TRANSIÇÕES DE FASE

Curso de Engenharia Física Tecnológica

Série 1

1. Em teoria da informação [1] a função medindo a falta de conhecimento, ou entropia, de um dado sistema, descrito pela distribuição de probabilidades p_i, deve satisfazer os seguintes quatro axiomas:

1. $S(1/M, 1/M, \ldots, 1/M) = f(M)$ é uma função monótona crescente de M $(M = 1, 2, \ldots)$,

2. $f(ML) = f(M) + f(L)$ $(M, L = 1, 2, \ldots)$,

$$
\begin{aligned}
3.\ S(p_1, \ldots, p_M) &= S(p_1 + \cdots + p_r, p_{r+1} + \cdots + p_M) \\
&+ (p_1 + \cdots + p_r) S\left(\frac{p_1}{\sum_{i=1}^{r} p_i}, \ldots, \frac{p_r}{\sum_{i=1}^{r} p_i},\right) \\
&+ (p_{r+1} + \cdots + p_M) S\left(\frac{p_{r+1}}{\sum_{i=r+1}^{M} p_i}, \ldots, \frac{p_M}{\sum_{i=r+1}^{M} p_i}\right)
\end{aligned}
$$

$(r = 1, 2, \ldots, M-1)$,

4. $S(p, 1-p)$ é uma função contínua de p.

Demonstra-se então que a única função satisfazendo estes quatro axiomas é $S = -k \sum_{i=1}^{M} p_i \log p_i$.

a) Admitindo que conhecemos os valores expectáveis de várias funções f_i^α, $\alpha = 1, \ldots, P$, dados por $\sum_{i=1}^{M} p_i f_i^\alpha =< f^\alpha >$ e que a distribuição de probabilidade deve estar normalizada, i.e. que $\sum_{i=1}^{M} p_i = 1$, maximize a entropia sujeita a estas restrições, usando o método dos multiplicadores de Lagrange. Mostre que as probabilidades são dadas por $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\sum_\alpha \lambda_\alpha f_i^\alpha}$.

b) Obtenha Z a partir da condição de normalização da probabilidade.

c) Calcule a entropia e obtenha a relação $Z = e^{\frac{S}{k} - \sum_{\alpha=1}^{P} \lambda_\alpha < f^\alpha >}$

d) Considere uma variação do sistema em que tanto as médias $< f^\alpha >$, como as próprias funções f^α podem variar. A partir da variação das expressões obtidas nas duas alíneas anteriores conclua que devemos ter $\delta \frac{S}{k} = \sum_{\alpha=1}^{P} \lambda_\alpha [< \delta f^\alpha > - \delta < f^\alpha >]$

e) Aplique os resultados obtidos a sistemas termodinâmicos descritos pelos conjuntos canónico e grande canónico. Obtenha a expressão combinada da primeira e da segunda lei da termodinâmica. Considere ainda que esses sistemas são extensos e que pode portanto aplicar o teorema de Euler das funções homogéneas aos potenciais termodinâmicos.

f) Faça um tratamento análogo para um sistema magnético na presença de um campo magético, de modo a termos uma dada magnetização do sistema.

References

[1] R. Ash, *Information Theory*, Interscience Publishers, John Wiley and Sons.

2. Um reino tem quatro cidades formando um quadrado. O rei decidiu construir estradas ligando as quatro cidades segundo as diagonais, mas de acordo com rumores não confirmados uma solução financeiramente menos pesada teria sido afastada por considerações de ordem política...

3. Considere um pêndulo de comprimento l e com uma massa m na extremidade, forçado a rodar com uma velocidade angular ω, de modo a fazer um ângulo θ com o eixo vertical.

a) Determine o ângulo θ em função de ω e faça o gráfico de θ em função de $\frac{1}{\omega}$. De que modo se anula θ?

b) Escreva o Lagrangeano para este problema e obtenha o potencial efectivo $V_{eff}(\theta)$. Faça o gráfico de $V_{eff}(\theta)$ para vários valores de $\frac{1}{\omega}$. Indique o comportamento de $V_{eff}(\theta)$ junto da origem, em função de $\frac{1}{\omega}$.

c) Relacione com o estudo das transições de fase e com o facto de as teorias clássicas de várias transições de fase conduzirem aos mesmos valores (clássicos) dos expoentes. O que será necessário fazer para encontrar expoentes críticos diferentes dos clássicos?

References

[1] G. Fletcher, Am. J. Phys. **65**, 74 (1997) e referências aí indicadas.

4. Considere um spin quântico S num campo magnético H, com o Hamiltoniano $\mathcal{H} = -HS_z$.

a) Calcule a função de partição $Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}}$, a magnetização $M = < S_z >$ (função de Brillouin) e a susceptibilidade longitudinal $\chi_{zz} = \frac{\partial M}{\partial H}$. Obtenha os valores limites para pequenos e grandes campos magnéticos.

b) Particularize para o caso quântico limite $S = \frac{1}{2}$.

c) Considere o limite clássico $S \to \infty$, $H \to 0$, $SH \to sh$ e obtenha as expressões da função de partição, da magnetização (função de Langevin) e da susceptibilidade longitudinal.

d) Obtenha directamente os resultados da alínea anterior, considerando um spin clássico $\vec{s}$, de módulo fixo $|\vec{s}| = s$.

e) Faça os gráficos de $\frac{Z}{2S+1}, \beta F = -\ln \frac{Z}{2S+1}, \frac{M}{S}$ e de $\frac{\chi_{zz}}{\beta S^2}$, em função de βHS, para vários valores de S, incluindo o caso limite $S \to \infty$.

5. Considere electrões numa banda de condução, com energia $\epsilon(\vec{k})$ e que interactuam de acordo com o Hamiltoniano $\mathcal{H}_I = U \sum_i N_{i\uparrow} N_{i\downarrow}$, em que $N_{i\uparrow}, N_{i\downarrow}$ são os operadores de ocupação electrónicos, no ponto i da rede (modelo de Hubbard).

a) Considere a aproximação de campo médio e faça o desacoplamento dos operadores de modo a definir o campo efectivo sentido pelos electrões de cada polarização de spin. Considere uma situação ferromagnética, uniforme no espaço.

b) Considere que os electrões são descritos pelo conjunto grande canónico e escreva as equações autoconsistentes de campo médio.

c) Obtenha a linha da transição de fase, onde a magnetização m se anula, na ausência de campo aplicado h. Particularize para $T = 0K$ e indique para que valores de U existe transição de fase (critério de Stoner).

d) Obtenha a susceptibilidade estática $\frac{\partial m}{\partial h}$, em termos da susceptibilidade de Pauli.

6. Na ausência de uma simetria de inversão $\phi \to -\phi$, a densidade Hamiltoniana efectiva da teoria de Landau para uma transição de fase pode ter potências ímpares do parâmetro de order. Estude o efeito de um termo cúbico, considerando a densidade Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} r\phi^2 + \frac{1}{4} b\phi^4 - \frac{1}{3} c\phi^3,$$

não incluindo o termo usual de violação de simetria, dado por $-h\phi$, e sendo $r = a(T - T_0)$, a, b, c positivos e T a temperatura, com T_0 uma dada temperatura.

a) Mostre o aparecimento de uma solução com um valor médio não nulo para o parâmetro de ordem, abaixo de uma dada temperatura T^*. Determine T^*. Faça o gráfico esquemático de $\mathcal{H}$, em função de ϕ, mostrando a sua evolução em função da temperatura.

b) Mostre que a solução considerada na alínea anterior se torna a mais estável abaixo de uma temperatura T_1. Determine T_1. Faça o gráfico esquemático do parâmetro de ordem em função da temperatura e classifique esta transição de fase quanto à ordem.

c) O que acontece quando $T < T_0$? Determine as regiões de estabilidade e de metaestabilidade das soluções e o comportamento do sistema num ciclo em que se varia a temperatura.

Sugestão: use variáveis reduzidas $t = \frac{T-T_0}{T_1-T_0}$ e $\varphi = \frac{\phi}{\phi_1}$, em que ϕ_1 é o valor de ϕ para $T = T_1$. Normalize $\mathcal{H}$ de modo que o coeficiente do termo em φ^4 passe a ser 1.

7. Construa os invariantes até à quarta ordem no parâmetro de ordem, e segunda ordem nas derivadas espaciais, para os seguintes sistemas:

a) Um sistema com um parâmetro de ordem com seis componentes reais, com simetria de troca e de reflexão nas componentes.

b) Um sistema com um parâmetro de ordem com seis componentes reais, com simetria de reflexão e de rotação no espaço de spin a seis dimensões. As rotações de spin são independentes das rotações espaciais.

c) Um sistema com dois parâmetros de ordem, cada um com três componentes reais. A simetria consiste nas rotações tridimensionais de cada parâmetro de ordem separadamente. As rotações espaciais são independentes.

d) Um sistema como em c) mas em que os dois parâmetros de ordem rodam em conjunto.

e) Um sistema como em c) mas em que as rotações dos parâmetros de ordem são induzidas pela rotações das coordenadas espaciais.

8. Considere o modelo de Ising em campo transverso, a d dimensões, em equilíbrio termodinâmico à temperatura T e definido pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\Gamma \sum_i S_i^x - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z$$

em que $\vec{S}_i$ são spins $\frac{1}{2}$, com interacção J_{ij} segundo o eixo dos z apenas, e Γ é o campo magnético transverso, segundo o eixo dos x.

a) Faça a teoria de campo médio e escreva as equações de estado e constitutiva.

b) Para $\Gamma > \Gamma_C(T)$ os spins estão completamente polarizados pelo campo magnético, i.e. estão orientados segundo o eixo dos x. No entanto, se reduzirmos o campo magnético, teremos para $\Gamma < \Gamma_C(T)$ o aparecimento de uma componente da magnetização (ou do campo efectivo) também segundo o eixo dos z, devido à interacção entre os spins, havendo pois uma transição de fase, em que $< S^z >$ é o parâmetro de ordem. Particularize os resultados da alínea a) para cada uma destas duas fases, e indique as equações que permitem a sua caracterização. Sugestão: use o ângulo θ da magnetização ou do campo efectivo com o eixo dos x para caracterizar estes vectores.

c) Obtenha a equação da linha $\Gamma_C(T)$ de separação entre as duas fases. Obtenha os seus pontos limites, dados por $\Gamma_C(0)$ e por T_C, tal que $\Gamma_C(T_C) = 0$. Qual a dependência desta temperatura T_C com a dimensão d do espaço (admita que as interacções são entre primeiros vizinhos apenas). Qual o seu valor para $d = 1$? Como justifica esse valor?