

2.

a) $\rho(1, \dots, N, t) dz_1 \dots dz_N$ dá-nos o número de pontos representativos (microestados) do sistema em que a partícula 1 está no elemento $dz_1 = d^3r_1 d^3p_1$ do espaço de fase centrado em (\vec{r}_1, \vec{p}_1) , a partícula 2 está no elemento $dz_2 = d^3r_2 d^3p_2$ centrado em (\vec{r}_2, \vec{p}_2) , etc., no instante t .

A função de distribuição de N partículas tem um significado semelhante, mas sem indicar "que partículas". Assim, $f_N(1, \dots, N, t) dz_1 \dots dz_N$ dá-nos o número de pontos representativos no espaço de fase em que uma partícula está no elemento $dz_1 = d^3r_1 d^3p_1$ em torno de (\vec{r}_1, \vec{p}_1) , outra está no elemento $dz_2 = d^3r_2 d^3p_2$ em torno de (\vec{r}_2, \vec{p}_2) , etc., no instante t .

A função densidade de $N-1$ partículas é similar a f_N , mas definindo apenas as coordenadas de $N-1$ partículas:

$f_{N-1}(1, \dots, N-1, t) dz_1 \dots dz_{N-1}$ dá-nos o número de pontos representativos em que uma partícula está no elemento $dz_1 = d^3r_1 d^3p_1$ em torno de (\vec{r}_1, \vec{p}_1) , outra no elemento $dz_2 = d^3r_2 d^3p_2$ em torno de (\vec{r}_2, \vec{p}_2) , ..., e outra no elemento $dz_{N-1} = d^3r_{N-1} d^3p_{N-1}$ em torno de $(\vec{r}_{N-1}, \vec{p}_{N-1})$, independentemente da posição da última partícula, no instante t .

Finalmente, f_{N-2} é como f_{N-1} , com $f_{N-2}(1, \dots, N-2, t) dz_1 \dots dz_{N-2}$ dando o número de pontos representativos em que $N-2$ partículas

estão nos elementos de volume dz_1 a dz_{N-2} centrados em $(\vec{r}_1, \vec{p}_1), \dots, (\vec{r}_{N-2}, \vec{p}_{N-2})$, independentemente das coordenadas das 2 partículas restantes, no instante t .

b) Das definições da alínea a) $f_N(1, \dots, N, t) = N! \rho(1, \dots, N, t)$, pois trocar as coordenadas de quaisquer duas partículas corresponde a um microestado que também contribui para f_N .

Temos ainda, das definições em a),

$$f_{N-1}(1, \dots, N-1, t) = \int dz_N f_N(1, \dots, N, t) = \int dz_N N! \rho(1, \dots, N, t)$$

$$\text{e } f_{N-2}(1, \dots, N-2, t) = \frac{1}{2} \int dz_N dz_{N-1} f_N(1, \dots, N, t) = \frac{1}{2} \int dz_{N-1} f_{N-1}(1, \dots, N-1, t)$$

onde o factor $\frac{1}{2}$ resulta de podermos trocar as posições das partículas $(N-1)$ e N , que estão a ser integradas no espaço todo.

Estas expressões coincidem com as expressões do formulário,

$$f_s(1, \dots, s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int dz_{s+1} \dots dz_N \rho(1, \dots, N, t)$$

que, para $N-1$ e $N-2$ se escrevem

$$f_{N-1}(1, \dots, N-1, t) = N! \int dz_N \rho(1, \dots, N, t) = \int dz_N \underbrace{N! \rho(1, \dots, N, t)}_{f_N(t)}$$

$$\text{e } f_{N-2}(1, \dots, N-2, t) = \frac{N!}{2!} \int dz_{N-1} dz_N \rho(1, \dots, N, t) =$$

$$= \frac{1}{2} \int dz_{N-1} \underbrace{\int dz_N N! \rho(1, \dots, N, t)}_{f_{N-1}(1, \dots, N-1, t)} = \frac{1}{2} \int dz_{N-1} f_{N-1}(1, \dots, N-1, t)$$

c)

$$c_1) \int dz_{N-1} \frac{\partial f_{N-1}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\int dz_{N-1} f_{N-1}(1, \dots, N-1, t)}_{2 f_{N-2}} = 2 \frac{\partial}{\partial t} f_{N-2}(1, \dots, N-2, t)$$

$$c_2) \int dz_{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1} = \sum_{i=1}^{N-1} \int dz_{N-1} \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1}$$

O termo $i = N-1$ é nulo, pois $\int d^3 \vec{r}_{N-1} \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1} =$

$$= \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \underbrace{\int d^3 \vec{r}_{N-1} \vec{\nabla} f_{N-1}}$$

em cada uma das componentes aparecem termos

$$\int dr_j \frac{\partial f_{N-1}}{\partial r_j} = f_{N-1}(1, \dots, r_j) \Big|_{r_j=-\infty}^{+\infty} = 0, \text{ se } f_{N-1} \text{ for bem comportada.}$$

($\rightarrow 0$ quando $\vec{r} \rightarrow \pm \infty$)

($j \equiv x, y, z$).

Fica então $\sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1} = \sum_{i=1}^{N-2} \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \underbrace{\int dz_{N-1} f_{N-1}}_{2 f_{N-2}}$

$$= 2 \sum_{i=1}^{N-2} \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-2}$$

$$c_3) \int dz_{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \vec{K}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \int dz_{N-1} \vec{K}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1}$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1}}_{(a)} + \underbrace{\sum_{j=1}^{N-1} \int dz_{N-1} \vec{K}_{N-1,j} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_{N-1}} f_{N-1}}_{(b)}$$

(a) termos i, j até $N-2$

(b) termos com $i = N-1$

$$+ \underbrace{\sum_{i=1}^{N-1} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1}}_{(c)}$$

(c) termos com $j = N-1$

$$(a) = \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} \vec{K}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \underbrace{\int dz_{N-1} f_{N-1}}_{2 f_{N-2}} = 2 \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} \vec{K}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-2}$$

$$(b) = \sum_{j=1}^{N-1} \int dz_{N-1} \vec{K}_{N-1,j} \cdot \underbrace{\int d^3 p_{N-1} \vec{\nabla}_{\vec{r}_{N-1}} f_{N-1}}_{=0}$$

$= 0$ se f_{N-1} se anular em $p \rightarrow \pm \infty$

$$(c) = \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1}, \text{ onde o termo do}$$

somatório em $i = N-1$ se anula pois $\vec{K}_{N-1,N-1} = \vec{0}$.

c4) juntando os termos já calculados, temos

$$2 \frac{\partial}{\partial t} f_{N-2} + 2 \sum_{i=1}^{N-2} \frac{f_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{x_i} f_{N-2} + 2 \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} K_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{p_i} f_{N-2} =$$

$$= - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{p_i} f_{N-1} + \Lambda,$$

onde Λ é o resultado da integração do termo do lado direito da equação para f_{N-1} .

Comparando com a equação para f_{N-2} da hierarquia, que se escreve

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{N-2} + \sum_{i=1}^{N-2} \frac{f_i}{m} \cdot \vec{\nabla}_{x_i} f_{N-2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} K_{ij} \cdot (\vec{\nabla}_{p_i} - \vec{\nabla}_{p_j}) f_{N-2} =$$

$$= - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{p_i} f_{N-1}$$

e notando que $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} K_{ij} \cdot (\vec{\nabla}_{p_i} - \vec{\nabla}_{p_j}) = \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=1}^{N-2} K_{ij} \cdot \vec{\nabla}_{p_i}$,

vemos que estamos a obter a equação da hierarquia multiplicada por 2.

Do lado direito temos já os termos iguais, pelo que para obtermos o factor 2 devemos ter $\Lambda = - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{p_i} f_{N-1}$

c5)

$$\Lambda = - \sum_{i=1}^{N-1} \int dz_{N-1} dz_N K_{iN} \cdot \vec{\nabla}_{p_i} f_N = - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} dz_N K_{iN} \cdot \vec{\nabla}_{p_i} f_N$$

onde o termo $i=N-1$ se anula como nos casos anteriores, na interpretação em $d^3 p_{N-1}$ de $\vec{\nabla}_{p_{N-1}}$.

Como a função ρ (e a função f_N) é simétrica na troca de quaisquer pares de coordenadas $i \leftrightarrow j$, e as variáveis z_{N-1} e z_N são integradas em todo o espaço (variáveis mudas), podemos trocar os papéis das partículas $N-1$ e N :

$$\begin{aligned} \Delta &= - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_N dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_N = \\ &= - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} \underbrace{\int dz_N f_N}_{f_{N-1} \text{ (ver b)}} = - \sum_{i=1}^{N-2} \int dz_{N-1} \vec{K}_{i,N-1} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} f_{N-1}, \end{aligned}$$

tal como antecipado na alínea c).

Dividindo os resultados parciais de c_1 a c_5 por 2, recuperamos a equação para f_{N-2} da hierarquia.

Nota 1: este problema é a continuação do exercício 3 do teste de 26/3/2014

Nota 2: este exercício mostra de onde aparece o fator 2 aparentemente em falta quando se olha para o lado esquerdo e o lado direito da equação para f_{N-1} : do lado direito da equação para f_{N-2} há uma contribuição adicional que vem dos termos do lado esquerdo \therefore