Segunda Lista de Exercícios de Mecânica Estatística

Fabio de Moraes Canedo
7994642

23 de setembro de 2018

1 P1

No primeiro problema, para estudarmos as propriedades de equilíbrio do sistema considerado, calculamos primeiro a função equipartição, para isso utilizaremos a Hamiltoniana do problema, definida por:

$$H = -J\sum_{i=1}^{n} S_i^z S_{i+1}^z - D\sum_{i=1}^{n}(S_i^z)^2 \tag{1}$$

Os potenciais dependem na prática de apenas dois parâmetros também, pois podemos sempre redefinir a Hamiltoniana como:

$$\frac{H}{J} = -\sum_{i=1}^{n} S_i^z S_{i+1}^z - \frac{D}{J}\sum_{i=1}^{n}(S_i^z)^2 \tag{2}$$

Nas equações subsequentes podemos fazer a substituição $JT \to T$ redefinindo a temperatura, e então podemos obter o comportamento dependendo apenas dessas duas variáveis. Da Hamiltoniana, podemos tirar todas as propriedades termodinâmicas do sistema, como por exemplo:

$$
\begin{aligned}
U &= -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \\
F &= -\beta \log Z \\
S &= \frac{U - F}{\beta} \\
C &= -\frac{1}{\beta^2}\frac{\partial U}{\partial \beta} \\
Q &= n + \frac{\frac{d}{dD}\log\left(Z(D)\right)}{\beta}
\end{aligned} \tag{3}
$$

Para calcular tais potenciais termodinâmicos, é necessário calcular a função equipartição, definida por:

$$Z = \mathrm{Tr}\{e^{-\beta \widehat{H}}\} \tag{4}$$

O cálculo pode ser realizado tomando a base formada por cada estado de spin da cadeia, nessa base a Hamiltoniana é diagonal, assim teremos:

$$Z = \prod_{i=1}^{n}\sum_{S_i^z}\exp\left\{\beta\left[JS_i^zS_{i+1}^z + D(S_i^z)^2\right]\right\} \tag{5}$$

Considerando que $S_1^z = S_{n+1}^z$, podemos escrever o Hamiltoniano de uma maneira mais simétrica:

$$H = -J\sum_{i=1}^{n} S_i^zS_{i+1}^z - \frac{D}{2}\sum_{i=1}^{n}\left[(S_i^z)^2 + (S_{i+1}^z)^2\right] \tag{6}$$

Dessa maneira, se tomarmos a seguinte matriz:

$$T_{S_i,S_{i+1}} = \begin{bmatrix} e^{\beta(D+J)} & e^{\frac{D\beta}{2}} & e^{\beta(D-J)} \\ e^{\frac{D\beta}{2}} & 1 & e^{\frac{D\beta}{2}} \\ e^{\beta(D-J)} & e^{\frac{D\beta}{2}} & e^{\beta(D+J)} \end{bmatrix} \tag{7}$$

Essa matriz pode ser entendida como a linha representando valores diferentes para S_i e a coluna representando valores diferentes para S_{i+1}, Com essa definição, a função equipartição fica:

$$Z = \mathrm{Tr}\left[T^n\right] \tag{8}$$

Agora, antes disso, é conveniente acrescentarmos à energia $n(J + D)$, isso garante que os autovalores da hamiltoniana fiquem positivos. Isso serve apenas de conveniência para estudar o comportamento do sistema nos casos assintóticos. Isso feito, a matriz de transferência toma a forma:

$$T_{S_i,S_{i+1}} = \begin{bmatrix} 1 & e^{\frac{\beta(-D-2J)}{2}} & e^{-2J\beta} \\ e^{\frac{\beta(-D-2J)}{2}} & e^{-\beta(D+J)} & e^{\frac{\beta(-D-2J)}{2}} \\ e^{-2J\beta} & e^{\frac{\beta(-D-2J)}{2}} & 1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

Como é uma matriz simétrica real de três dimensões, ela possui também 3 autovalores reais, de maneira que é possível escrever:

$$T = PDP^{-1} \tag{10}$$

Assim:

$$Z = \mathrm{Tr}[T^n] = \mathrm{Tr}[D^n] \tag{11}$$

Onde D é uma matriz diagonal com autovalores de T nas entradas. A função equipartição fica, portanto:

$$Z = \lambda_1^n + \lambda_2^n + \lambda_3^n \tag{12}$$

Os autovalores para essa matriz serão:

$$\lambda_1 = \frac{\left(\sqrt{\Delta} + e^{D\beta}e^{3J\beta} + e^{D\beta}e^{J\beta} + e^{2J\beta}\right) e^{-D\beta}e^{-3J\beta}}{2} \tag{13a}$$

$$\lambda_2 = \frac{\left(-\sqrt{\Delta} + e^{D\beta}e^{3J\beta} + e^{D\beta}e^{J\beta} + e^{2J\beta}\right) e^{-D\beta}e^{-3J\beta}}{2} \tag{13b}$$

$$\lambda_3 = 1 - e^{-2J\beta} \tag{13c}$$

Onde:

$$\begin{split}\Delta = e^{2D\beta}e^{6J\beta} + 2e^{2D\beta}e^{4J\beta} + e^{2D\beta}e^{2J\beta} - 2e^{D\beta}e^{5J\beta} + 8e^{D\beta}e^{4J\beta} \\ - 2e^{D\beta}e^{3J\beta} + e^{4J\beta}\end{split} \tag{14}$$

Agora é importante salientar que um dos autovalores é sempre maior que os outros dois, de maneira que, quando $n \to \infty$ teremos:

$$Z \simeq \lambda_1^n \tag{15}$$

De maneira que os potenciais termodinâmicos calculados a partir de Z, que sempre dependem de $\log Z$, dependerão nesse limite de $n \log \lambda_1$. Portanto, vale a pena voltar nossa atenção um momento para a equação (13a).

Podemos estudar o limite dessa equação quando $\beta \to \infty$. Para isso, primeiro notamos que, nesse limite, $\Delta \to e^{2D\beta}e^{6J\beta}$. Podemos chegar a essa conclusão contando a potência dos termos. Substituindo esse limite de Δ na equação (13a), obtemos:

$$\lambda_1 \simeq 1 + \frac{e^{-2J\beta}}{2} + \frac{e^{-D\beta}e^{-J\beta}}{2} \tag{16}$$

A função equipartição nesse caso fica:

$$Z = \left(1 + \frac{e^{-2J\beta}}{2} + \frac{e^{-D\beta}e^{-J\beta}}{2}\right)^n \tag{17}$$

Substituindo β por T, obtemos:

$$Z = \left(1 + \frac{e^{-\frac{2J}{T}}}{2} + \frac{e^{-\frac{D}{T}}e^{-\frac{J}{T}}}{2}\right)^n \tag{18}$$

Quando expandimos o logaritmo dessa função para $\beta \to \infty$, o que obtemos é que a função tende a zero exponencialmente. Podemos calcular os limites para cada potencial:

$$U = n\frac{D + 2e^{\beta(D-1)} + 1}{e^{\beta(D-1)} + 2e^{\beta(D+1)} + 1} \tag{19a}$$

$$F = \frac{n\left(D\beta + 2J\beta + \log\left(\frac{2}{e^{D\beta}+e^{J\beta}+2e^{\beta(D+2J)}}\right)\right)}{\beta} \tag{19b}$$

$$Q = \frac{2ne^{D\beta}e^{2J\beta}}{2e^{D\beta}e^{2J\beta} + e^{D\beta} + e^{J\beta}} + \frac{ne^{D\beta}}{2e^{D\beta}e^{2J\beta} + e^{D\beta} + e^{J\beta}} \tag{19c}$$

$$S = \beta\left(\frac{n\log(Z)}{\beta} - \frac{n\left(-\frac{De^{-D\beta}e^{-J\beta}}{2} - Je^{-2J\beta} - \frac{Je^{-D\beta}e^{-J\beta}}{2}\right)}{Z}\right) \tag{19d}$$

$$C = \frac{\beta^2 n\left(2D^2e^{2J\beta} + D^2 + 4DJe^{2J\beta} - 2DJ + 8J^2e^{D\beta}e^{J\beta} + 2J^2e^{2J\beta} + J^2\right)e^{D\beta}e^{J\beta}}{\left(2e^{D\beta}e^{2J\beta} + e^{D\beta} + e^{J\beta}\right)^2} \tag{19e}$$

Tomando os limites para $\beta \to \infty$ em cada equação acima obtemos:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{para } D+1>0 \\ n(D+1) & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{20a}$$

$$F = \begin{cases} 0 & \text{para } D+1>0 \\ n(D+1) & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{20b}$$

$$Q = \begin{cases} n & \text{para } D+1>0 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{20c}$$

$$S = \begin{cases} 0 & \text{para } D+1>0 \\ -n\log(2) & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{20d}$$

$$C = 0 \tag{20e}$$

Agora para o limite da temperatura indo para infinito, teremos, voltando à equação (13a), que tomar o limite $\beta \to 0$:

$$\lambda_1 \simeq 3 + \beta\left(-D - 3J\right) + \beta^2\left(\frac{D^2}{2} + DJ + \frac{13J^2}{6}\right) + O\left(\beta^3\right) \tag{21}$$

Desprezando termos de ordem 3 podemos continuar a trabalhar com a expressão, a função equipartição ficará:

$$Z = \left(\beta^2\left(\frac{D^2}{2} + DJ + \frac{13J^2}{6}\right) + \beta\left(-D - 3J\right) + 3\right)^n \tag{22}$$

O que leva aos potenciais termodinâmicos:

$$U = \frac{2n\left(3D + 9J - \beta\left(3D^2 + 6DJ + 13J^2\right)\right)}{\beta^2\left(3D^2 + 6DJ + 13J^2\right) - 6\beta\left(D + 3J\right) + 18} \tag{23a}$$

$$F = -\frac{n\log\left(\frac{\beta^2\left(3D^2+6DJ+13J^2\right)}{6} - \beta\left(D + 3J\right) + 3\right)}{\beta} \tag{23b}$$

$$S = \frac{n\left(2\beta\left(3D + 9J - \alpha\beta\right) + \left(\alpha\beta^2 - 6\beta\left(D + 3J\right) + 18\right)\log\left(\frac{\alpha\beta^2}{6} - \beta\left(D + 3J\right) + 3\right)\right)}{\alpha\beta^2 - 6\beta\left(D + 3J\right) + 18} \tag{23c}$$

$$C = \frac{2\beta^2 n\left(\alpha\left(\alpha\beta^2 - 6\beta\left(D + 3J\right) + 18\right) - 2\left(3D + 9J - \alpha\beta\right)^2\right)}{\left(\alpha\beta^2 - 6\beta\left(D + 3J\right) + 18\right)^2} \tag{23d}$$

$$Q = \frac{n\left(3D^2\beta^2 + 6DJ\beta^2 + 13J^2\beta^2 - 12J\beta + 12\right)}{3D^2\beta^2 + 6DJ\beta^2 - 6D\beta + 13J^2\beta^2 - 18J\beta + 18} \tag{23e}$$

Onde:

$$\alpha = 3D^2 + 6DJ + 13J^2 \tag{24}$$

Podemos, dessa maneira, compreender o comportamento do sistema para o caso em que a temperatura fica extremamente alta, em particular, tomando o limite $\beta \to 0$ nas equações (2.0.2), obtemos:

$$U = \frac{Dn}{3} + Jn \tag{25a}$$

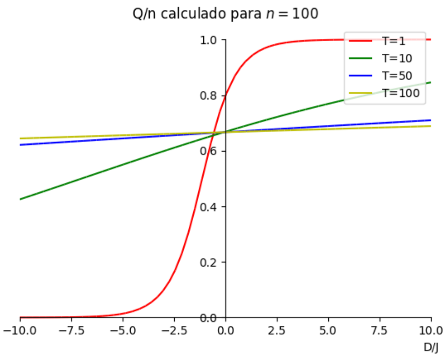
$$F = -\infty \tag{25b}$$

$$S = n \log(3) \tag{25c}$$

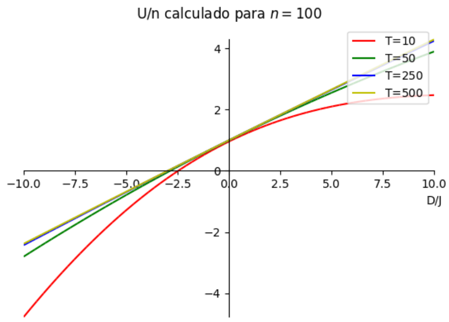
$$C = 0 \tag{25d}$$

$$Q = \frac{2n}{3} \tag{25e}$$

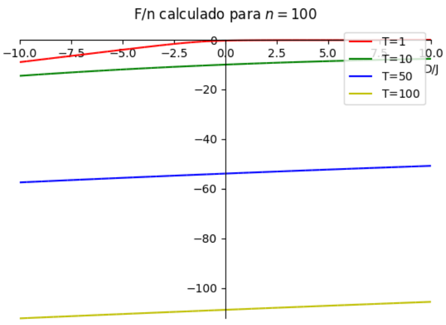
Na Figura 1.0.1 os comportamentos dos potenciais para o caso em que a temperatura vai para o infinito, estes foram calculados numericamente sem o auxílio dos aproximações analíticas, podemos observar o comportamento descrito pelas equações (20).



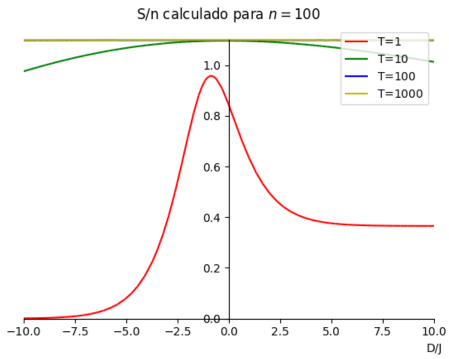
(a)



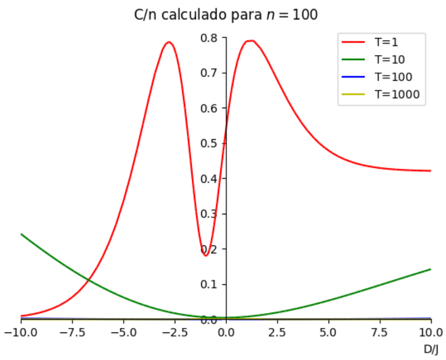
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 1.0.1: Comportamento assintótico dos potenciais para $T \to \infty$.

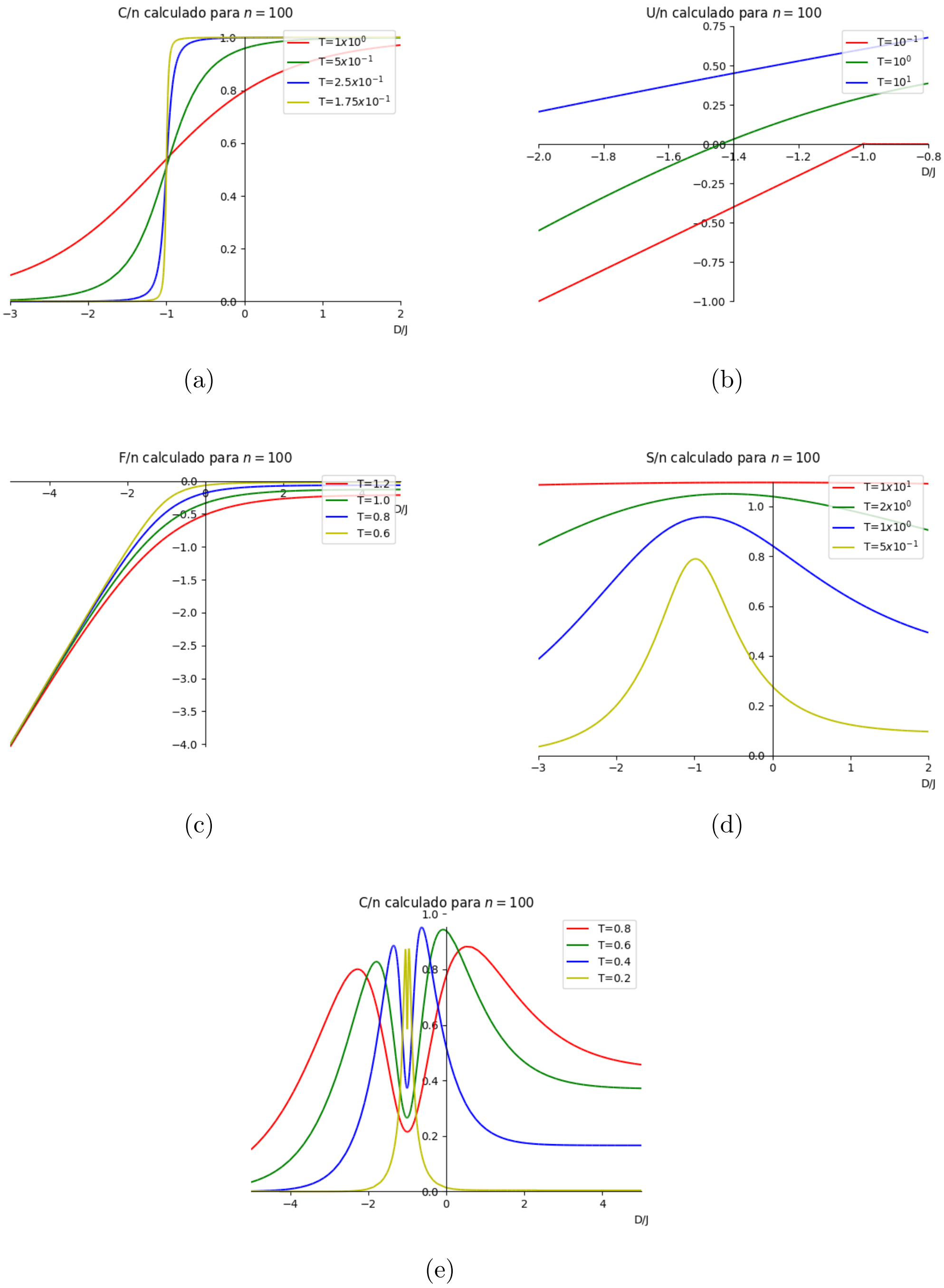


Figura 1.0.2: Comportamento assintótico dos potenciais para $T \to 0$.

2 P2

Para esse problema, teremos uma Hamiltoniana definida por:

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + \omega_1^2 q_1^2) + \frac{1}{2}(p_2^2 + \omega_2^2 q_2^2) + \frac{g}{2}(q_1 - q_2)^2 \tag{26}$$

Essa pode ser escrita como:

$$H\frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_1^2 + \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} q_i A_{ij} q_j \tag{27}$$

Onde:

$$A = \begin{bmatrix} \frac{g}{2} + \frac{\omega_1^2}{2} & -\frac{g}{2} \\ -\frac{g}{2} & \frac{g}{2} + \frac{\omega_2^2}{2} \end{bmatrix} \tag{28}$$

Essa matriz pode ser diagonalizada para efeitos de desacoplamento, o que equivale a dizer que esse sistema é equivalente a dois osciladores desacoplados com frequências iguais aos autovalores de A. Esses autovalores serão:

$$\lambda_2 = \frac{g}{2} + \frac{\omega_1^2}{4} + \frac{\omega_2^2}{4} + \frac{\sqrt{4g^2 + \omega_1^4 - 2\omega_1^2\omega_2^2 + \omega_2^4}}{4} \tag{29a}$$

$$\lambda_1 = \frac{g}{2} + \frac{\omega_1^2}{4} + \frac{\omega_2^2}{4} - \frac{\sqrt{4g^2 + \omega_1^4 - 2\omega_1^2\omega_2^2 + \omega_2^4}}{4} \tag{29b}$$

Criando as definições:

$$\omega^2 = \omega_1^2 + \omega_2^2 \tag{30a}$$

$$\delta^2 = \omega_1^2 - \omega_2^2 \tag{30b}$$

Podemos reescrever os autovalores como:

$$\lambda_2 = \frac{g}{2} + \frac{\omega^2}{2} + \frac{\sqrt{\delta^4 + g^2}}{2} \tag{31a}$$

$$\lambda_1 = \frac{g}{2} + \frac{\omega^2}{2} - \frac{\sqrt{\delta^4 + g^2}}{2} \tag{31b}$$

Isso nos permite compreender as razões entre esses autovalores, já que temos sempre ambos positivos e $\lambda_1 > \lambda_2$. Podemos compreender o comportamento da razão em regimes extremos na Figura 2.0.1.

Estes levam ao comportamento dos potenciais que pode ser compreendido na Figura 2.0.2.

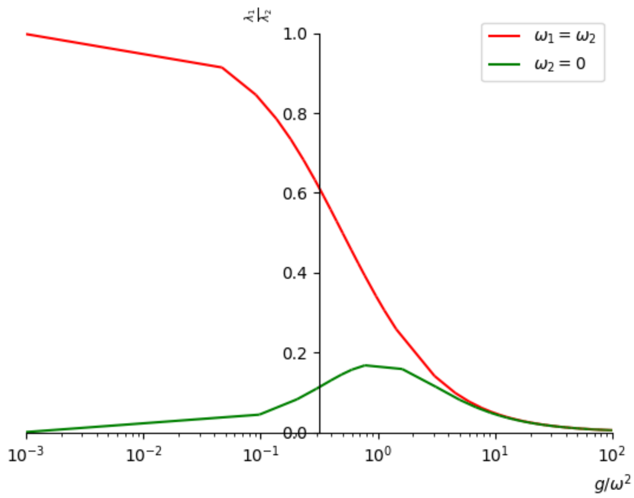
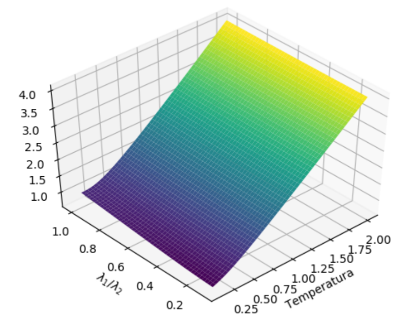
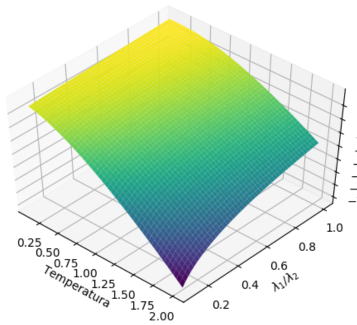


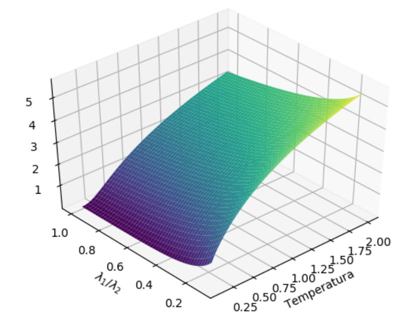
Figura 2.0.1: Razão entre autovalores para regimes extremos.



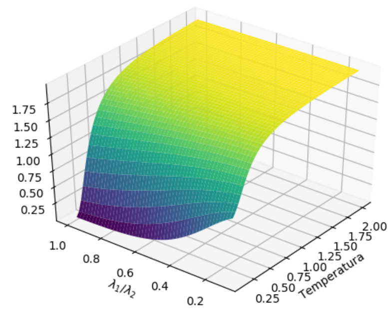
(a) Energia Interna



(b) Energia Livre



(c) Entropia



(d) Capacidade Térmica

Figura 2.0.2: Potenciais termodinâmicos