Lista 7 - 7600041 - Física Estatística

1. Reif: 10.8, 10.9.

2. Problemas 8.4 e 8.5 do Gould e Tobochnik.

3. Seguindo o raciocínio da Sec. 10.5 do Reif, derive a equação de van der Waals. Alternativamente, derive utilizando o ensemble microcanônico seguindo https://arxiv.org/abs/1802.01963.

4. A equação de van der Walls é

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{v-b} - \frac{a}{k_B T} \times \frac{1}{v^2} \approx \frac{1}{v} + \left(b - \frac{a}{k_B T}\right) \frac{1}{v^2},$$

onde P, T e $v = V/N$ são a pressão, a temperatura e o volume médio ocupado por partícula, respectivamente. Os parâmetros a e b são fenomenológicos obtidos dos experimentos (geralmente, ambos positivos). A approximação é uma expansão para o limite de gases em altas temperaturas e baixas densidades.
Considere um gás não-ideal de partículas pontuais no limite de altas temperaturas e baixas densidades cujo potencial de interação $U_{i,j}(r)$ entre duas partículas i e j está ilustrado na Fig. 1, onde $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ é a distância entre as mesmas e os parâmetros $U_0, R > 0$.

   (a) Precisamente, o que significa altas temperaturas e baixas densidades para esse gás?

   (b) Sem fazer nenhum cálculo, justifique qual deve ser o valor *exato* de b para o gás em questão.
   Dica: lembre-se do significado dos parâmetros a e b na formulação de van der Waals.

   (c) Da mesma maneira, comente sobre quais condições o parâmetro a é positivo ou negativo.

   (d) Considere agora que esse gás é bidimensional. Use a expansão do virial até segunda ordem e calcule a equação de estado correspondente.

   (e) Os valores de a e b calculados estão de acordo com os itens (b) e (c)? O que mudaria se o gás fosse tridimensional?

5. **Solução exata do modelo de Ising unidimensional**
Considere o Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^{N} \sigma_i,$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ representa os possíveis valores dos spins localizados numa cadeia com N spins, e $J > 0$ é a constante de acoplamento que representa a intensidade da interação ferromagnética entre os spins, e h representa a intensidade da interação dos spins com um campo magnético externo. Considere ainda condições periódicas de contorno $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. Em 1D, o modelo é solúvel exatamente, ou seja, não há a necessidade da aproximação de campo médio.

   (a) Escreva a função partição como o produto de várias matrizes 2×2 idênticas (uma para cada par de spins $\sigma_i \sigma_{i+1}$).

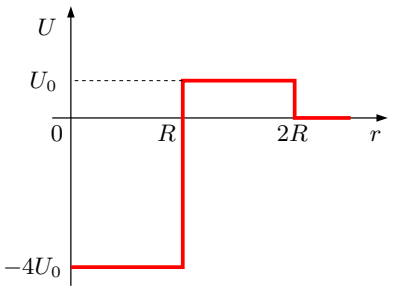

Figura 1: Potencial de interação entre as partículas $U_{i,j}\,(r)$.

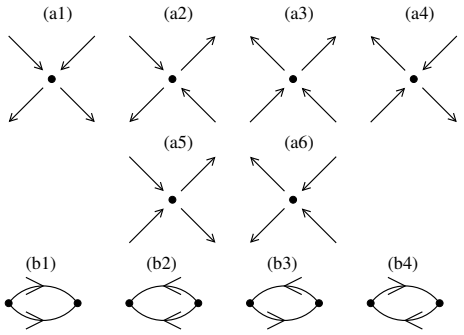

Figura 2: Possíveis configurações atômicas (a1)—(a6) e interações (b1)—(b4).

(b) Diagonalize as matrizes e calcule a função partição em termos dos autovalores.

(c) Calcule a magnetização do sistema e discuta sobre o seu comportamento nos limites de altas e baixas temperaturas. Este modelo exibe magnetização espontânea em temperatura finita?

6. **More is the same; infinitely more is different**[1]
O objetivo desse problema é exemplificar que transições de fase só são possíveis no limite de infinitos graus de liberdade. Para isso, é interessante estudar um modelo (mesmo que pareça artificial) onde podemos calcular a função de partição exatamente para qualquer N.
Considere uma rede unidimensional de N átomos localizados que interagem apenas com seus vizinhos próximos. Cada átomo pode estar em 6 configurações distintas conforme ilustra a Fig. 2(a), ou seja, em relação às setas, temos somente as possibilidades de 2 para dentro e 2 para fora (as famosas "regras do gelo"). Além disso, a interação entre os átomos é tal que permite somente interações que respeitem o alinhamento das setas conforme ilustra a Fig. 2(b). Finalmente, a energia associada às configurações (a1)—(a4) é ϵ_4 e a energia associada às configurações (a5) e (a6) é $\epsilon_2 < \epsilon_4$.

(a) Mostre que a densidade de energia livre se torna uma função não-analítica somente no limite $N \to \infty$.

(b) Calcule a temperatura T_c em que a não-analiticidade ocorre.

(c) A transição é de primeira ordem ou contínua?

(d) Calcule a descontinuidade da entropia em T_c: $\Delta S = S(T_{c+}) - S(T_{c-})$. Quanto vale o calor latente (por partícula) nessa transição?

(e) Calcule os zeros da função partição (os zeros de Yang-Lee-Fisher) no plano complexo de temperatura e relacione a distribuição desses zeros com a não-analiticidade da energia livre.

(f) Calcule a descontinuidade da entropia utilizando a distribuição do zeros de Yang-Lee-Fisher.

7. **Campo médio para o modelo de Heisenberg clássico**
O modelo de Heisenberg ferromagnético é dado pelo Hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mu_B \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i,$$

onde $\mathbf{S}_i$ é um vetor tridimensional unitário, $\mathbf{B}$ é o campo magnético externo e $J > 0$ é a constante de troca. A primeira somatória se dá somente entre primeiros vizinhos de uma rede cristalina qualquer que, por simplicidade, vamos considerar uma rede hipercúbica de d dimensões.

(a) Calcule o Hamiltoniano efetivo na aproximação de campo médio para esse modelo.

(b) Derive a equação de auto-consistência para a magnetização do sistema.

(c) Calcule a temperatura crítica e compare com a do modelo de Ising (também na aproximação de campo médio).

(d) Calcule os expoentes críticos β, γ, e δ, e compare com os valores do modelo de Ising (também na aproximação de campo médio).

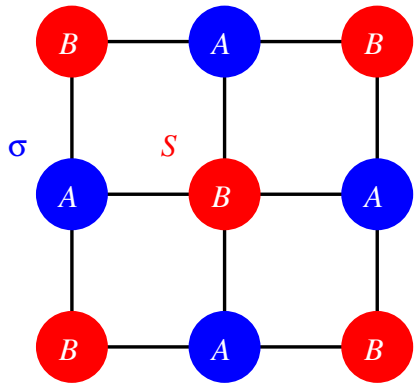

Figura 3: Rede quadrada.

8. **Campo médio para uma variante do modelo de Ising**
Considere um sistema de $N \gg 1$ spins em uma rede quadrada (vide Fig. 3) cujo Hamiltoniano é dado por

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j - B \left(\sum_{i \in \mathbf{A}} \sigma_i + \sum_{j \in \mathbf{B}} S_j \right),$$

onde $J \geq 0$ e B parametriza um campo magnético externo. A somatória $i \in \mathbf{A}$ ($j \in \mathbf{B}$) se dá sobre os sítios pertencentes ao conjuto $\mathbf{A}$ (conjunto $\mathbf{B}$). A somatória $\langle i,j \rangle$ se refere à soma sobre as interações de primeiros vizinhos. Há dois tipos de spins no sistema que são denotados por σ e S, e seus possíveis valores são $S_j = \{-1, 0, +1\}$ e $\sigma_i = \{-1, 1\}$.

(a) Calcule exatamente a energia livre por spin $f = F/N$ em temperatura nula ($T = 0$) e mostre que há uma transição de fase de primeira ordem quando o campo externo é igual a B^*. Calcule o valor de B^* e faça um desenho esquemático do ordenamento magnético nas fases em que $B > B^*$ e $B < B^*$.
Dica: analize o estado fundamental de H como função de B.

(b) Desenhe esquematicamente o diagrama de fases no plano B *vs.* T, indicando e justificando as regiões em que $m_\sigma = \overline{\sigma_i}$ e $m_S = \overline{S_j}$ são positivos, negativos, nulos, ou de coexistência. Indique ainda onde há transições de fase de primeira e segunda ordem.

(c) Admitindo que $\sigma_i = m_\sigma + \delta\sigma_i$ e $S_j = m_S + \delta S_j$, mostre que o Hamiltoniano H na aproximação de campo médio se torna

$$H = \frac{1}{2} J z m_S m_\sigma N - B_\sigma \sum_{i \in \mathbf{A}} \sigma_i - B_S \sum_{j \in \mathbf{B}} S_j,$$

onde z é a coordenação da rede. Calcule os valores de B_σ e B_S e interprete fisicamente seus significados.

(d) Definindo as quantidades admensionais $\tilde{f} = \frac{f}{Jz}$, $\tilde{\beta} = \frac{Jz}{k_B T}$, e $\tilde{B} = \frac{B}{Jz}$, calcule $\tilde{f}$ como função de $\tilde{B}$, $\tilde{\beta}$, m_σ e m_S.

(e) Escreva as equações de auto-consistência para m_S e m_σ. (Não é preciso resolvê-las.)

(f) Calcule a temperatura crítica de transição T_c explicando detalhadamente o seu procedimento usado. (*Dica*: expanda $\tilde{f}$ em potências de $m_{S,\sigma}$.)

(g) Compare com a temperatura crítica do modelo de Ising usual $k_B T_c^{(\text{Ising})} = Jz$. É maior, igual, ou menor? Por que?

(h) Calcule os expoentes críticos das magnetizações $\beta_{\sigma,S}$: $m_{\sigma,S} \sim (T_c - T)^{\beta_{\sigma,S}}$, onde $B = B_c$ e $T \lessapprox T_c$.

---

[1] **Leo Kadanoff (arXiv:0906.0653) em referência à Philip W. Anderson (Science 1972).**