P son el potencial químico y la presión respectivamente.

Con la aplicación de las condiciones subsidiarias (4.1) y (4.2) y la expresión (4.15) sobre la relación (4.16) se obtiene

$$\int_0^V \delta N_v \left[\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{N_v \lambda_T^D}{N} \right) + \phi_v - \frac{\Phi}{V} v - \mu + Pv \right] dv = 0. \quad (4.17)$$

Dado que la expresión anterior debe ser válida para cualquier variación $\{\delta N_v\}$ de la partición del espacio, se deduce que el término entre corchetes debe anularse y, por lo tanto, que la distribución de equilibrio es dada por

$$N_v = \frac{N}{\lambda_T^D} \exp [-\beta (\gamma v + \phi_v - \mu)], \quad (4.18)$$

con

$$\gamma \equiv P - \frac{\Phi}{V}. \quad (4.19)$$

La expresión (4.18) muestra claramente que el reparto de espacio no es equitativo y que depende de las interacciones entre las partículas a través de ϕ_v . Es fácil verificar que el reemplazo de la ec. (4.18) en (4.15) produce la ecuación de Euler para un sistema simple (Callen 1981)

$$A = -PV + \mu N, \quad (4.20)$$

lo cual da consistencia termodinámica al método de partición del espacio. Es importante resaltar que la evaluación de las condiciones subsidiarias (4.1) y (4.2) con la distribución de equilibrio dada por (4.18) produce relaciones para la presión y el potencial químico en función de las variables termodinámicas independientes T , N y V . El reemplazo de estas relaciones en la ec. (4.20) permite obtener la ecuación fundamental del sistema, y por su intermedio toda la información termodinámica del mismo.

4.1.6. Identificación de v

Como hemos mencionado previamente, no se cuenta con una definición general del vd y su caracterización debe realizarse para cada clase de gas. Consideremos a continuación el caso de un gas ideal, el cual sirve de referencia para ayudar a entender el significado de v en sistemas más complejos compuestos por partículas interactuantes.

En ausencia de fuerzas de interacción entre partículas, $u_{vv'}(\omega) = \phi_{vv'} = \Phi = 0$. Por lo tanto la ec. (4.18) expresa que la partición de espacio para un gas ideal adopta la forma

$$n_v \equiv \frac{N_v}{V} = n^2 \exp(-nv), \quad (4.21)$$

Esta ecuación expresa que la mayoría de las partículas tienen vd inferior a la media $\langle v \rangle = 1/n$, mientras que pocas partículas poseen v grande. Este comportamiento es independiente de la dimensión del espacio.

La comparación de la distribución n_v dada por (4.21) con la distribución del vecino más cercano derivada por Hertz (Chandrasekhar 1943), permite realizar la siguiente identificación del vd por partícula:

$$v \equiv \text{Esfera de dimensión } D \text{ cuyo radio equivale a la distancia entre los centros de la partículas de referencia y su vecino más próximo.} \quad (4.22)$$

Como un ejemplo, la Fig. 4.1 ilustra los vd para las partículas de un gas ideal bidimensional. Es conveniente enfatizar que la proposición (4.22) no identifica la posición de una partícula ni establece un nexo de propiedad entre ella y puntos del espacio. Con ello se evitan los problemas inherentes a las teorías de celdas usadas en líquidos como vimos en el Capítulo 3.

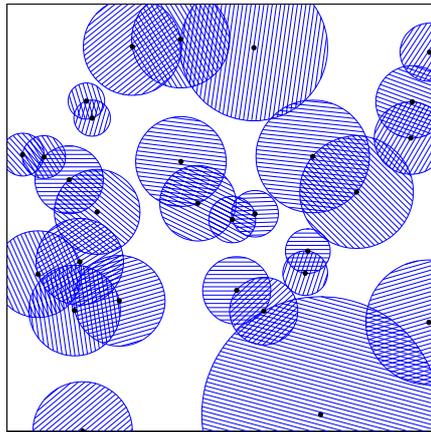


Figura 4.1: Los círculos sombreados denotan los volúmenes disponibles de los objetos. (Tomado de Rohrmann 2005).

4.1.7. Función Distribución $g_v(\omega)$ para un Gas Ideal

A partir de la caracterización del vd es posible deducir la forma funcional de $g_v(\omega)$ para un gas perfecto. De acuerdo a (4.22), una partícula de referencia con vd v posee su primera partícula vecina en la superficie de un volumen esférico $\omega = v$ centrado en la misma, por lo

tanto no posee vecinos en $\omega < v$, de manera que en esa región del espacio $g_v(\omega) = 0$. Sabiendo que existe una partícula en $\omega = v$ y suponiendo despreciable la posibilidad de que existan dos o más partículas allí (hecho que se demuestra en simulaciones numéricas), se deduce que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{v-\epsilon}^{v+\epsilon} n g_v(\omega) d\omega = 1. \quad (4.23)$$

De (4.23) se desprende que $g_v(\omega) = n^{-1} \delta(\omega - v) + f(v, \omega) \Theta(\omega - v)$, donde $\delta(x)$ es la función delta de Dirac, $\Theta(x)$ es la función escalón [$\Theta(x) = 0$ si $x < 0$ y $\Theta(x) = 1$ si $x > 0$] y f debe ser alguna función bien comportada (sin singularidades). El conocimiento del vd provee sólo información del primer vecino, nada puede inferirse a partir de v sobre las posiciones de las restantes partículas excepto que se ubican fuera de $\omega = v$. Tratándose de partículas no-interactuantes, debe haber una probabilidad uniforme de encontrarlas a distintas distancias de la de referencia más allá del primer vecino, es decir $f = 1$. Se concluye entonces que para un gas perfecto la función $g_v(\omega)$ es

$$g_v(\omega) = \frac{1}{n} \delta(\omega - v) + \Theta(\omega - v). \quad (4.24)$$

Es importante notar que la fdp convencional $g(\omega)$ puede evaluarse con la fdp condicional $g_v(\omega)$ por medio de la relación

$$n g(\omega) = \int_0^V n_v g_v(\omega) dv, \quad (4.25)$$

como puede deducirse de sus definiciones en la Sec. 4.1.3. Si usamos los resultados (4.21) y (4.24) en la relación (4.25) se encuentra el resultado esperado

$$g(\omega) = 1, \quad (4.26)$$

es decir, no existe correlación entre pares de partículas no interactuantes sin especificación de sus vd.

4.2. Gas de Esferas Duras

Sistemas formados por cuerpos duros constituyen modelos de fluidos no-ideales simples, en los cuales las partículas interactúan solamente a través de núcleos infinitamente repulsivos. La principal ventaja de estos modelos es la simplicidad del potencial de interacción de pares, el cual está definido por

$$u_{vv'}(\omega) = \begin{cases} \infty, & \omega \leq a, \\ 0, & \omega > a, \end{cases} \quad (4.27)$$

donde a es el tamaño de una esfera D -dimensional de radio d , siendo d el diámetro de una partícula, ver Fig. 4.2. La aplicación del método de partición del espacio para fluidos de esferas duras constituye un paso intermedio y una guía hacia el tratamiento de fluidos más realistas. En este caso se ha mostrado (Rohrmann 2005) que el vd de una esfera dura D -dimensional a baja densidad es¹

$$v = v_i - \frac{a}{2}, \quad (4.28)$$

donde v_i es definido por (4.22) y $a/2$ representa una reducción del vd respecto al del gas ideal. Una representación gráfica de (4.28) se ilustra en la Fig. 4.2.

¹En $D = 1$ la identificación (4.28) vale para todas las densidades.

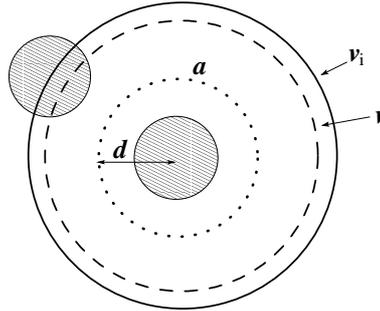


Figura 4.2: Representación esquemática del vd v de un disco duro (círculo central sombreado) en presencia de su vecino más cercano. El vd sería v_i si los cuerpos fueran puntuales y no interactuantes, de acuerdo a la interpretación (4.22). La región a encerrada por la circunferencia de puntos es una región prohibida para los centros de partículas vecinas. (Tomada de Rohrmann 2005).

Por otro lado, se espera que la fdp $g_v(\omega)$ de un gas ideal, ec. (4.24), sea una buena aproximación a la fdp de fluidos no-ideales a bajas densidades. Así, la fdp para un fluido de esferas duras a baja densidad se puede escribir como

$$g_v(\omega) = \frac{1}{n} \delta(\omega - v_i) + \Theta(\omega - v_i). \quad (4.29)$$

La aproximación en $g_v(\omega)$ reside en el segundo término del miembro derecho (ignora correlaciones entre una partícula y su segundo, tercero, etc., vecinos), el cual no es necesario para la determinación de N_v a bajas densidades. Usando las ecs. (4.27), (4.28) y (4.29) en la expresión (4.18) se obtiene la partición del espacio más probable para el fluido de esferas duras

$$n_v = \Theta(v - b) \left(\frac{n^2}{1 - nb} \right) \exp \left[-\frac{n(v - b)}{1 - nb} \right], \quad (4.30)$$

con $b = a/2$. Esta expresión muestra que no existen partículas con vd $v < b$ debido a la repulsión entre ellas. Además se deriva la siguiente expresión de la energía libre para este fluido

$$A = \frac{N}{\beta} \left\{ \ln \left(\frac{n \lambda_T^D}{1 - nb} \right) - 1 \right\}. \quad (4.31)$$

Las propiedades de un fluido de rodillos duros ($D = 1$) son conocidas de manera exacta, por lo que este modelo ofrece un test apropiado para la presente aplicación de la teoría. Así, puede verificarse que la expresión (4.31) de la energía libre es rigurosamente exacta para $D = 1$ y, a partir de ella, se pueden derivar todas las ecuaciones de estado de forma correcta (Tonks 1936). Para el caso $D > 1$, ningún resultado exacto es conocido pero hay disponibles soluciones numéricas y aproximaciones analíticas (Baus & Colot 1987). En este caso, la energía libre (4.31) describe correctamente las propiedades termodinámicas para discos y esferas duras a bajas densidades.

Una vez más, como ya vimos para un gas ideal, la teoría de partición de espacio no sólo provee las propiedades termodinámicas de un fluido, sino que también provee información de su micro estructura por medio de N_v .

4.3. Fluidos Compuestos

Para fluidos multi-componentes, la partición del espacio se torna más sofisticada (Rohrmann & Zorec 2006). Las Fig. 4.3 (A) y (B) muestran para un fluido de discos duros el vd de una

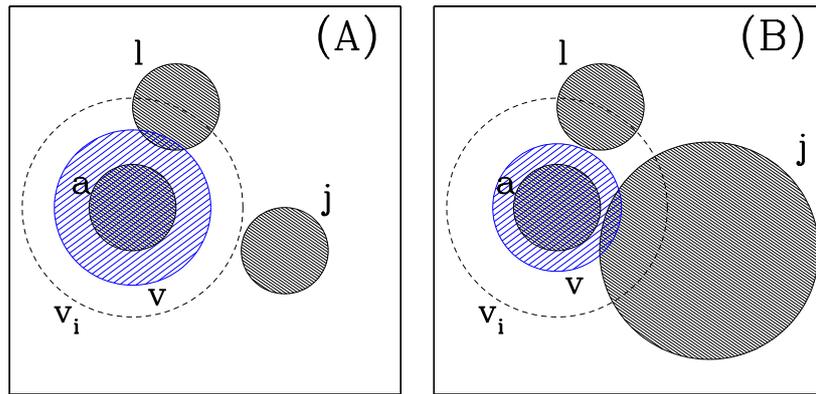


Figura 4.3: (A) Volumen disponible v (círculo rayado) de la partícula a en presencia de las partículas l y j , todas ellas discos duros de igual tamaño. (B) Idem anterior, ahora para discos de distintos tamaños, v depende del vecino con menor distancia de contacto ($v = v_i - B_{al}$, v_i es el vd del gas ideal y B_{al} es el 2do. coeficiente del Virial que corresponde al par a, l).

partícula para el caso mono-componente (discos duros de tamaños equivalentes) y multi-componente (discos duros de diferentes tamaños), respectivamente. El hecho novedoso que muestra la figura correspondiente al fluido multi-componente es que el vd es caracterizado, no por la partícula con centro más cercano a la de referencia, sino por aquella con borde de contacto más próximo. El volumen v asignado a una partícula depende entonces de las especies a las que pertenecen ella y su vecino más próximo. Como consecuencia es necesario descomponer la población N_a de partículas de cierta clase a en grupos de acuerdo a la clase de vecino más cercano. En tal caso la partición del espacio en el fluido será descrita por una colección de números $\{N_{alv}\}$, donde $N_{alv}dv$ denota el número de partículas de clase a con vd entre v y $v + dv$ y con el vecino más cercano de clase l . Es posible considerar además que las partículas a pueden tener una energía interna E_a con degeneración g_a . El procedimiento realizado para sustancias simples (Secs. 4.1 y 4.1.5) puede repetirse para obtener la energía libre A_{mezcla} del fluido compuesto (Rohrmann 2008). En equilibrio se obtiene

$$N_{alv} = \frac{N_a}{\lambda_{T,a}^3} g_a \exp[-\beta(\gamma v - \mu_{al} + \epsilon_{alv} + E_a)], \quad (4.32)$$

donde $\mu_{al} = \partial A_{mezcla} / \partial N_{al}$ ($N_{al} = \int_0^V N_{alv} dv$) y ϵ_{alv} es el promedio de la energía de interacción con el resto del gas de una partícula a con vd v y vecino más cercano de clase l . Como en el caso de fluidos simples, ahora también $\gamma = P - \Phi/V$. Además, el potencial químico de una especie a puede expresarse como $\mu_a = \sum_{lm} \mu_{lm} \partial N_{lm} / \partial N_a$. Así pues, con la ec. (4.32) pueden obtenerse poblaciones de mezclas químicamente complejas que incluyen átomos y moléculas con sus respectivos estados internos. Esta descripción es más detallada que la provista por las teorías alternativas actuales (por ejemplo, Hummer & Mihalas 1988).

Capítulo 5

Funciones de Distribución de Pares

En el Capítulo 4 se mostró que las propiedades de un fluido en condiciones de interés astrofísico pueden ser descritas mediante el método de minimización de la energía libre de Helmholtz combinado con una técnica de partición del espacio, donde a cada partícula del gas se le asigna un espacio v que llamamos el *volumen disponible* (vd). La suma de todos los vd debe reproducir el volumen total del gas (V). En particular, las propiedades termodinámicas y de estructura de un fluido en equilibrio son descritas con la energía libre de Helmholtz A del gas y la partición de espacio más probable N_v , dadas por las ecs. (4.15) y (4.18), respectivamente. Para realizar las evaluaciones correspondientes es necesario conocer la *función distribución de pares* (fdp) condicional $g_{vv'}(\omega)$ del fluido en estudio. Como vimos en el Capítulo 4, existen tres fdp de interés, $g(\omega)$, $g_v(\omega)$ y $g_{vv'}(\omega)$, las cuales se definen de manera tal que, dada una partícula arbitraria de referencia y un volumen esférico ω centrado en la misma, entonces

$$ng(\omega)d\omega \quad (5.1)$$

es el número medio de partículas ubicadas entre las superficies de ω y $\omega + d\omega$ de la partícula de referencia,

$$ng_v(\omega)d\omega \quad (5.2)$$

es el número medio de partículas entre ω y $\omega + d\omega$ de una partícula de referencia con vd v , y

$$n_{v'}g_{vv'}(\omega)dv'd\omega \quad (5.3)$$

es el número medio de partículas con vd entre v' y $v' + dv'$ ubicadas entre ω y $\omega + d\omega$ de una partícula de referencia con vd v , donde $n_v = N_v/V$.

De acuerdo a la ec. (5.1), $g(\omega)$ es una medida de la densidad de probabilidad de encontrar alguna partícula sobre la superficie del volumen ω como se aprecia en la Fig. 5.1 (A). Por su parte $g_v(\omega)$ también representa una densidad de probabilidad de encontrar una partícula sobre la superficie de ω , pero con la condición que la partícula de referencia tiene cierto vd v , como se ilustra en la Fig. 5.1 (B). Finalmente, $g_{vv'}(\omega)$ es la densidad de probabilidad de encontrar una partícula con vd v' en la superficie de ω centrado en una partícula con vd v . Esta última situación se muestra en la Fig. 5.1 (C). Es importante resaltar que la fdp $g_{vv'}(\omega)$ es una función simétrica en sus variables v y v' .

Es evidente que si sumamos la cantidad expresada en (5.3) sobre el vd v' considerando todos los valores posibles para el mismo (es decir entre 0 y V), obtenemos el resultado expresado en la ec. (5.2). De esa equivalencia resulta una relación integral entre las fdp condicionales

$$ng_v(\omega) = \int_0^V n_{v'}g_{vv'}(\omega)dv'. \quad (5.4)$$

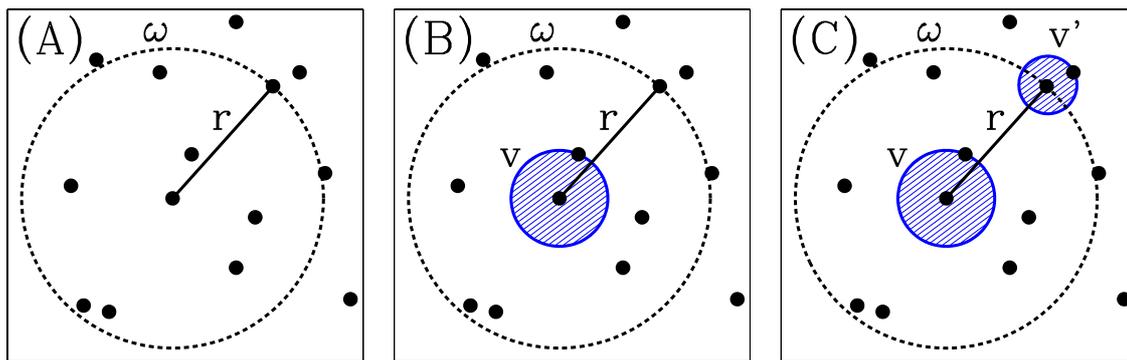


Figura 5.1: Distribuciones de partículas en un espacio en $D = 2$ donde la partícula del centro se utiliza como referencia para la evaluación de $g(\omega)$ (A), $g_v(\omega)$ (B) y $g_{vv'}(\omega)$ (C) (ver texto).

Similarmente, si la cantidad expresada en la ec. (5.2) es multiplicada por la probabilidad $\frac{n_v}{n} dv$ que la partícula de referencia tenga vd entre v y $v + dv$, y luego se suma sobre todos los valores posibles para v , se deberá obtener la cantidad en (5.1). Por lo tanto

$$ng(\omega) = \int_0^V n_v g_v(\omega) dv. \quad (5.5)$$

Las ecs. (5.4) y (5.5) pueden ser combinadas para producir una relación integral entre la fdp condicional $g_{vv'}(\omega)$ y la fdp convencional $g(\omega)$,

$$n^2 g(\omega) = \int_0^V \int_0^V n_v n_{v'} g_{vv'}(\omega) dv' dv. \quad (5.6)$$

Es importante notar que de acuerdo a la ec. (5.5), $g(\omega)$ equivale al valor medio de $g_v(\omega)$ sobre todo el dominio de valores del vd v

$$\langle g_v(\omega) \rangle = g(\omega), \quad (5.7)$$

donde el valor medio de una función f_v se expresa

$$\langle f_v \rangle = \frac{1}{n} \int_0^V n_v f_v(\omega) dv. \quad (5.8)$$

Análogamente, $g_v(\omega)$ equivale al valor medio de $g_{vv'}(\omega)$ sobre la variable v'

$$\langle g_{vv'}(\omega) \rangle = g_v(\omega). \quad (5.9)$$

En las siguientes secciones desarrollamos el objetivo principal del presente trabajo que es analizar la fdp condicional $g_{vv'}(\omega)$ en su dependencia con v , v' y ω . A nuestro conocimiento, no hay trabajos realizados con anterioridad sobre una fdp condicional de este tipo. Por lo tanto el presente estudio se realiza considerando el sistema más simple, un fluido monocomponente en equilibrio compuesto por partículas sin estructura interna y sin interacciones. Este sistema es un gas ideal desde el punto de vista *termodinámico* y una distribución o proceso de Poisson desde el punto de vista *estadístico espacial*. El tratamiento adoptado para el estudio es en parte analítico y en parte basado en simulaciones numéricas. Algunos de los resultados que se presentan a continuación han sido expuestos en la 52° Reunión Anual de la Asociación Argentina de Astronomía (La Plata, septiembre de 2009), y publicados en el correspondiente boletín (Zurbriggen & Rohrmann 2009).

5.1. Análisis Teórico

Para el estudio de la función $g_{vv'}(\omega)$ es útil clasificar los distintos tipos de partículas vecinas que puede tener una partícula del gas. La Fig. 5.2 muestra ejemplos para un gas bidimensional. Dada una partícula de referencia a con vd v , ella posee una partícula vecina b con vd v' en una de seis configuraciones posibles:

(A)-*Configuración de vecinos mutuos*: la partícula a es el vecino más cercano de la partícula b y viceversa, en cuyo caso $v = v'$.

(B)-*Configuración de primer vecino con $v > v'$* : b es vecino más cercano de a , pero tiene por vecino más cercano a otra partícula.

(C)-*Configuración de primer vecino con $v < v'$* : a es el vecino más cercano de b , pero tiene por vecino más cercano a otra partícula.

(D)-*Configuración de primer vecino compartido*: las partículas a y b comparten el primer vecino.

(E)-*Configuración de partículas con vd solapados*: las partículas a y b no comparten primer vecino ni son primer vecino una de otra, pero sus vd v y v' se intersectan en el espacio.

(F)-*Configuración de partículas sin correlación*: equivalente al caso (E) pero sin intersección de los vd.

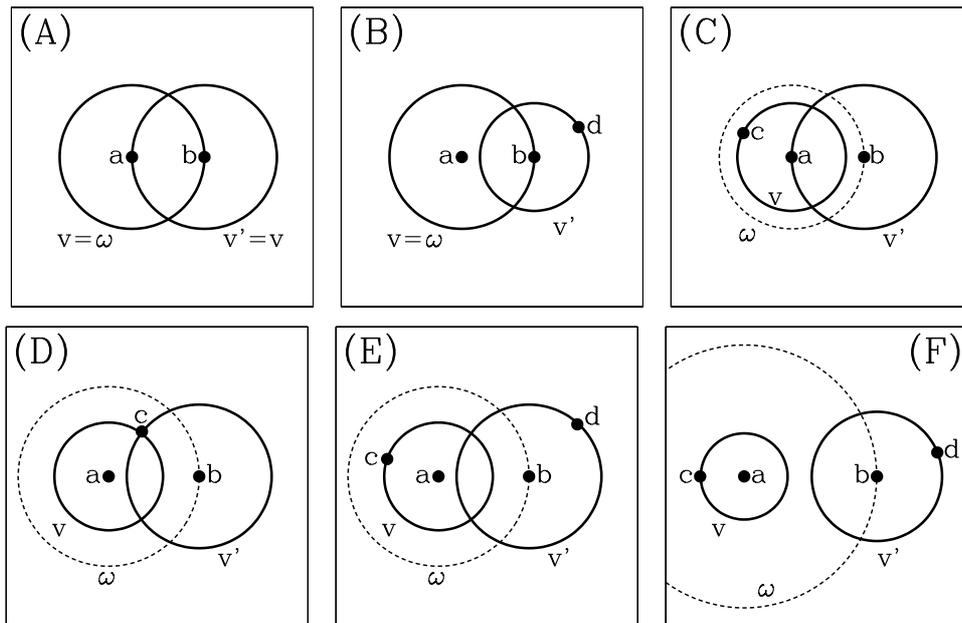


Figura 5.2: Distintas configuraciones de partículas vecinas a y b en un gas bidimensional (ver texto).

Por otro lado, de acuerdo a las ecs. (5.4) y (4.24), la función $g_{vv'}(\omega)$ debe cumplir la siguiente relación

$$\frac{1}{n} \int_0^V n_{v'} g_{vv'}(\omega) dv' = g_v(\omega) = \frac{1}{n} \delta(\omega - v) + \Theta(\omega - v). \quad (5.10)$$

Los términos en el lado derecho de la ec. (5.10) expresan que la fdp condicional $g_v(\omega)$ posee una contribución singular en $\omega = v$, debido a la certidumbre de que la partícula de referencia posee un primer vecino en la superficie de un volumen esférico v centrado en la misma. La ecuación expresa además que no existen partículas vecinas dentro del volumen encerrado por

dicha superficie (de lo contrario se violaría el significado de v), y que en el volumen externo la distribución espacial de partículas no presenta correlación con la de referencia. Estas consideraciones sobre la forma de la función $g_v(\omega)$ conjuntamente con la clasificación (A - F) de pares de vecinos con vd v y v' , pueden ser empleadas para deducir la forma funcional de la fdp $g_{vv'}(\omega)$. Haremos eso a continuación.

Sea ω un volumen esférico centrado en una partícula con vd v y sea una partícula con vd v' ubicada en la superficie de ω (es equivalente considerar a ω centrado en la segunda partícula y la primera ubicada sobre su superficie). Luego:

(a)- No puede existir un par de partículas con vd v y v' si ω es menor al mayor de estos volúmenes, $v_{>} = \max\{v, v'\}$, pues se violaría el significado de vd. Por lo tanto

$$g_{vv'}(\omega) = 0, \quad \omega < v_{>}.$$

(b)- En forma similar a lo que ocurre con $g_v(\omega)$ en $\omega = v$, donde la contribución del vecino más cercano origina una delta de Dirac [ec. (4.24)], cabe esperar que en $\omega = v_{>}$ exista una contribución singular a $g_{vv'}(\omega)$ procedente del vecino más cercano de la partícula con el vd mayor. Esto corresponde a la configuración (B) o a la configuración (C) de la Fig. 5.2, si la partícula de referencia tiene vd v o v' , respectivamente. De manera que

$$g_{vv'}(\omega) \propto \delta(\omega - v_{>}), \quad \omega = v_{>}.$$

(c)- La ocurrencia de pares de partículas con vd v y v' donde al menos una de ellas es primer vecino de la otra resulta incrementada por la configuración de vecinos mutuos, es decir cuando $v = v'$ [caso (A) de la Fig. 5.2]. Debido a que la configuración de vecinos mutuos corresponde a un valor específico de ω , su contribución en la fdp $g_{vv'}(\omega)$ debe ser a través de una función delta de Dirac. Es decir

$$g_{vv'}(\omega) = [A_v \delta(v - v') + B_{vv'}] \delta(\omega - v_{>}), \quad \omega \leq v_{>}, \quad (5.11)$$

donde las funciones A_v y $B_{vv'}$, que en principio son bien comportadas y pueden depender de la dimensión del espacio, miden la ocurrencia de las configuraciones de vecinos mutuos [Fig. 5.2 (A)] y de primer vecino no mutuo [Fig. 5.2 (B) y (C)].

(d)- Para $\omega > v_{>}$ podemos reconocer nuevas situaciones. En particular, si ω es suficientemente grande las correlaciones entre pares de partículas (v, v') deben decaer y la densidad de probabilidad de ocurrencia de un par será uniforme y equivalente a uno [Fig. 5.2 (F)],

$$g_{vv'}(\omega) \rightarrow 1, \quad \omega \gg v_{>}.$$

(e)- Sea $\omega_{vv'}$ el valor de ω que representa la configuración en la cual v y v' , vistas como esferas centradas en sus respectivas partículas, se tocan en un punto,

$$\omega_{vv'} = (v^{1/D} + v'^{1/D})^D, \quad (5.12)$$

siendo D el número de dimensiones del espacio físico en el que se encuentran las partículas. Notar que $\omega_{vv'} \geq v_{>}$. Las configuraciones donde $\omega \in (v_{>}, \omega_{vv'})$ corresponden a pares de partículas donde los vd v y v' centrados en sus respectivas partículas están solapados [Fig. 5.2 (E)]. Por definición de vd, los primeros vecinos de un par de partículas con vd solapados no pueden estar en las porciones de superficies de v y

v' que se intersectan, exceptuando los bordes de intersección. Cuando una partícula está en un borde de intersección de los vd v y v' , esa partícula es un primer vecino compartido por el par [ver Fig. 5.2 (D)]. Debido a la zona de exclusión de partículas, las configuraciones con vd solapados y que no comparten un primer vecino [Fig. 5.2 (E)] deben ser menos probables de ocurrir que aquellas sin intersección [Fig. 5.2 (F)]. Por lo tanto, pares de partículas con $\omega \in (v_>, \omega_{vv'})$ deben presentar algún tipo de correlación y su probabilidad de ocurrencia será medida por cierta función $C_{vv'}(\omega)$ en la fdp $g_{vv'}(\omega)$.

(f)- En un gas unidimensional ($D = 1$), cabe esperar que la probabilidad de ocurrencia de un par de partículas con $\omega = \omega_{vv'}$ resulte incrementada por la configuración del primer vecino compartido [ejemplo bidimensional en la Fig. 5.2 (D)]. Dado que en $D = 1$ esto sólo ocurre si v y v' se tocan en un punto, la contribución de tales eventos a $g_{vv'}(\omega)$ debe proceder a través de una delta de Dirac con alguna función de peso $D_{vv'}$. En $D > 1$, por razones geométricas, un par de partículas pueden compartir al primer vecino aún para $\omega < \omega_{vv'}$ [Fig. 5.2 (D)]. En estos casos, la contribución a la fdp debida a la configuración de primer vecino compartido será descripta por cierta función $E_{vv'}(\omega)$.

La Fig. 5.3 ilustra en un plano v' contra ω varias de las configuraciones que se acaban de considerar. Si se reúne lo analizado en los puntos (a-f) y no existen situaciones distintas a las vistas, se arriba a la siguiente forma funcional para la fdp $g_{vv'}(\omega)$ de un gas ideal,

$$\begin{aligned} g_{vv'}(\omega) = & [A_v \delta(v - v') + B_{vv'}] \delta(\omega - v_>) + \delta_{D,1} D_{vv'} \delta(\omega - \omega_{vv'}) \\ & + [C_{vv'}(\omega) + (1 - \delta_{D,1}) E_{vv'}(\omega)] \Theta(\omega_{vv'} - \omega) \Theta(\omega - v_>) \\ & + \Theta(\omega - \omega_{vv'}), \end{aligned} \quad (5.13)$$

con

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (5.14)$$

La ec. (5.13) muestra claramente que $g_{vv'}(\omega)$ es una función más compleja que $g_v(\omega)$. Es además una función simétrica respecto de los parámetros v y v' si las funciones $B_{vv'}$, $C_{vv'}(\omega)$, $D_{vv'}$ y $E_{vv'}(\omega)$ lo son. En una segunda parte de este capítulo (Sec. 5.2) se presentarán resultados numéricos que confirmarán la forma funcional (5.13) y que aportarán información sobre las funciones A_v , $B_{vv'}$, $C_{vv'}(\omega)$, $D_{vv'}$ y $E_{vv'}(\omega)$ para gases en dimensiones $D = 1, 2$ y 3 . Antes de eso avanzaremos en el análisis teórico de la expresión (5.13).

5.1.1. Funciones de Peso Constantes

Es instructivo analizar la expresión (5.13) considerando que las funciones de peso allí presentes tienen valores constantes, es decir, son independientes de v , v' y ω . Específicamente, para $D > 1$, supondremos en esta subsección que $A_v = a_1$, $B_{vv'} = a_2$, $C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega) = a_3$, con a_1 , a_2 y a_3 constantes. Consideraremos además el límite termodinámico, $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$

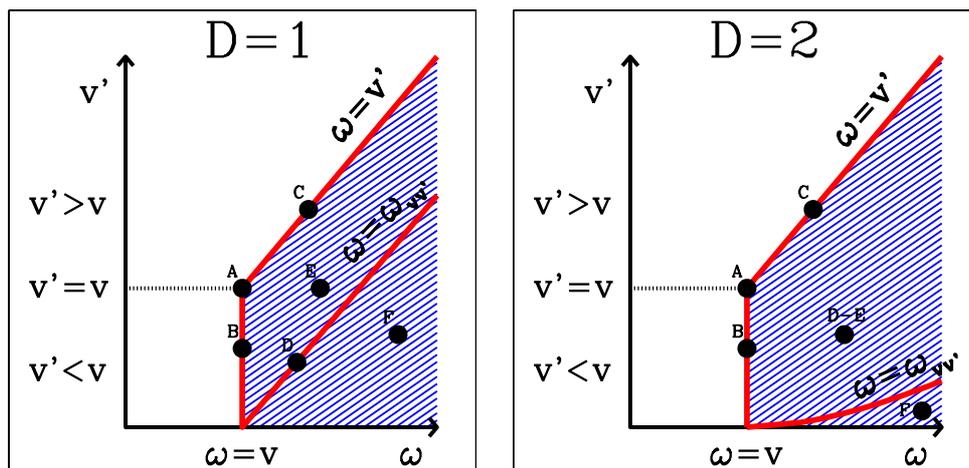


Figura 5.3: Plano v' versus ω que ilustra, para un v dado, la región donde la fdp $g_{vv'}(\omega)$ es distinta de cero (región con sombra). La imagen de la izquierda se particulariza para dimensión 1 y en la derecha para dimensión 2. La línea continua vertical en ambas figuras corresponde a la configuración en que la partícula con vd v' es primera vecina de aquella con vd v . La línea demarcada con $\omega = v'$ representa la configuración inversa donde la partícula con vd v es primera vecina de aquella con vd v' . La línea $\omega = \omega_{vv'}$ corresponde a configuraciones donde los vd v y v' se tocan en un sólo punto. Los círculos representan las distintas configuraciones de vecinos, donde las letras con los que se los designa se corresponden con la situaciones ilustradas en la Fig. 5.2.

con $n = N/V$ constante. Con estas hipótesis, el reemplazo de (5.13) en la ec. (5.10) produce

$$\begin{aligned}
 g_v(\omega) &= \frac{1}{n} \int_0^\infty n_{v'} g_{vv'}(\omega) dv' & (5.15) \\
 &\equiv \underbrace{na_1 \int_0^\infty e^{-nv'} \delta(v - v') \delta(\omega - v_>) dv'}_{(1)} + na_2 \delta(\omega - v) \int_0^v e^{-nv'} dv' \\
 &\quad + \underbrace{na_2 \int_v^\infty e^{-nv'} \delta(\omega - v') dv'}_{(2)} + \underbrace{na_3 \Theta(\omega - v) \int_0^\omega e^{-nv'} \Theta(\omega_{vv'} - \omega) dv'}_{(3)} \\
 &\quad + \underbrace{n \int_0^\infty e^{-nv'} \Theta(\omega - \omega_{vv'}) dv'}_{(4)}.
 \end{aligned}$$

La evaluación de las distintas integrales produce

$$\begin{aligned}
 (1) &= na_1 e^{-nv} \delta(\omega - v), \\
 (2) &= na_2 \Theta(\omega - v) e^{-n\omega}, \\
 (3) &= a_3 \Theta(\omega - v) (e^{-nv'_0} - e^{-n\omega}), \\
 (4) &= \Theta(\omega - v) (1 - e^{-nv'_0}),
 \end{aligned}$$

donde

$$v'_0 \equiv (\omega^{1/D} - v^{1/D})^D. \quad (5.16)$$

Con estos resultados en (5.10) se obtiene

$$\begin{aligned}
 g_v(\omega) &= \frac{1}{n}\delta(\omega - v) + \Theta(\omega - v) \\
 &= [a_2 + (na_1 - a_2)e^{-nv}] \delta(\omega - v) \\
 &\quad + \left[1 + (na_2 - a_3)e^{-n\omega} + (a_3 - 1)e^{-nv_0}\right] \Theta(\omega - v).
 \end{aligned}
 \tag{5.17}$$

Tomando en cuenta que la presente ecuación debe cumplirse para todo valor de v y ω , se deduce que $A_v \equiv 1/n^2$, $B_{vv'} \equiv 1/n$ y $C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega) \equiv 1$. Por lo tanto, bajo la suposición que las funciones de peso son constantes, la fdp en $D > 1$ adopta la siguiente forma

$$g_{vv'}(\omega) = \left(\frac{1}{n^2}\delta(v - v') + \frac{1}{n}\right) \delta(\omega - v_{>}) + \Theta(\omega - v_{>}).
 \tag{5.18}$$

Es interesante notar, como puede verificarse fácilmente, que se obtiene este mismo resultado cuando se considera también la hipótesis de pesos constantes en la ec. (5.13) para el caso $D = 1$. Sin embargo, la ec. (5.18) no es correcta para gases en dimensión finita. En particular, no reproduce la fracción de vecinos mutuos tal como ha sido evaluada por otros métodos, según veremos en la Sec. 5.1.2. No obstante, como se verá más adelante, la ec. (5.18) parece ser la forma asintótica correcta que adopta $g_{vv'}(\omega)$ para un gas en el límite de dimensión infinita ($D \rightarrow \infty$).

5.1.2. La Fracción de Vecinos Mutuos

Dada una distribución de partículas en el espacio se dice que un par de partículas a y b son n -ésimas vecinas mutuas si b es la n -ésima vecina más cercana de a y a es la n -ésima vecina más cercana de b . La evaluación de la fracción de primeros vecinos mutuos para un gas ideal (o distribución de objetos siguiendo un proceso de Poisson) fue dada originalmente, aunque en forma incorrecta, por Clark (1956) y corregida luego por Dacey (1969). La generalización para el caso de n -ésimo vecinos mutuos fue obtenida por Cox (1981). Los valores de la fracción de primeros vecinos mutuos se presentan en la Tabla 5.1 para varios valores de D .

Tabla 5.1: *Fracción de primeros vecinos mutuos f_m para un gas ideal en un espacio D -dimensional.*

D	f_m
1	$\frac{2}{3} = 0.667$
2	$\frac{6\pi}{8\pi+3^{3/2}} = 0.621$
3	$\frac{16}{27} = 0.593$
∞	$\frac{1}{2} = 0.500$

La evaluación de la fracción f_m de primeros vecinos mutuos (de aquí en más los llamaremos simplemente vecinos mutuos) es importante en el presente trabajo porque puede ser calculada a partir de la fdp $g_{vv'}(\omega)$. En especial, ésto provee una condición que debe satisfacer la función de peso A_v que aparece en la ec. (5.13). Por otro lado, si se identifican las contribuciones de $g_{vv'}(\omega)$ que en la promediación expresada por la ec. (5.10) producen el término con la función delta de Dirac en el miembro derecho de dicha igualdad, se encuentra además una relación que debe satisfacer la función $B_{vv'}$.

Procedemos primero a identificar la contribución de vecinos mutuos a $g_{vv'}(\omega)$ en (5.13),

$$g_{vv'}^m(\omega) = A_v \delta(v - v') \delta(\omega - v_{>}).
 \tag{5.19}$$

Siguiendo las definiciones de fdp condicionales expuestas al inicio de este capítulo, se deduce que $n_{v'} dv' g_{vv'}^m(\omega) d\omega$ es el número medio de partículas con vd entre v' y $v' + dv'$ ubicadas entre las superficies de volúmenes esféricos ω y $\omega + d\omega$ centrados en la partícula de referencia con vd v , y que son vecinas mutuas de la misma¹. Ahora podemos usar la promediación (5.9) para encontrar la contribución de vecinos mutuos a $g_v(\omega)$, resulta entonces

$$g_v^m(\omega) = \frac{1}{n} \int_0^V n_{v'} g_{vv'}^m(\omega) dv', \quad (5.20)$$

de esta manera, $ng_v^m(\omega) d\omega$ es el número medio de partículas ubicadas entre ω y $\omega + d\omega$ de una partícula con vd v y que son vecinas mutuas de la misma. De la misma forma, con la promediación (5.7) se encuentra que la contribución de vecinos mutuos a $g(\omega)$ es

$$g^m(\omega) = \frac{1}{n} \int_0^V n_v g_v^m(\omega) dv. \quad (5.21)$$

Así, $ng^m(\omega) d\omega$ es el número medio de partículas ubicadas entre ω y $\omega + d\omega$ de una partícula cualquiera y que son vecinas mutuas de la misma. Finalmente, la integración de $ng^m(\omega) d\omega$ sobre todo el espacio alrededor de la partícula de referencia, produce la fracción de vecinos mutuos en el gas

$$f_m = n \int_0^{[V]} g^m(\omega) d\omega \equiv \frac{1}{n} \int_0^{[V]} \int_0^V \int_0^V n_v n_{v'} g_{vv'}^m(\omega) dv' dv d\omega, \quad (5.22)$$

donde el límite superior de integración $[V]$ depende de la posición de la partícula de referencia dentro del gas y debe ser elegido tal que cubra completamente al volumen V . Si se reemplaza la ec. (5.19) en (5.22), se obtiene la condición para A_v (en el límite termodinámico)

$$f_m = n^3 \int_0^\infty e^{-2n\omega} A_\omega d\omega. \quad (5.23)$$

Procedemos ahora a encontrar la condición sobre la función $B_{vv'}$. Designamos con $g_{vv'}^{(1)}(\omega)$ la contribución producida por el vecino más cercano a la partícula de referencia, que puede ser vecino mutuo o no. Esta contribución a $g_{vv'}(\omega)$ es expresada por la ec. (5.11) para $v \geq v'$, y es la responsable de producir el término con la delta de Dirac en la promediación dada por (5.10). Por lo tanto

$$\langle g_{vv'}^{(1)}(\omega) \rangle |_{v \geq v'} = g_v^{(1)}(\omega) = \frac{1}{n} \delta(\omega - v). \quad (5.24)$$

La evaluación con (5.11) produce

$$\int_0^v e^{-nv'} B_{vv'} dv' = \frac{1}{n^2} - A_v e^{-nv}. \quad (5.25)$$

Bajo la guía de simulaciones numéricas se han encontrado las siguientes soluciones a las ecs. (5.23) y (5.25),

$$A_v = \frac{e^{\xi nv}}{n^2}, \quad (5.26)$$

$$B_{vv'} = (1 - \xi) \frac{e^{\xi nv <}}{n}, \quad (5.27)$$

¹Usamos la expresión plural, vecinas mutuas, debido a la naturaleza estadística de $g_{vv'}(\omega)$, pero en la práctica, en una distribución espacial aleatoria de $N = 10^7$ partículas, una partícula llega a tener a lo más una vecina mutua.

donde $v_{<} = \min\{v, v'\}$ y ξ es una constante cuyo valor depende de la dimensión del espacio. De acuerdo a (5.23) resulta

$$\xi = 2 - \frac{1}{f_m} \quad (5.28)$$

de manera que, por ejemplo, $\xi = 1/2$ ($D = 1$), $\xi = (4\pi - 3^{3/2})/(6\pi)$ ($D = 2$), $\xi = 5/16$ ($D = 3$) y $\xi \rightarrow 0$ ($D \rightarrow \infty$) (ver Tabla 5.1). Las expresiones (5.26) y (5.27) son corroboradas por simulaciones numéricas para los casos $D = 1, 2$ y 3 (Sec. 5.2.3, Figs. 5.15 y 5.16). Es interesante notar que los valores que adoptan las funciones A_v y $B_{vv'}$ para el caso $D \rightarrow \infty$ ($\xi=0$) son equivalentes a los dados por la ec. (5.18), lo cual apoya la conjetura de que dicha expresión es la forma exacta que adopta $g_{vv'}(\omega)$ en $D \rightarrow \infty$.

5.1.3. La Fracción de Primer Vecino Compartido

Otra cantidad de interés en estadística espacial es la fracción de n -ésimos vecinos compartidos, la cual considera configuraciones de pares de partículas que comparten el n -ésimo vecino más cercano. La evaluación de la fracción de n -ésimos vecinos compartidos ha sido obtenida por Schilling (1986) para distribuciones espaciales de partículas basadas en procesos de Poisson. La Tabla 5.2 muestra valores para la fracción f_c del primer vecino compartido para distribuciones de Poisson (o, equivalentemente, para el gas ideal) en espacios de dimensiones $D = 1, 2, 3$ e infinito. Similarmente a lo realizado en la sección anterior con la fracción de vecinos mutuos, podemos hacer uso de la fracción f_c para imponer condiciones que deben satisfacer las funciones de peso $D_{vv'}$ y $E_{vv'}(\omega)$ que se hallan en la relación (5.13).

Tabla 5.2: Fracción de primeros vecinos compartidos f_c para un gas ideal en un espacio D -dimensional.

D	f_c
1	$\frac{1}{2}$
2	0.63
3	0.71
∞	1.00

La contribución del primer vecino compartido a $g_{vv'}(\omega)$ es

$$g_{vv'}^c(\omega) = \begin{cases} D_{vv'}\delta(\omega - \omega_{vv'}), & D = 1, \\ E_{vv'}(\omega)\Theta(\omega_{vv'} - \omega)\Theta(\omega - v_{>}), & D > 1. \end{cases} \quad (5.29)$$

El mismo procedimiento utilizado para derivar la ec. (5.22) permite obtener

$$\begin{aligned} f_c &= n \int_0^{[V]} g^c(\omega) d\omega, \\ &= \frac{1}{n} \int_0^{[V]} \int_0^V \int_0^V n_v n_{v'} g_{vv'}^c(\omega) dv' dv d\omega. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Reemplazando la ec. (5.29) en (5.30) resulta para $D = 1$ (en el límite termodinámico)

$$f_c = n^3 \int_0^\infty \int_0^\omega e^{-n\omega} D_{vv'_0} dv d\omega, \quad (5.31)$$

y para $D > 1$

$$f_c = n^3 \int_0^\infty \int_0^\omega \int_{v'_0}^\omega e^{-n(v+v')} E_{vv'}(\omega) dv' dv d\omega, \quad (5.32)$$

donde v'_0 es el valor del vd v' que se intercepta solamente en un punto con el vd v para un dado valor de ω y se expresa por la ec. (5.16).

De esta manera, la fracción del primer vecino compartido impone a través de las ecs. (5.31) y (5.32) condiciones que deben cumplir las funciones de peso $D_{vv'}$ y $E_{vv'}(\omega)$.

5.1.4. Gas Unidimensional

Para conocer la expresión completa de la fdp $g_{vv'}(\omega)$ en $D = 1$ resta aún determinar las funciones $C_{vv'}(\omega)$ y $D_{vv'}$ presentes en la ec. (5.13). Estas funciones de peso corresponden a las contribuciones a $g_{vv'}(\omega)$ aportadas por las configuraciones de pares de partículas con vd solapados y primer vecino compartido, respectivamente. En particular, la función $D_{vv'}$ debe satisfacer la relación integral dada por la ec. (5.31) con $f_c = 1/2$. La opción más sencilla es ensayar una solución constante respecto de v , v' y ω . En ese caso se obtiene

$$D_{vv'} = \frac{1}{2n}. \quad (5.33)$$

Simulaciones numéricas confirman que la ec. (5.33) es correcta (Sec 5.2.3, Fig. 5.10).

Una vez determinada $D_{vv'}$, la función $C_{vv'}(\omega)$ se puede encontrar a partir de la ec. (5.10). Entonces, reemplazando las expresiones (5.26), (5.27) y (5.33) para las funciones A_v , $B_{vv'}$ y $D_{vv'}$ en la ec. (5.13), y usando (5.10) resulta

$$g_v(\omega) = \frac{1}{n}\delta(\omega - v) + \Theta(\omega - v) \quad (5.34)$$

$$+ \Theta(\omega - v) \left[\frac{1}{2}e^{-n\omega}e^{nv/2} + \frac{1}{2}e^{-n\omega}e^{nv} + n \int_{v'_0}^{\omega} e^{-nv'}C_{vv'}(\omega)dv' \right].$$

La suma de términos entre corchetes debe anularse para reproducir la expresión correcta de $g_v(\omega)$, con lo cual se deduce que

$$C_{vv'}(\omega) = \frac{1}{4} \exp \left[\frac{n}{2}(\omega_{vv'} - \omega) \right]. \quad (5.35)$$

Por lo tanto, encontramos la siguiente expresión analítica explícita para la fdp condicional $g_{vv'}(\omega)$ correspondiente a gases ideales en $D = 1$

$$g_{vv'}(\omega) = \left[\frac{1}{n^2}e^{nv/2}\delta(v - v') + \frac{1}{2n}e^{nv</2} \right] \delta(\omega - v_{>}) + \frac{1}{2n}\delta(\omega - \omega_{vv'}) \quad (5.36)$$

$$+ \frac{1}{4} \exp \left[\frac{n}{2}(\omega_{vv'} - \omega) \right] \Theta(\omega_{vv'} - \omega)\Theta(\omega - v_{>}) + \Theta(\omega - \omega_{vv'}),$$

donde n es la densidad numérica de partículas y $\omega_{vv'} = v + v'$ [ec. (5.12)]. Vemos que la expresión (5.36) cumple la propiedad de simetría respecto a v y v' . Los resultados de simulaciones que veremos en la Sec. 5.2.2 confirman esta expresión.

5.1.5. Gases Multidimensionales

De manera similar al caso unidimensional, es necesario determinar $C_{vv'}(\omega)$ y $E_{vv'}(\omega)$ en la ec. (5.13) para conocer completamente la expresión analítica que describe a $g_{vv'}(\omega)$ en el caso general $D > 1$. Igual que antes, disponemos de dos condiciones que deben ser satisfechas por la fdp. Una de ellas es reproducir la fracción del primer vecino compartido dada por la ec. (5.32), la cual impone una restricción sobre $E_{vv'}(\omega)$. Por otro lado, la fdp $g_{vv'}(\omega)$ debe

reproducir por medio de la ec. (5.10) a la fdp $g_v(\omega)$. Por lo tanto, las condiciones a satisfacer por las funciones $C_{vv'}(\omega)$ y $E_{vv'}(\omega)$ son

$$f_c = n^3 \int_0^\infty \int_0^\omega \int_{v'_0}^\omega e^{-n(v+v')} E_{vv'}(\omega) dv' dv d\omega, \quad (5.37)$$

y

$$(1 - \xi)e^{-n(\omega - \xi v)} - e^{nv'_0} + n \int_{v'_0}^\omega e^{-nv'} \{C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega)\} dv' = 0. \quad (5.38)$$

De momento las funciones $C_{vv'}(\omega)$ y $E_{vv'}(\omega)$ han sido determinadas numéricamente por medio de simulaciones computacionales para gases en dimensiones $D = 2$ y 3 (Sec. 5.2.3). La expresión general para la fdp $g_{vv'}(\omega)$ correspondiente a gases ideales en $D > 1$ queda en la forma

$$g_{vv'}(\omega) = \left[\frac{e^{\xi nv}}{n^2} \delta(v - v') + (1 - \xi) \frac{e^{\xi nv <}}{n} \right] \delta(\omega - v_{>}) + \Theta(\omega - \omega_{vv'}) + \{C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega)\} \Theta(\omega_{vv'} - \omega) \Theta(\omega - v_{>}). \quad (5.39)$$

donde ξ es dado por (5.28).

5.2. Simulaciones Numéricas

Describimos en esta sección los cálculos numéricos que se han desarrollado para determinar la fdp $g_{vv'}(\omega)$ en dimensiones $D = 1, 2$ y 3 . Estos cálculos han sido útiles para identificar la forma funcional (5.13), corroborar las expresiones analíticas deducidas para algunas de las funciones de peso allí presentes (A_v , $B_{vv'}$ y $D_{vv'}$), y determinar numéricamente las funciones de peso restantes [$C_{vv'}(\omega)$ y $E_{vv'}(\omega)$].

Una distribución aleatoria de puntos en el espacio es representativa de la distribución espacial que en un promedio temporal adoptan las partículas de un gas ideal en equilibrio termodinámico. Por lo tanto, para representar una configuración espacial de un gas ideal, el primer paso es distribuir aleatoriamente N partículas puntuales en un volumen V . A lo largo de nuestra investigación trabajamos con simulaciones de $N = 10^4$ - 10^7 puntos repartidos en un volumen V representado por un cubo D -dimensional con lados de longitud unidad. Por cubo D -dimensional nos referimos a un segmento, una superficie cuadrada y un cubo propiamente dicho para $D = 1, 2$ y 3 respectivamente, al cual llamaremos con frecuencia y en forma genérica cubo. De esta forma, la simulación de un gas ideal en un cubo resulta de asignar a las coordenadas espaciales de cada partícula valores numéricos aleatorios en el intervalo $(0, 1)$. Para tal fin usamos un generador de números aleatorios del compilador G-Fortran². Es útil aclarar que en todos los experimentos numéricos que se muestran aquí, tanto el volumen ω usado para la búsqueda de pares de partículas como los vd v y v' se expresan en unidades de volumen medio por partícula $\langle v \rangle = \frac{N}{V} = \frac{1}{n}$.

El segundo paso a realizar en la simulación numérica es determinar los vd de las partículas que componen el sistema lo cual, de acuerdo a la definición de vd dada por la ec. (4.22), equivale a encontrar el vecino más cercano de cada una de ellas. Si se utiliza un método simple

²En un primer momento usamos como generador de números aleatorios las funciones *ran* dadas por Press *et al.* (1986). A pesar de que el número $N = 10^7$ (valor máximo utilizado en nuestra investigación) está muy por debajo de los períodos de tales funciones, éstas muestran limitaciones que comienzan a manifestarse en el caso de la función *ran0* para $N \gtrsim 2 \times 10^6$, y en el caso de funciones más sofisticadas como son la *ran2* y *ran3* para $N \gtrsim 5 \times 10^6$. Hasta $N = 10^7$ la rutina del compilador G-Fortran no parece mostrar problema alguno.

a partir de esa cantidad se evalúa luego n_v . El proceso es repetido para una grilla de valores de v con paso Δv en el intervalo $(0, V)$.

A continuación, el código evalúa la fdp $g_v(\omega)$ definida al inicio de este capítulo. Dado que trabajamos con muestras finitas de partículas, la evaluación numérica de esta fdp debe ser para un intervalo finito Δv alrededor de v . En esta parte del cálculo, con las posiciones y los vd de las partículas ya determinados, el programa identifica cuales de las N partículas poseen vd en el intervalo $v \pm \Delta v$ y guarda esta información etiquetándola. Luego, considerando como partículas de referencia sólo las etiquetadas, el código selecciona la primera de ellas y determina cuantos vecinos de cualquier tipo se encuentran entre las superficies esféricas de volúmenes ω y $\omega + \Delta\omega$ centrados en dicha partícula [Fig. 5.1 (B)]. Este procedimiento se repite barriendo todo el rango de valores de ω deseado y para todas las partículas etiquetadas, luego se promedia sobre el total de partículas seleccionadas obteniéndose valores de $g_v(\omega)$. Resultados numéricos para n_v y $g_v(\omega)$ se presentan en la Sec. 5.2.1.

Finalmente, el código evalúa la fdp $g_{vv'}(\omega)$ para configuraciones como la mostrada en la Fig. 5.1 (C). El procedimiento es en esencia el mismo que en el caso $g_v(\omega)$, pero con la diferencia que el programa busca exclusivamente vecinos con vd en el intervalo $v' \pm \Delta v'$ y entre las superficies esféricas de volúmenes ω y $\omega + \Delta\omega$. Agiliza ampliamente los cálculos etiquetar previamente a la evaluación las partículas que pertenecen a los sub-grupos con vd $v \pm \Delta v$ y $v' \pm \Delta v'$. Resultados de simulaciones para $g_{vv'}(\omega)$ son expuestos en las Sec. 5.2.2 y 5.2.3. La mayoría de los cálculos se han efectuado con un procesador Intel(R) Core(TM) Duo con memoria 3.9Giga-Bites y velocidad 2.93Giga-Hertz. El tiempo promedio de cálculo de una simulación con la evaluación de $g_{vv'}(\omega)$ para $N = 10^7$ partículas es de aproximadamente de 2-5 días para $D = 1, 2$ y 3.

Dado que a partir de consideraciones teóricas conocemos las expresiones analíticas de las funciones n_v y $g_v(\omega)$, usamos primero esos resultados para poner a prueba el código.

5.2.1. Puesta a Prueba de las Simulaciones

La distribución de volumen disponible n_v para un gas ideal en espacios de cualquier dimensión D adopta la forma analítica (4.21),

$$n_v = n^2 e^{-nv}.$$

Resultados de simulaciones con $N = 2 \times 10^4$ para $D = 1, 2$ y 3 se muestran en la Fig. 5.5, donde las curvas punteadas corresponden a la expresión (4.21) y las continuas a las simulaciones. Vemos que hay un excelente acuerdo entre las curvas teóricas y experimentales, hecho que provee un importante sustento a las deducciones analíticas de la distribución n_v y del vd definido por (4.22). Algo para destacar es que con una muestra relativamente pequeña de puntos como es $N = 2 \times 10^4$, los resultados numéricos se ajustan satisfactoriamente a la distribución analítica. Hemos verificado que el ruido numérico que manifiestan las curvas procedentes de las simulaciones se reduce paulatinamente al aumentar N .

Por su parte, la fdp $g_v(\omega)$ dada por la ec. (4.24) es reproducida también adecuadamente por los experimentos numéricos. Resultados con $v = (0.5 \pm 0.02)\langle v \rangle$ y $N = 10^6$ correspondientes a $D = 1, 2$ y 3 se muestran en la Fig. 5.6, donde las curvas de segmentos representan ajustes analíticos realizados con (4.24), mientras que las curvas continuas representan los resultados numéricos. La singularidad observada en $\omega = v$ es producida por la contribución del vecino más cercano, $g_v^{(1)}(\omega)$ dado por la ec. (5.24), y es confirmada en cada caso por los experimentos numéricos con la presencia de un pico. El volumen ω de búsqueda de vecinos recorre cierto intervalo $(\omega_{min}, \omega_{max})$, siendo ω_{max} algún valor mayor que v pero sin superarlo por mucho (digamos $\omega_{max} \sim 4v$), dado que la situación $\omega_{max} \gg v$ no aporta información nueva y aumenta

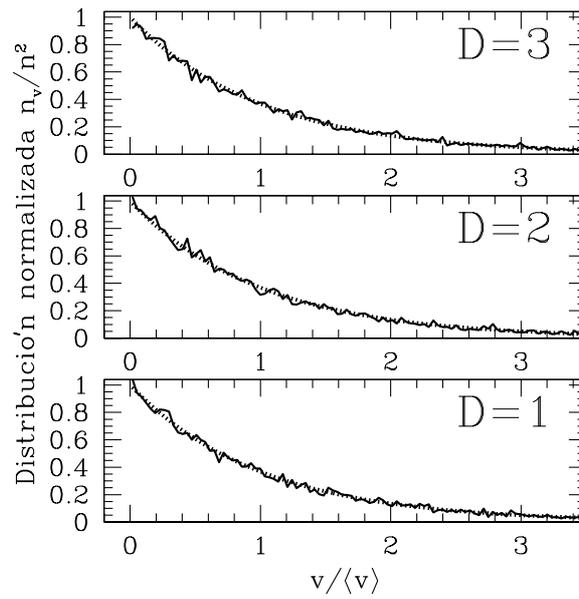


Figura 5.5: Cálculo de n_v como función de v en $D = 1, 2$ y 3 . Las curvas punteadas corresponden a la predicción teórica, mientras que los resultados de simulaciones con $N = 2 \times 10^4$ son representados por las curvas continuas. El paso Δv en estas simulaciones es constante y de ancho igual a $0.035\langle v \rangle$.

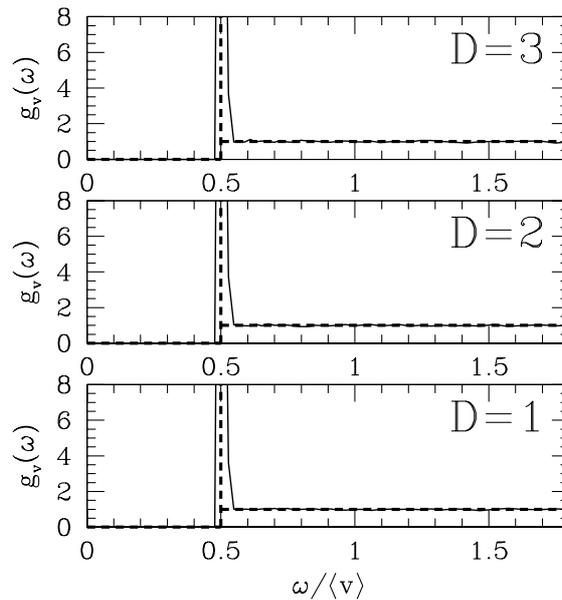


Figura 5.6: Cálculo de g_v como función de ω para partículas con $vd v = (0.5 \pm 0.02)\langle v \rangle$ en $D = 1, 2$ y 3 . Las curvas de segmentos corresponden a la predicción teórica dada por la ec. (4.24). Los resultados de simulaciones con 10^6 partículas (aproximadamente 2.4×10^4 partículas fueron seleccionadas con el vd elegido para cada caso) son representados por las curvas continuas.

los tiempos de integración. En un primer momento seleccionamos $\omega_{min} = 0$. Posteriormente, una vez confirmado que los resultados numéricos reproducen satisfactoriamente los analíticos, y en especial que $g_v(\omega) = 0$ para $\omega < v$, el código fue optimizado seleccionando $\omega_{min} \lesssim v$. En conclusión, los resultados mostrados en la Fig. 5.6 son otro sustento a la identificación del vd (4.22).

Es importante mencionar que la selección del intervalo $v \pm \Delta v$ para el cual se determina

$g_v(\omega)$ influye directamente en los resultados de las simulaciones. Seleccionar Δv con valores cada vez más pequeños conlleva picos de $g_v(\omega)$ más altos y finos en $\omega = v$, pero con un ruido numérico que se incrementa⁴ en la región $\omega > v$, mientras que seleccionar valores Δv grandes produce picos más bajos y anchos en $\omega = v$, pero con poco ruido numérico en la región $\omega > v$. Sólo en el límite termodinámico, inalcanzable en la práctica, podríamos seleccionar $\Delta v \rightarrow 0$, obteniendo la consecuente singularidad en $\omega = v$ de ancho $\rightarrow 0$. En las simulaciones debemos considerar además la elección del paso $\Delta\omega$ para la búsqueda de vecinos, el cual tiene un efecto similar al recién descrito Δv aunque sin influir sobre el número de partículas de referencia $n_v\Delta v$. En resumen: elecciones de Δv y $\Delta\omega$ cada vez más pequeños favorecen la inferencia de detalles finos pero superpuestos con un creciente ruido numérico sólo disminuido con un aumento de N , mientras que elecciones de Δv y $\Delta\omega$ grandes, no favorecen la detección de detalles finos pero poseen bajo ruido numérico. Esta situación se repite en la determinación numérica de $g_{vv'}(\omega)$, aunque se torna en este caso más complicada porque entra en juego v' y porque además esta fdp posee una estructura más compleja por analizar.

Los resultados numéricos mostrados hasta aquí son similares a los desarrollados en Rohrmann (2005), y sirvieron para poner a prueba el programa de cálculo. A continuación nos ocupamos de la evaluación de $g_{vv'}(\omega)$.

5.2.2. Resultados Numéricos para $g_{vv'}(\omega)$

Simulaciones con $N = 2 \times 10^4$ y $N = 10^6$ partículas son suficientes respectivamente para evaluar de manera adecuada las funciones n_v y $g_v(\omega)$ (Figs. 5.5 y 5.6). Sin embargo, estas muestras son insuficientes para estudiar $g_{vv'}(\omega)$ porque en este caso se deben considerar partículas de referencia con vd v y buscar además vecinos con cierto vd v' . Es necesario entonces enriquecer la evaluación de $g_{vv'}(\omega)$ a través de un aumento de N en los experimentos. En nuestro estudio hemos encontrado adecuado utilizar $N = 10^7$.

La forma funcional de $g_{vv'}(\omega)$ para un gas ideal unidimensional es dada por la expresión (5.36), y por (5.39) en el caso $D > 1$. Estas expresiones son confirmadas numéricamente, como se muestra en las Figs. 5.7, 5.8 y 5.9, que corresponden respectivamente a las dimensiones $D = 1, 2$ y 3 . Las curvas continuas representan los resultados numéricos, mientras que las curvas a trazos representan ajustes realizados con (5.36) y (5.39). El valor del par (v, v') en todos los casos es $v = (1 \pm 0.03)\langle v \rangle$ y $v' = (0.5 \pm 0.03)\langle v \rangle$. La experiencia muestra que ésta es una muy buena elección para inferir los rasgos generales de la fdp. Sin embargo, para mejorar la manifestación numérica de la delta de Dirac ubicada en $\omega = v_>$ (para todo D) y aquella en $\omega = \omega_{vv'}$ (para $D = 1$), los picos numéricos correspondientes han sido determinados con $v = (1 \pm 0.003)\langle v \rangle$ y $v' = (0.5 \pm 0.003)\langle v \rangle$.

En las Figs. 5.7, 5.8 y 5.9 se indican las regiones donde cada término de (5.36) y (5.39) aporta cantidades distintas de cero. El término A_v no aparece en los resultados simplemente por el hecho que $v \neq v'$. Para el caso $v = v'$, A_v estaría presente y se superpondría con $B_{vv'}$ en los gráficos, a pesar de ello su aporte es confirmado numéricamente por otra vía (Sec. 5.2.3). En las Figs. 5.8 y 5.9 las curvas a trazos en $\omega \in (v_>, \omega_{vv'})$, responden al uso de funciones empíricas que mejor ajustan los resultados numéricos, tomando en cuenta que las funciones $C_{vv'}(\omega)$ y $E_{vv'}(\omega)$ en la expresión (5.39) no son conocidas explícitamente.

En el análisis de $g_{vv'}(\omega)$ para $D = 1$ (Fig. 5.7), las simulaciones confirman: la ausencia de pares de partículas en configuraciones con $\omega < v_>$; la presencia de dos singularidades, una en $\omega = v_>$ ($= 1\langle v \rangle$) y otra en $\omega = \omega_{vv'}$ ($= 1.5\langle v \rangle$); una caída de la probabilidad de ocurrencia de pares de partículas con $\omega \in (v_>, \omega_{vv'})$; y la ausencia de correlaciones [$g_{vv'}(\omega) = 1$] entre

⁴El motivo del creciente ruido numérico es la disminución del número de partículas con vd en el intervalo $v \pm \Delta v$, sobre las cuales hay una promediación en la obtención de $g_v(\omega)$, como describimos en la Sec. 5.2.

pares (v, v') para $\omega > \omega_{vv'}$. En especial, el valor de la fdp en la región con $\omega \in (v_>, \omega_{vv'})$ es decreciente con ω y es producido por la configuración de vecinos con vd solapados dado por la ec. (5.35).

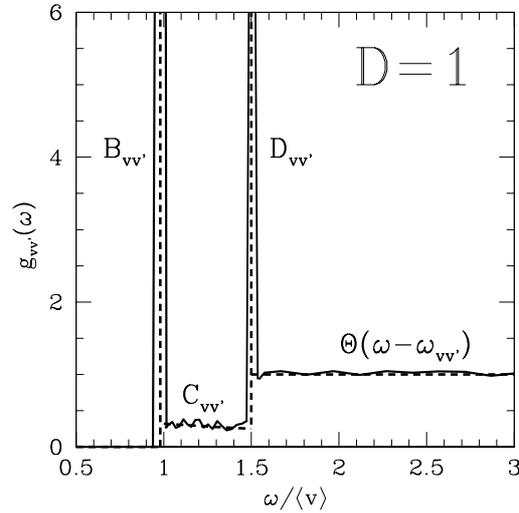


Figura 5.7: Evaluación de $g_{vv'}$ como función de ω para $D = 1$. En curva continua se muestran resultados de una simulación con $N = 10^7$, $v = (1 \pm 0.03)\langle v \rangle$ y $v' = (0.5 \pm 0.03)\langle v \rangle$. La curva a trazos representa la expresión (5.36). En esta simulación fueron seleccionadas aproximadamente 2.2×10^5 partículas con vd v y 3.6×10^5 con vd v' .

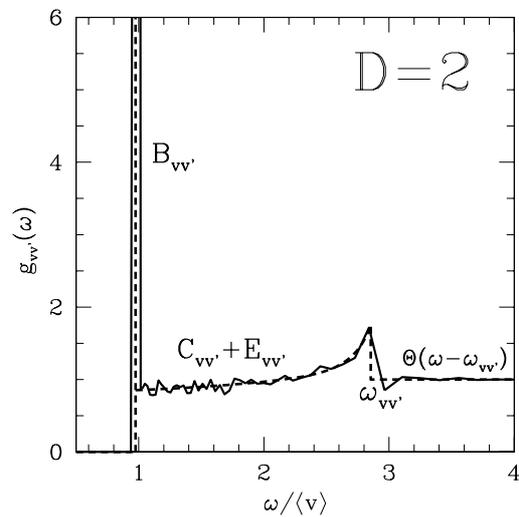


Figura 5.8: Equivalente a la Fig. 5.7, pero para dimensión $D = 2$. La línea a trazos corresponde a un ajuste analítico basado en la ec. (5.39).

A partir de cálculos numéricos de $g_{vv'}(\omega)$ en espacios bidimensionales se derivan conclusiones similares al caso $D = 1$ (ver Fig. 5.8). Sin embargo, la segunda singularidad que se observó para $D = 1$ ahora es reemplazada por un máximo local finito ubicado en $\omega = \omega_{vv'}$ ($= 2.9\langle v \rangle$) y la fdp resulta creciente con ω en el intervalo $(v_>, \omega_{vv'})$. El reemplazo de la singularidad por un máximo local ubicado en $\omega = \omega_{vv'}$, es debido a que la configuración del primer vecino compartido $[E_{vv'}(\omega)]$ en $D = 2$ es posible para un intervalo finito de valores de ω , mientras que en $D = 1$ sólo es posible en la configuración $\omega = \omega_{vv'}$.

Finalmente, para $g_{vv'}(\omega)$ en espacios de dimensión $D = 3$ se deducen conclusiones similares al caso $D = 2$ (ver Fig. 5.9). Se observa un máximo secundario ubicado en $\omega = \omega_{vv'}$ ($= 5.8\langle v \rangle$) y un crecimiento con ω en $(v_>, \omega_{vv'})$. Sin embargo, el valor del máximo secundario y la tasa de crecimiento de la fdp en $(v_>, \omega_{vv'})$ son menores a los obtenidos en el caso bidimensional. Aclaramos que la fdp no puede ser uniforme respecto a ω en el intervalo $(v_>, \omega_{vv'})$ porque de ser así no se satisface la condición (5.10) como es fácil verificar usando (5.39). En la Fig. 5.9 se dibujó una línea vertical punteada ubicada en $\omega = \omega_{vv'}$ para facilitar la visualización del máximo local, y una línea horizontal punteada de altura igual a 1 para distinguir la pendiente del resultado numérico en el intervalo $(v_>, \omega_{vv'})$.

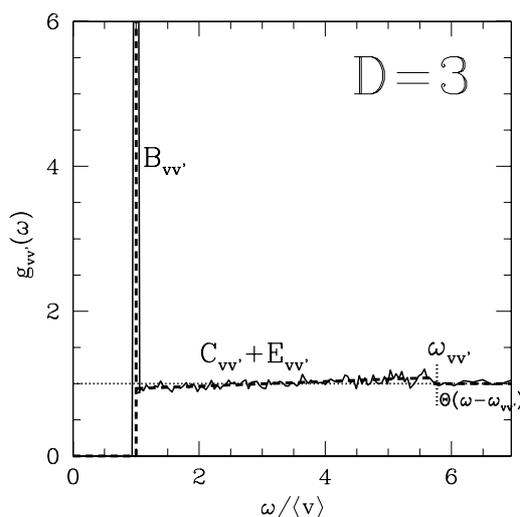


Figura 5.9: Equivalente a la Fig. 5.8, pero para dimensión $D = 3$.

En relación con el comportamiento que muestra la función $g_{vv'}(\omega)$ en $v_> < \omega < \omega_{vv'}$ (configuración de vd solapados) para espacios de dimensiones crecientes, observamos lo siguiente. Para $D = 1$, la fdp disminuye con ω con valores inferiores a 1 y posee una singularidad en $\omega = \omega_{vv'}$. Para $D > 1$, la fdp crece monótonamente con ω , partiendo con valores inferiores a 1, superando luego la unidad y finalizando con un pico en $\omega = \omega_{vv'}$ cuya magnitud decae con la dimensión. En definitiva, para espacios de dimensiones crecientes se observa la tendencia $C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega) \rightarrow 1$ para el intervalo $(v_>, \omega_{vv'})$. Tal comportamiento apoya la conjetura de que en el límite $D \rightarrow \infty$ se cumple que $C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega) = 1$. Este resultado conjuntamente con $\xi = 0$ [ec. (5.28)] en $D \rightarrow \infty$ conduce a través de las ecs. (5.10) y (5.39) a la expresión (5.18). Por lo tanto, la ec. (5.18) parece ser la forma asintótica correcta que adopta $g_{vv'}(\omega)$ para un gas ideal en el límite de dimensión infinita.

5.2.3. Funciones de peso en $g_{vv'}(\omega)$

A continuación analizamos por medio de simulaciones numéricas las distintas contribuciones a $g_{vv'}(\omega)$ presentes en la ec. (5.13). Para este fin, el código opera de manera similar a lo descrito en la Sec. 5.2, pero ahora considera separadamente los distintos tipos de vecinos con vd v y v' que contribuyen a la fdp. Resultados de simulaciones para $g_{vv'}(\omega)$ desglosada en sus componentes se muestran en las Figs. 5.10, 5.11 y 5.12 para dimensiones $D = 1, 2$ y 3 , respectivamente. Los parámetros (N, v, v' , etc.) seleccionados en las simulaciones son los mismos de las Figs. 5.7, 5.8 y 5.9.

La Fig. 5.10 corresponde al caso $D = 1$. Representadas por curvas punteadas, las configuraciones de primer vecino no mutuo ($B_{vv'}$) y primer vecino compartido ($D_{vv'}$) sólo aportan

cantidades distintas de cero (picos) en proximidad a $\omega = v_>$ y $\omega = \omega_{vv'}$, respectivamente. Estos resultados respaldan la naturaleza singular de dichas contribuciones en $g_{vv'}(\omega)$. Representada con una curva continua vemos los resultados correspondientes a configuraciones de partículas con vd solapados [$C_{vv'}(\omega)$], los cuales se circunscriben al intervalo $(v_>, \omega_{vv'})$, siendo ésta la única contribución a la fdp en este intervalo. Finalmente, en curva a trazos se dibuja la contribución de pares de partículas con $\omega > \omega_{vv'}$. Esta curva oscila entorno al valor unidad e indica la ausencia de correlaciones entre pares con vd que no se intersectan. La suma de todas las contribuciones que se muestran en la Fig. 5.10 reproduce la Fig. 5.7.

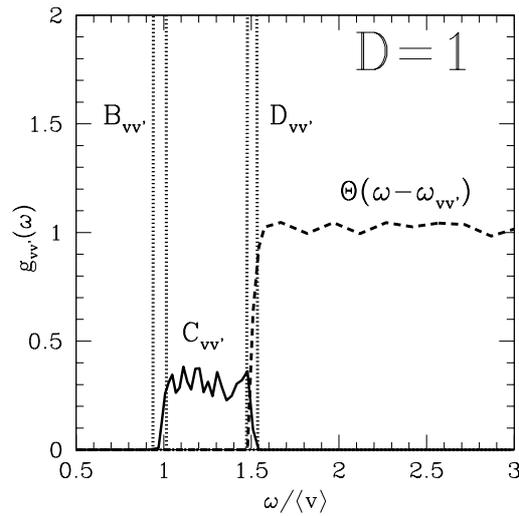


Figura 5.10: Evaluaciones de las distintas contribuciones a $g_{vv'}(\omega)$ en $D = 1$, como función de ω para una simulación con $N = 10^7$, $v = (1 \pm 0.03)\langle v \rangle$ y $v' = (0.5 \pm 0.03)\langle v \rangle$. Las curvas punteadas representan las configuraciones de primer vecino y primer vecino compartido, cuyos aportes con funciones deltas de Dirac en la ec. (5.36), fueron determinados con $v = (1 \pm 0.003)\langle v \rangle$ y $v' = (0.5 \pm 0.003)\langle v \rangle$.

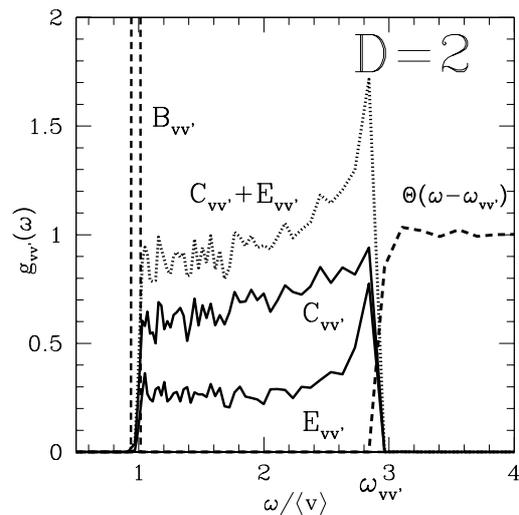


Figura 5.11: Equivalente a la Fig. 5.10, pero para dimensión $D = 2$.

Un análisis similar al anterior puede realizarse para la función $g_{vv'}(\omega)$ en dimensiones $D = 2$ y 3 . Las simulaciones indican que las diferencias respecto del caso $D = 1$ radican

esencialmente en las contribuciones que proceden de pares de partículas con vd solapados $[C_{vv'}(\omega)]$ y de pares con el primer vecino compartido $[E_{vv'}(\omega)]$. En las Figs. 5.11 y 5.12 vemos que $C_{vv'}(\omega)$ es una función creciente con ω en $(v_>, \omega_{vv'})$. Por otro lado, la contribución del primer vecino compartido $[E_{vv'}(\omega)]$ ahora aporta cantidades distintas de cero para ω en $(v_>, \omega_{vv'})$. En $D = 2$, la función $E_{vv'}(\omega)$ parece ser levemente decreciente con ω en proximidad de $v_>$ pero luego es claramente creciente hacia el final del intervalo. Esta función es sin duda decreciente con ω para $D = 3$. Además, notamos que la configuración de primer vecino compartido posee una densidad de probabilidad más alta en un gas bidimensional que en uno tridimensional. La suma de todas las contribuciones que se muestran en las Figs. 5.11 y 5.12 reproducen las Figs. 5.8 y 5.9, respectivamente.

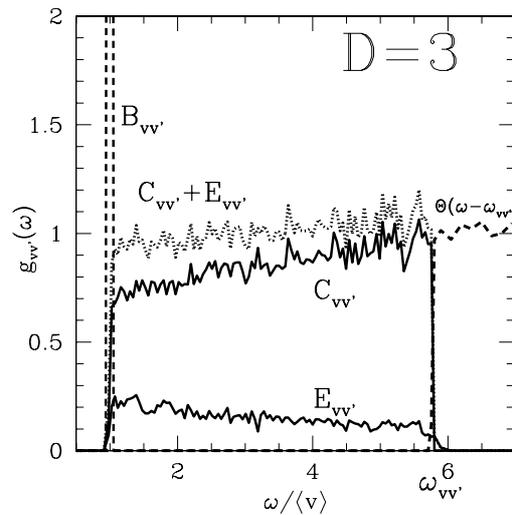


Figura 5.12: Equivalente a la Fig. 5.10, pero para dimensión $D = 3$.

Para continuar con el análisis de las contribuciones a $g_{vv'}(\omega)$ por parte de vecinos con vd solapados hacemos uso de la Fig. 5.13. Esta figura ilustra para el caso bidimensional dos configuraciones diferentes de pares de partículas con vd solapados, donde a y b son partículas que poseen vd v y v' respectivamente. La región de intersección de los vd en la situación (A) es mayor que en (B), mientras que el valor del volumen de búsqueda ω en la situación (A) es menor que en (B). Para gases en $D = 1$, $C_{vv'}(\omega)$ decrece con ω en $(v_>, \omega_{vv'})$ [ver Fig. 5.10], lo que nos dice que el equivalente unidimensional a la situación (A) de la Fig. 5.13 es más probable de ocurrir que la situación (B). En cambio, para gases en dimensiones $D = 2$ y 3

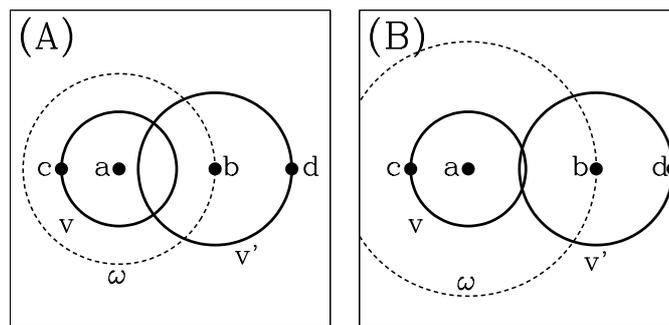


Figura 5.13: Representación espacial bidimensional de dos configuraciones distintas de pares de partículas con vd solapados. En el caso (A) la región de intersección de los vd es mayor que en (B).

la situación antes vista se invierte (ver Figs. 5.11 y Fig. 5.12). Una explicación de ello es que los vecinos más cercanos de un par de partículas con vd solapados no pueden estar en las porciones de superficies de v y v' que se intersectan, exceptuando los bordes de intersección. Esto conduciría a que la configuración de la Fig. 5.13 (B) sea más factible de ocurrir que la (A) para $D > 1$.

Por otro lado, la Fig. 5.14 ilustra situaciones análogas a las de la Fig. 5.13 pero para configuraciones con primer vecino compartido⁵. En un gas bidimensional [ver Fig. 5.11], la contribución del primer vecino compartido [$E_{vv'}(\omega)$] posee una tendencia algo similar a la de vecinos con vd solapados [$C_{vv'}(\omega)$], es decir, en rasgos generales la configuración de la Fig. 5.14 (B) tiende a ser más probable que la de (A). En un gas tridimensional, en cambio, la situación (A) de la Fig. 5.14 es más probable de ocurrir que la (B). Este cambio de comportamiento de la función $E_{vv'}(\omega)$ con la dimensión, compensado con la conducta de la función $C_{vv'}(\omega)$, es el que conduce a que $C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega) \rightarrow 1$ en el intervalo $(v_>, \omega_{vv'})$ para $D \rightarrow \infty$.

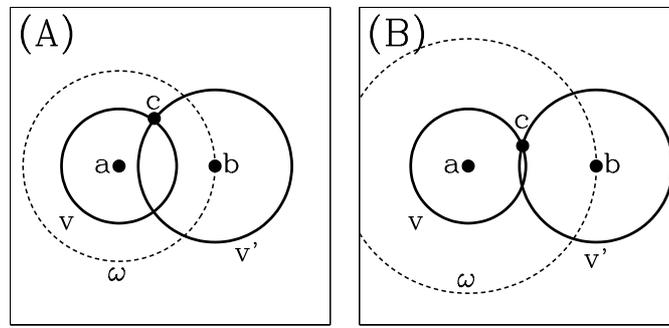


Figura 5.14: Representación espacial bidimensional de dos configuraciones distintas de pares de partículas con el primer vecino compartido. En el caso (A) la región de intersección de los vd es mayor que en (B). Estas configuraciones no son válidas para el caso unidimensional.

De todas las simulaciones para $g_{vv'}(\omega)$ vistas hasta ahora no es posible inferir numéricamente las funciones de peso A_v , $B_{vv'}$ y $D_{vv'}$. Para estudiar estas funciones, que tienen en cuenta las contribuciones a $g_{vv'}(\omega)$ por vecino mutuo, primer vecino no mutuo y primer vecino compartido (para $D = 1$), y que han sido expresadas analíticamente por las ecs. (5.26), (5.27) y (5.33) respectivamente, deben llevarse a cabo simulaciones adicionales. Para la función A_v , la expresión (5.26) es confirmada por simulaciones con $N = 5 \times 10^5$ partículas en $D = 1, 2$ y 3 , cuyos resultados se pueden apreciar en la Fig. 5.15. En este caso el proceso de la simulación es el siguiente. De la Sec. 5.1.2 sabemos que la contribución de vecinos mutuos a la fdp clásica $g(\omega)$ es dada por la ec. (5.21), luego usando las ecs. (5.19) y (5.20) se obtiene

$$g^m(\omega) = n^2 A_\omega e^{-2n\omega}, \quad (5.40)$$

siendo $ng^m(\omega)d\omega$ el número medio de partículas ubicadas entre las superficies de volúmenes esféricos ω y $\omega + d\omega$ de una partícula cualquiera y que son vecinas mutuas de la misma. De esta manera, el código considera una partícula cualquiera del sistema y determina la posibilidad de que posea un vecino mutuo entre las superficies de ω y $\omega + d\omega$ (con $\omega = v$), luego repite el proceso para todas las partículas del sistema. De la promediación se obtiene la cantidad $ng^m(\omega)d\omega$ por medio de la cual evaluamos a A_v . El código continúa de esta forma hasta barrer el rango de valores de ω deseado.

⁵Las configuraciones de la Fig. 5.14 no son válidas para el caso $D = 1$, dado que en ese caso la intersección de los vd ocurre sólo en un punto.

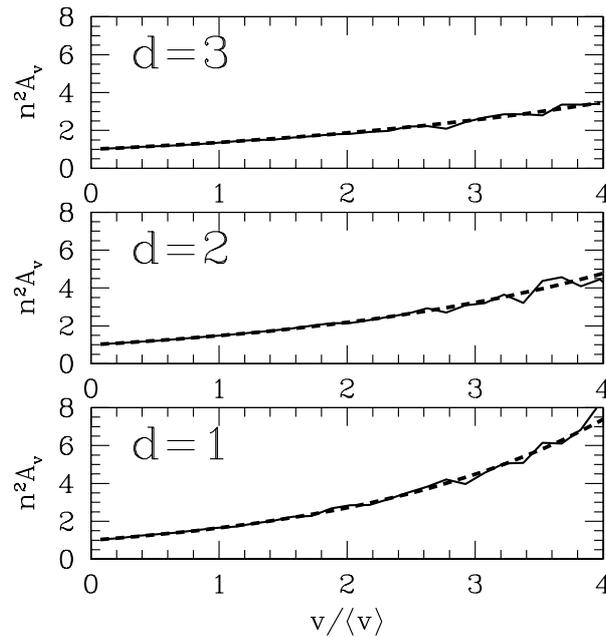


Figura 5.15: Cálculo de A_v como función de v en $D = 1, 2$ y 3 . Las curvas a trazos corresponden a la expresión analítica (5.26), mientras que los resultados de simulaciones con $N = 5 \times 10^5$ partículas son representados por las curvas continuas.

En el proceso de evaluación numérica de $B_{vv'}$, se tiene en cuenta la definición de configuración de primer vecino con $v < v'$ dada en la Sec. 5.1. Primero se fija un valor del vd v' y un ancho $\Delta v'$, luego se determinan las partículas del sistema que tienen vd en $(v', v' + \Delta v')$ y se guarda esta información. El paso siguiente es realizar el mismo proceso anterior pero

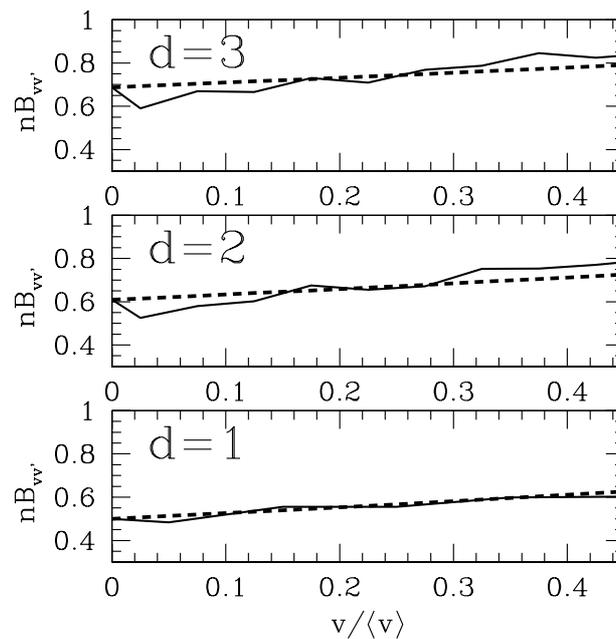


Figura 5.16: Cálculo de $B_{vv'}$ como función de v para $D = 1, 2$ y 3 . Las curvas continuas representan los resultados de simulaciones con $N = 10^6$ y para un v' fijo en el intervalo $(0.5, 0.6)\langle v \rangle$, mientras que las curvas a trazos corresponden a la expresión analítica (5.27).

para partículas con vd en $(v, v + \Delta v)$, siendo v un valor que irá cambiando respetando la condición $v < v'$, y adoptando un valor fijo para Δv . Luego se determina el número medio de partículas con vd v' que poseen por vecino más cercano a una partícula con vd v . De esa evaluación surge el valor de $B_{vv'}$. El proceso se repite barriendo el rango de valores de v tal que $v < v'$. Resultados de estas evaluaciones se muestran en la Fig. 5.16 para $N = 10^6$ partículas en dimensiones $D = 1, 2$ y 3 , y con $v \in (0, 0.5)\langle v \rangle$, $\Delta v = 0.05\langle v \rangle$, $v' = 0.5\langle v \rangle$ y $\Delta v' = 0.1\langle v \rangle$. Las curvas a trazos proceden de la expresión analítica (5.27) y las curvas continuas son los resultados de las simulaciones. La gráfica muestra que los experimentos numéricos confirman satisfactoriamente el resultado teórico.

Por último mostramos la evaluación numérica de la función $D_{vv'}$ para gases unidimensionales. El proceso de cálculo es similar al descrito para la función $B_{vv'}$, pero en este caso se determina el número medio de partículas con vd v que comparten el primer vecino con una partícula con vd v' . Los rangos de valores para v y v' son independientes. En la Fig. 5.17 se muestra el cálculo de $D_{vv'}$ para un rango de valores de v en el intervalo $(0, 3)\langle v \rangle$ y manteniendo un valor fijo de $v' = 0.5\langle v \rangle$. Estos cálculos se realizaron con $N = 5 \times 10^5$ partículas y $\Delta v = \Delta v' = 0.1\langle v \rangle$. Los resultados de la simulación (línea continua) muestran un buen acuerdo con la expresión teórica (5.33).

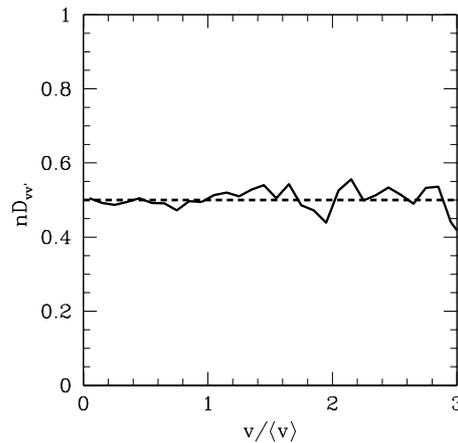


Figura 5.17: Cálculo de $D_{vv'}$ como función de v para $D = 1$. La curva continua representa los resultados de una simulación con $N = 5 \times 10^5$ y para v' en $(0.5, 0.6)\langle v \rangle$, mientras que la curva a trazos corresponde a la expresión analítica (5.33).

Con estos resultados concluimos el estudio de la fdp condicional $g_{vv'}(\omega)$ para un gas ideal. Estos resultados servirán de referencia para entender la fdp condicional correspondiente a sistemas más complejos compuestos por partículas interactuantes.

Síntesis y Conclusiones

Los modelos mecánico-estadísticos para fluidos tienen un papel fundamental en el estudio teórico de estrellas y planetas gigantes. Por un lado, las ecuaciones de estado cumplen un rol decisivo en la determinación de la estructura interna de estos cuerpos. Por otro lado, la evaluación de las capacidades de absorción y de emisión de radiación, los calores específicos y otras funciones de respuesta del material, son fundamentales para calcular el flujo de energía en tales medios y, particularmente, para elaborar espectros sintéticos de emisión de radiación que ayudan a la interpretación de las observaciones astronómicas.

Hemos visto que la técnica de minimización de la energía libre de Helmholtz (*A-min*) provee un procedimiento versátil para la construcción de modelos de gases de interés astrofísico. En particular, dentro del contexto de *A-min*, observamos que el desarrollo de modelos basados en particiones del espacio permite obtener un formalismo donde las propiedades termodinámicas y de estructura espacial de un fluido pueden ser tratadas en forma simultánea y autoconsistentemente. En especial, este formalismo tiene la potencialidad de poder evaluar poblaciones de mezclas químicas, clasificando éstas en estados internos y también de acuerdo al grado de perturbación al que están sometidas las partículas por la interacción con sus vecinas. Esta es una propiedad necesaria para un adecuado cálculo de la opacidad radiativa en la proximidad del límite de series de líneas espectrales.

La técnica de particiones del espacio asigna a cada partícula un espacio llamado el volumen disponible (vd) v de la partícula, el cual está determinado por la distancia de la partícula de referencia a su vecino más cercano. El estado termodinámico y estructural del gas es descrito por una función distribución N_v que contabiliza la densidad de partículas que tienen un valor de vd v en el rango comprendido entre cero y el volumen V ocupado por el gas. La aplicación del formalismo requiere implementar funciones de distribución de pares (fdp), las cuales son usadas en la evaluación de la energía del fluido originada por las fuerzas de interacción entre las partículas. La fdp $g(\omega)$ describe para un sistema desordenado de N partículas, la probabilidad de hallar cualquier vecino en la superficie de un volumen esférico ω centrado en una partícula de referencia. La fdp condicional $g_v(\omega)$, realiza una descripción similar pero tomando en cuenta que la partícula de referencia posee un determinado vd v , mientras que $g_{vv'}(\omega)$ evalúa la probabilidad de pares de partículas con vd v y v' .

La fdp $g(\omega)$ es ampliamente conocida en teorías de líquidos, pero las fdp condicionales $g_v(\omega)$ y $g_{vv'}(\omega)$ han sido introducidas por el formalismo de particiones del espacio. Ha sido el objetivo principal de este trabajo la determinación de la función $g_{vv'}(\omega)$ para el modelo de gas más simple, que consiste de un conjunto de partículas no interactuantes distribuidas espacialmente en forma aleatoria. El estudio de la fdp se ha realizado a través de análisis teóricos y por medio de experimentos numéricos con el uso de programas de computación desarrollados para tal fin. El sistema analizado posee una fdp convencional extremadamente simple, $g(\omega) = 1$, sin embargo, la búsqueda de pares de partículas condicionada por la información de que una o ambas partículas del par posean determinados vd rompe esa simplicidad. Esto último ocurre por la presencia de correlaciones en las probabilidades de

hallar tales pares.

El presente estudio ha mostrado que la función $g_{vv'}(\omega)$ para un conjunto de partículas distribuidas aleatoriamente con densidad n en un espacio Euclídeo con D dimensiones, se puede expresar en la siguiente forma

$$g_{vv'}(\omega) = \left[\frac{e^{\xi nv}}{n^2} \delta(v - v') + (1 - \xi) \frac{e^{\xi nv_{<}}}{n} \right] \delta(\omega - v_{>}) + \frac{\delta_{1,D}}{2n} \delta(\omega - \omega_{vv'}) \\ + \{C_{vv'}(\omega) + (1 - \delta_{1,D})E_{vv'}(\omega)\} \Theta(\omega_{vv'} - \omega) \Theta(\omega - v_{>}) + \Theta(\omega - \omega_{vv'}),$$

donde $v_{<} = \min\{v, v'\}$, $v_{>} = \max\{v, v'\}$, $\omega_{vv'} = (v^{1/D} + v'^{1/D})^D$, $\xi = 1/2$, $(4\pi - 3\sqrt{3})/(6\pi)$ y $5/16$ para respectivamente $D = 1, 2$ y 3 , $C_{vv'}(\omega) = \exp[n(v + v' - \omega)/2]/4$ para $D = 1$ y ha sido evaluada numéricamente conjuntamente con $E_{vv'}(\omega)$ para $D = 2$ y 3 . Por otro lado, se han presentado pruebas que indican que la forma asintótica de la fdp para $D \rightarrow \infty$ es dada por la expresión precedente con $\xi = 0$, $\omega_{vv'} \rightarrow \infty$ y $C_{vv'}(\omega) + E_{vv'}(\omega) \rightarrow 1$.

En términos generales, la función $g_{vv'}(\omega)$ posee las siguientes características. Es nula para pares de partículas suficientemente próximas entre sí debido a las zonas de exclusión de partículas introducidas por los significados de v y v' . Posee una singularidad producida por las configuraciones de pares en las cuales la partícula con menor vd es primera vecina de la partícula con vd mayor. A esta singularidad se superpone otra si los vd v y v' coinciden, y es consecuencia de pares de partículas que son primeras vecinas una de otra (vecinas mutuas). La probabilidad de ocurrencia de pares de partículas con vd v y v' superpuestos, pero donde ninguna de las partículas del par es primera vecina de la otra, presenta efectos de correlación que dependen de las dimensiones del espacio físico. En el caso unidimensional ($D = 1$), la función $g_{vv'}(\omega)$ disminuye a medida que aumenta la distancia entre el par de partículas, hasta finalizar en una singularidad producto de pares donde ambas partículas comparten el primer vecino, lo cual sucede cuando los vd v y v' se intersectan en un sólo punto. En dimensiones superiores ($D = 2, 3$), la fdp condicional crece con la distancia entre el par de partículas finalizando en un pico de magnitud decreciente con D . En este caso, la superposición de vd puede darse con o sin compartir el primer vecino. En todos los casos, cuando la separación entre el par de partículas con vd v y v' es suficientemente grande tal que los vd no se superponen, la función $g_{vv'}(\omega)$ toma el valor unidad que representa la ausencia de correlaciones.

En la continuación de esta investigación se presentan varios desafíos interesantes. Primero, la búsqueda de expresiones analíticas para las funciones $C_{vv'}(\omega)$ y $E_{vv'}(\omega)$ en dimensiones $D = 2$ y 3 . Segundo, la extensión del estudio de $g_{vv'}(\omega)$ para sistemas de partículas con distintas leyes de interacción, siendo el caso más simple el fluido de esferas duras. Tercero, la extensión de la fdp condicional a sistemas compuestos por diferentes clases de objetos. Paralelamente, a medida que se avanza en la comprensión de la función de distribución pares, se contará con la posibilidad de aplicar el formalismo de particiones del espacio a diversos sistemas de interés astrofísico (por ej., fluidos estelares) y eventualmente también en el campo de otras ciencias.

Referencias

- [1] Abramowitz M. & Stegun I. A., 1965, “Handbook of Mathematical Functions”, Dover, New York.
- [2] Aste T., Szeto K. Y. & Tam W. Y., 1996, Phys. Rev. E 54, 5482
- [3] Balescu R., 1975, “Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics”, Wiley, New York.
- [4] Barcza S., 1979, A&A, 72, 26.
- [5] Baus M. & Colot J. L., 1987, Phys. Rev. A 36, 3912.
- [6] Bergeron P., Wesemael F. & Fontaine G., 1991, ApJ., 367, 253.
- [7] Bergeron P., 2001, ApJ., 558, 369.
- [8] Busquet M., 1982, Phys. Rev. A 25, 4, 2302.
- [9] Clark P. J., 1956, Science, 123, 373.
- [10] Clark P. J. & Evans F. C., 1955, Science, 121, 397.
- [11] Callen H. B., 1981, “Termodinámica” 1a ed., AC, Madrid.
- [12] Cox J. P. & Giuli R. T., 1968, “Principles of Stellar Structure” vol.1, Science Publisher, New York.
- [13] Cox J. P. & Giuli R. T., 1968, “Principles of Stellar Structure” vol.2, Science Publisher, New York.
- [14] Cox T. F., 1981, Biometrics, 37, 367.
- [15] Dacey M. F., 1969, Geographical Analysis, 1, 385.
- [16] Däppen W., Anderson L. S. & Mihalas D., 1987, ApJ., 319, 195.
- [17] Ebeling W., Kraeft W. D., Kremp D. & Ropke G., 1985, ApJ., 290, 24.
- [18] Eisenstein A. & Gingrich N. S., 1942, Phys. Rev., 62, 261.
- [19] Eyring H. J. & Hirschfelder O., 1937, J. Chem. Phys., 41, 250.
- [20] Farjas J. & Roura P., 2008, Phys. Rev. B, 78, 144101.
- [21] Fermi E., 1924, Zs. Phys., 26, 54.

- [22] Fowler R. H., 1936, "Statistical Mechanics", Cambridge University Press.
- [23] Fontaine G., Graboske H. C. & Van Horn H. M., 1977, *ApJS.*, 35, 293.
- [24] Getzin S., Wiegand T., Wiegand K. & He F., 2008, *J. Ecology* 96, 807.
- [25] Gingrich N. S., 1943, *Rev. Mod. Phys.*, 15, 90.
- [26] Graboske H. C., Harwood D. J. & Rogers F. J., 1969, *Phys. Rev.*, 186, 210.
- [27] Graboske H. C., Harwood D. J. & De Witt H. E., 1971, *Phys. Rev. A*, 3, 1419.
- [28] Griem H., 1962, *Phys. Rev.* 128, 3, 997.
- [29] Griem H., 1997, *Principles of Plasma Spectroscopy*, Cambridge
- [30] Hansen J. P. & McDonald I.R., 1986, "Theory of Simple Liquids" 2nd Edn, Academic, New York.
- [31] Harris G. M., 1959, *J. Chem. Phys.*, 31, 1211.
- [32] Harris G. M., 1962, *Phys. Rev.*, 125, 1131.
- [33] Harris G. M., 1964, *Phys. Rev.*, 133, A 427
- [34] Harris G. M., Roberts J. E. & Trulio J. G., 1960, *Phys. Rev.*, 119, 1832.
- [35] Hill, T. L., 1987, "Statistical Mechanics", Dover, Toronto.
- [36] Holst B., Nettelmann N. & Redmer R., 2007, *Plasma Phys.* 47, 368.
- [37] Holst B., Redmer R. & Desjarlais M. P., 2008, *Phys. Rev. B*, 77, 184201.
- [38] Holtsmark J., 1919, *Ann. d. Phys.*, 58, 577.
- [39] Hubeny I., Hummer D. G. & Lanz T., 1994, *A&A*, 282, 151.
- [40] Hummer D. G. & Mihalas D., 1988, *ApJ*, 331, 794. (H-M)
- [41] Ichimaru S., 1982, *Rev Mod. Phys.*, 54, 1017.
- [42] Iglesias C. A. & Rogers F. J., 2006, *ApJ* 644, 943
- [43] Kerscher M., Pons-Bordería M. J., Schmalzing J., Trasarti-Battistoni R., Buchert T., Martínez V. J. & Valdarnini R., 1999, *ApJ*, 513, 543.
- [44] Kiang T, 1966, *ZA*, 64, 433.
- [45] Kirkwood J., 1950, *J. Chem. Phys.*, 18, 380.
- [46] Kowalski P. M., S. Mazevet S., Saumon D., & M. Challacombe M., 2007, *Phys. Rev. B* 76, 075112
- [47] Landau L. D. & Zeldovitch Ya. B., 1943, *Acta Phys-Chim. URSS* 18, 194.
- [48] Lennard-Jones J. E. & Devonshire A. F., 1937, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 163, 53.
- [49] Lennard-Jones J. E. & Devonshire A. F., 1938, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 165, 1.

-
- [50] Magni G. & Mazzitelli I., 1979, *A&A*, 72, 134.
- [51] Margenau H., Lewis M., 1959, *Rev. Mod. Phys*, 31, 569.
- [52] Marigo P. & Aringer B., 2009, *A&A* 508, 1539
- [53] Martínez V. J., Jones B. J. T., Dominguez-Tenreiro R. & van de Weygaert R., 1990, *ApJ*, 357, 50.
- [54] Mecke K. R., Buchert T. & Wagner, H., 1994, *A&A*, 288, 697.
- [55] Mihalas D., Däppen W. & Hummer D. G., 1988, *ApJ*, 331, 815.
- [56] Mihalas D., Barnard A. J., Cooper J. & Smith E. W., 1974, *ApJ*, 1990, 315.
- [57] Mihalas D., 1978, “Stellar Atmospheres”, 2nd Edn., Freeman & Company, San Francisco.
- [58] Mombach J. C. M. , Vasconcellos M. A. Z. & de Almeida R. M. C., 1990, *J. Phys. D*, 23, 600.
- [59] Nayfonov A., Däppen W., Hummer D. G. & Mihalas D., 1999, *ApJ*, 526, 451.
- [60] Nettelmann N., Holst B., Kietzmann A., French M. & Redme R., 2008, *ApJ* 683, 1217
- [61] Peebles P. J. E., 1993, “Principles of Physical Cosmology”, Princeton University Press, Princeton.
- [62] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T. & Flannery B. P., 1986, “Numerical Recipes” 2nd. Edn., Cambridge University Press, Cambridge.
- [63] Potekhin A., 1996, *Phys. Plasmas* 3, 4156.
- [64] Reichl L. E., 1998, “A Modern Course in Statistical Physics” 2nd Edn., Wiley, New York.
- [65] Rogers F. J., Graboske H. C. & Harwood D. J., 1970, *Phys. Rev. A*, 1, 1577.
- [66] Rogers F. J., Swenson F. J. & Iglesias C. A., 1996, *ApJ* 456, 902.
- [67] Rohrmann R. D., Serenelli A. M., Althaus L. G. & Benvenuto O. G., 2002, *MNRAS*, 355, 499.
- [68] Rohrmann R. D., 2005, *Physica A*, 347, 221.
- [69] Rohrmann R. D. & Zorec J., 2006, *Phys. Rev. E*, 74, 041120.
- [70] Rohrmann R. D., 2008, *Anales de las Primeras Jornadas sobre Astrofísica Estelar*, 55.
- [71] Rosen A., Ellis D. E., Adachi H., Averill F. W., 1976, *J. Chem. Phys.* 65, 3629.
- [72] Ross M., 1974, *J. Chem. Phys.* 60, 3634.
- [73] Ross M., Ree F. H. & Young D. A., 1983, *J. Chem. Phys.* 79, 1487.
- [74] Saumon D., Chabrier G., 1992, *Phys. Rev. A*, 46, 2084.

-
- [75] Saumon D., Chabrier G. & Van Horn H. M., 1995, *ApJS*, 99, 713.
- [76] Sharp C. M. & Burrows A., 2007, *ApJSS* 168, 140
- [77] Schilling M. F., 1986, *Adv. Appl. Prob.* 18, 388.
- [78] Sheppard A. P., Sok R. M., Averdunk H., Robins V. B. & Ghous A., 2006, International Symposium of the Society of Core Analysts held in Trondheim, Norway, 12-16 September 2006
- [79] Skellam J. G., 1952, *Biometrika*, 39, 346.
- [80] Tonks L., 1936, *Phys. Rev.* 50, 955.
- [81] Unsöld A., 1948, *ZA* 24, 355.
- [82] Urey H. C., 1924, *ApJ.*, 24, 355.
- [83] Wang C., He X.-T. & Zhang P., 2010, arXiv 1010.5541.
- [84] White S. D. M., 1979, *MNRAS*, 186, 145.
- [85] Wiese W. L. & Kelleher D. E., 1971, *ApJ*, 166, L 59.
- [86] Wiese W. L., Kelleher D. E. & Paquette D. R., 1972, *Phys. Rev. A*, 6, 1132.
- [87] Wigner E. & Huntington H.B., 1935, *J. Chem. Phys.* 3, 764.
- [88] Winisdoerffer C. & Chabrier G., 2005, *Phys. Rev. E*, 71, 026402.
- [89] Yoshioka S. & Ikeuchi S., 1989, *ApJ*, 341, 16.
- [90] Younger S. M., Harrison A. K., Fujima K. & Griswold D., 1988, *Phys. Rev. Lett.*, 61, 962.
- [91] Schwarzschild M., 1958, "Structure and Evolution of The Stars", Princeton University Press, Princeton.
- [92] Zurbriggen E. & Rohrmann R. D., 2009, *BAAA*, Vol. 52, 129.