Quinta série de exercícios
Tópicos de Mecânica Estatística - Transições de Fases - 2020

1 - Considere o modelo de Ising ferromagnético, na rede quadrada simples, com interações restritas aos primeiros vizinhos, na ausência de campo externo. O hamiltoniano de spin é dado

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j,$$

com $J > 0$ e $\sigma_i = \pm 1$ para $i = 1, 2, ..., N$.

(a) Obtenha os primeiros termos, até a ordem t^8, de uma expansão de altas temperaturas da função canônica de partição,

$$Z = (\cosh K)^{2N} \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{(i,j)} [1 + t\sigma_i \sigma_j] = (\cosh K)^{2N} \, 2^N \left[1 + Nt^4 + (...)\, t^6 + (...) t^8 + ...\right],$$

em que $K = \beta J = J/k_B T$ e $t = \tanh K$. Quais os grafos associados aos coeficientes de t^4, t^6 e t^8?

(b) Utilize o resultado anterior para verificar os coeficientes de uma expansão de altas temperaturas da energia livre por spin,

$$-\beta g = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \ln Z = 2 \ln \cosh K + \ln 2 + t^4 + 2t^6 + \frac{9}{2} t^8 + \cdots.$$

2 - Utilize o "método da razão" para analisar o comportamento singular da função representada, até a ordem x^{10}, pela série

$$f(x) = 4 + 16x + 37x^2 + 67x^3 + 106x^4 + 154x^5 +$$

$$+ 211x^6 + 277x^7 + 352x^8 + 436x^9 + 529x^{10}.$$

Suponha que nas vizinhanças de x_c esta função possa ser escrita na forma

$$f(x) \sim A\,(x_c - x)^{-\gamma}.$$

Obtenha estimativas para x_c e γ.

Nota: o "método da razão" baseia-se na expansão

$$(a - x)^b = \sum_{n=0,1,2,...} A_n x^n,$$

com o coeficiente

$$A_n = \frac{1}{n!} b\,(b-1)\,(b-2)\,...\,(b-n+1)\,a^{b-n}.$$

A idéia desse método consiste em fazer um gráfico da razão

$$\frac{A_n}{A_{n-1}} = \frac{1}{a}\left(\frac{b+1}{n} - 1\right)$$

contra $1/n$. O valor do parâmetro a é dado pelo limite $n \to \infty$. O expoente b é estimado através da tangente da reta nesse gráfico de A_n/A_{n-1} contra $1/n$. É claro que essas estimativas se tornam melhores à medida que se utilizam séries mais longas.

3 - Mostre que há uma correspondência um-a-um entre os termos das séries de altas e de baixas temperaturas para o modelo de Ising na rede quadrada em campo nulo. Nesse caso o modelo é denominado "autodual". Mostre que, se houver uma única temperatura crítica, bem definida, ela deve ser dada pela expressão

$$\exp\left[-\frac{J}{k_B T_c}\right] = \tanh\left[\frac{J}{k_B T_c}\right],$$

ou seja,

$$\frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2}\ln\left(1+\sqrt{2}\right).$$

Compare com os valores fornecidos pela solução exata de Onsager e pelas aproximações usuais de campo médio.

4 - Suponha que a parte singular da energia livre de um fluido, ligeiramente acima da temperatura crítica, obedeça a forma de escala

$$g \sim t^{2-\alpha} F\left(\frac{\pi}{t^{\Delta}}\right),$$

em que $t = (T - T_c)/T_c$, $\pi = (p - p_c)/p_c$ e F é uma função “bem comportada”. No diagrama de fases $p - T$, ao longo do caminho $p = p_c$, calcule os expoentes críticos associados às seguintes grandezas termodinâmicas: (i) entropia; (ii) compressibilidade isotérmica; (iii) calor específico a volume constante; (iv) calor específico a pressão constante; (v) coeficiente de dilatação térmica.

5 - Com o objetivo de mostrar a incompatibilidade entre os valores clássicos dos expoentes críticos e os dados experimentais, J. S. Kouvel e M. E. Fisher [Phys. Rev. **136**, A1626 (1964)] realizaram uma análise detalhada de dados experimentais antigos de P. Weiss e R. Forrer [Ann. Phys. (Paris) **5**, 133 (1926)] para a equação de estado do níquel.

Na tabela abaixo, nós reproduzimos um conjunto desses dados para a magnetização m (em unidades apropriadas) em termos da temperatura (em graus Kelvin) e do campo magnético (em Gauss). Note que os valores do campo magnético têm que ser corrigidos devido a efeitos de desmagnetização (para cada valor da magnetização m, Weiss e Forrer obtiveram o campo aplicado subtraindo $39.3m$ do valor do campo na primeira coluna da tabela).

	348.78 °C	350.66 °C	352.53 °C	358.18 °C
430 G	11.361	10.452	8.114	–
890 G	13.787	–	–	–
1355 G	14.307	12.646	10.626	4.235
3230 G	15.651	14.322	12.752	7.567
6015 G	16.938	15.780	14.519	10.312
10070 G	18.209	17.271	16.198	12.775
14210 G	19.212	18.348	17.395	14.385
17775 G	19.976	19.141	18.293	15.504

De acordo com um trabalho de J. S. Kouvel e J. B. Comley [Phys. Rev. Lett. **20**, 1237 (1968)], os parâmetros críticos do níquel são dados por $T_c = 627.4\,\mathrm{K}$, $\gamma = 1.34\,(1)$, $\beta = 0.378\,(4)$ e $\delta = 4.58\,(5)$, em que as incertezas estão indicadas entre parênteses. Note que esses valores são compatíveis com a relação de escala $\gamma = \beta\,(\delta - 1)$.

Utilize o conjunto de dados experimentais da tabela, extraídos do artigo de Weiss e Forrer, juntamente com os valores dos parâmetros críticos de Kouvel e Comley, para verificar que a magnetização obedece a forma de escala

$$\frac{m}{|t|^{\beta}} = Y_{\pm}\left(\frac{H}{|t|^{\Delta}}\right),$$

em que H é o campo aplicado (corrigido pelos efeitos de desmagnetização), $t = (T - T_c)/T_c$, $\Delta = \beta + \gamma$, e podem existir duas funções de escala distintas, $Y_{\pm}$, acima e abaixo da temperatura crítica.

Os dados completos de Weiss e Forrer estão no trabalho original, que pode ser obtido na nossa biblioteca ou no site da "Bibliothèque Nationale".