**Segunda série de exercícios**
**Tópicos de Mecânica Estatística - Transições de Fases - 2018**

**1-** As configurações microscópicas de um "gás de rede" com $V$ células são caracterizadas pelo conjunto de variáveis de ocupação $\{t_i = 0, 1;\ i = 1, ...V\}$. Cada célula $i$ pode estar vazia ($t_i = 0$) ou ocupada por uma única partícula ($t_i = 1$). A energia de uma configuração microscópica $\{t_i\}$ é dada por

$$\mathcal{H}\left(\{t_i\}\right) = -\epsilon \sum_{(i,j)} t_i t_j,$$

com $\epsilon > 0$. A notação $(i, j)$ indica que a soma deve ser feita sobre pares de células vizinhas, simulando as interações atrativas de curto alcance de um potencial intermolecular.

No ensemble canônico, dada a temperatura $T$, na presença de $N$ partículas, com $N \leq V$, podemos escrever a função de partição

$$Z_N = Z\left(T, V, N\right) = \sum_{\{t_i\}, N=\sum_{i=1}^{V} t_i} \exp\left[\beta\epsilon \sum_{(i,j)} t_i t_j\right],$$

em que a soma sobre configurações está sujeita à restrição $N = \sum_{i=1}^{V} t_i$. Para eliminar essa restrição, podemos mudar para um ensemble grande canônico, em que o número de partículas não é conservado.

(i) Mostre que a grande função de partição é dada por

$$\Xi = \Xi\left(T, V, \mu\right) = \sum_{N=0}^{V} \exp\left(\beta\mu N\right)\ Z\left(T, V, N\right) = \sum_{\{t_i\}} \exp\left[\beta\mu \sum_{i=1}^{N} t_i + \beta\epsilon \sum_{(i,j)} t_i t_j\right],$$

em que $\mu$ é potencial químico. Nesse ensemble grande canônico o "problema do gás de rede" torna-se idêntico ao "problema do modelo de Ising. Em algumas circunstâncias, como no caso unidimensional, é possível obter uma solução exata. Essa equivalência foi bastante explorada nos trabalhos históricos de Yang e Lee, que deram inicio às pesquisas modernas sobre fenômenos críticos (ver T. D. Lee e C. N. Yang, Phys. Rev. **87**, 410, 1952).

(ii) Ao invés de enfrentar o problema difícil, vamos considerar outro modelo, na linha do "tratamento de campo médio" da tese original de van der

Waals. A ideia consiste em deformar o hamiltoniano, introduzindo interações (de longo alcance) entre todos os pares de partículas. Então escrevemos

$$\mathcal{H} \Longrightarrow \mathcal{H}_{vdw} = -\frac{\epsilon}{2V}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} t_i t_j = -\frac{\epsilon}{2V}\left(\sum_{j=1}^{N} t_i\right)^2 \propto V\rho^2,$$

em que a energia por célula é proporcional ao quadrado da densidade (de acordo com o raciocínio original de van der Waals). No ensemble grande canônico temos a função de partição desse modelo de gás de rede de van der Waals,

$$\Xi_{vdw}\left(T, V, \mu\right) = \sum_{\{t_i\}} \exp\left[\beta\mu\sum_{i=1}^{N} t_i + \frac{\beta\epsilon}{2V}\left(\sum_{i=1}^{V} t_i\right)^2\right].$$

Utilize agora a identidade gaussiana,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-x^2 + 2ax\right] dx = \sqrt{\pi}\exp\left(a^2\right),$$

para formular o problema em termos de uma integral que pode ser calculada assintoticamente no limite termodinâmico ($V \to \infty$). Obtenha uma expressão para o grande potencial termodinâmico, $\Phi = -pV$, em que a pressão é expressa em termos de $T$ e de $\mu$.

(iii) A partir das equações de estado na representação do grande potencial, escreva a pressão $p$ em termos da temperatura $T$ e da densidade $\rho = N/V$, que é o análogo da equação de van der Waals para o gás de rede. Esboce um gráfico da pressão $p$ contra a densidade $\rho$ para diversos valores de $T$. Quais as dificuldades com essa equação?

**2*.** Considere um modelo unidimensional de spin 1, definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} + D\sum_{i=1}^{N} S_i^2,$$

com $J > 0$, $D > 0$, e $S_i = -1, 0, +1$, para todos os sítios da cadeia.

(a) Utilizando condições periódicas de contorno, calcule os autovalores da matriz de transferência associada a esse problema.

(b) Obtenha uma expressão para o valor esperado do hamiltoniano, $\langle\mathcal{H}\rangle$, que é vulgarmente identificado com a energia interna $U$ desse sistema. Faça

gráficos de $U/J$ contra a temperatura em unidades convenientes, $k_B T/J$, para vários valores do "parâmetro de campo cristalino", $d = D/J$.

(c) Qual o estado fundamental desse sistema ($T = 0$) em função do parâmetro $d = D/J$? Obtenha a forma assintótica dos autovalores da matriz de transferência, para $T \to 0$, nas regiões características do eixo $d$.

**3*-** Mostre que uma função convexa $\phi(x)$ de uma variável aleatória $x$, bem comportada, satisfaz a desigualdade

$$\phi(x) \geq \phi(\langle x \rangle) + (x - \langle x \rangle)\, \phi'(\langle x \rangle).$$

Tomando o valor esperado com relação a uma medida positiva, mostre que

$$\langle \phi(x) \rangle \geq \phi(\langle x \rangle).$$

Para $\phi(x) = \exp(x)$ essa expressão é conhecida como desigualdade de Jensen. Mostre que se obtém a forma clássica da desigualdade de Peierls–Bogoliubov quando se supõe que

$$\langle \cdots \rangle = \frac{1}{Z_o} \mathrm{Tr}[\exp(-\beta \mathcal{H})(\cdots)]$$

com

$$\phi(x) = \exp[\beta(\mathcal{H}_o - \mathcal{H})].$$

**4-** O modelo de Blume-Capel numa rede de coordenação $q$ é dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} S_i S_j + D \sum_{i=1}^{N} S_i^2 - H \sum_{i=1}^{N} S_i,$$

em que a primeira soma é sobre vizinhos mais próximos, todos os parâmetros são positivos, e $S_i = -1, 0, +1$ para $i = 1, 2, ..., N$.

Utilizando o princípio variacional de Bogoliubov-Peierls, com um hamiltoniano de tentativa da forma

$$\mathcal{H}_o = +D \sum_{i=1}^{N} S_i^2 - \eta \sum_{i=1}^{N} S_i,$$

em que $\eta$ é um parâmetro variacional, obtenha uma solução aproximada para a energia livre desse sistema,

$$g_{aprox}(T,H) = \min_{\eta} \{g(T,H;m)\},$$

em que $m$ é uma função de $\eta$ que corresponde à magnetização por spin. A campo nulo ($H=0$), obtenha os coeficientes da expansão

$$g(T,H=0;m) = A + Bm^2 + Cm^4 + Dm^6 + \cdots.$$

Considere agora o diagrama de fases a campo nulo (no plano $d = D/J$ contra $t = k_B T/J$, para $H = 0$). Obtenha uma expressão para a linha de transições de segunda ordem, ou linha $\lambda$, dada por $B = 0$ com $C > 0$, e localize o ponto tricrítico ($B = C = 0$, com $D > 0$). Como fica o diagrama de fases para $C < 0$? O que acontece para $T = 0$?

**5-** A versão de Curie-Weiss do modelo de Blume-Capel (com estado fundamental ferromagnético) é dada pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} S_i\right)^2 + D\sum_{i=1}^{N} S_i^2 - H\sum_{i=1}^{N} S_i,$$

em que todos os parâmetros são positivos, e $S_i = +1, 0, -1$ para $i = 1, 2, ..., N$.

(a) Mostre que a energia livre por spin deste sistema pode ser escrita na forma

$$g(t,d,h) = \min_{y} \{g(t,d,h;y)\},$$

com $t = k_B T/J$, $d = D/J$ e $h = H/J$. Obtenha uma expressão para $g(t,d,h;y)$.

(b) Através de uma expansão de $g(t,d,h;y)$ em potências de $y$, obtenha expressões para a linha crítica e o ponto tricrítico a campo nulo (compare com os resultados do problema anterior).

(c) Esboce o gráfico do diagrama de fases no plano $d - t$ (para $h = 0$).

(d) Esboce gráficos da magnetização espontânea contra $d$ para alguns valores característicos da temperatura $t$.

**********