TRANSIÇÕES DE FASE

Curso de Engenharia Física Tecnológica

Série 3

1. Considere um sistema de N partículas, que poderão ser spins J ou fermiões com ou sem spin, com condições periódicas fronteira.

a) Quais são os valores possíveis do momento? Indique quais são as funções próprias do operador das translações e discuta a divisão do espaço de Hilbert em conjuntos irredutíveis.

b) Admitindo que o Hamiltoniano é invariante para translações e que N ou S_z também são conservados, indique uma base conveniente de funções de onda.

2. Considere um sistema de N partículas, com condições periódicas fronteira, que poderão ser electrões com spin com interacções descritas pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = t \sum_{s,j=1}^{N} (a_{js}^{\dagger} a_{j+1s} + a_{j+1s}^{\dagger} a_{js}) + U \sum_{j=1}^{N} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

ou spins J com interacções descritas pelo Hamiltoniano de Heisenberg

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^{N} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} - \sum_{j=1}^{N} H S_j^z$$

a) Indique uma forma de enumerar os estados do sistema, em geral, ou se estivermos interessados em estados com um dado número de partículas ou com uma dada magnetização.

b) Escreva um programa que calcule os valores próprios de energia e os estados do sistema, usando métodos standard de diagonalização de matrizes. A diagonalização exacta de sistemas finitos, conjugada com métodos de extrapolação, tem vindo a ser cada vez mais importante, dado o rápido desenvolvimento das capacidades de cálculo que tem havido.

c) Altere o programa de forma a implementar as simetrias de invariância para translações e de conservação de N ou S_z.

3. Usando os métodos de Monte Carlo e da matriz de transferência, calcule numericamente:

a) a magnetização e a função de correlação de dois pontos do modelo de Ising a uma dimensão,

b) a energia e o calor específico de um oscilador harmónico quântico e clássico à temperatura T.

4. a) Uma fracção continuada é definida por

$$f = b_0 + \cfrac{a_1}{b_1 + \cfrac{a_2}{b_2 + \cfrac{a_3}{b_3 + \cdots}}} \tag{1}$$

$$= b_0 + \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \frac{a_3}{b_3 +} \cdots \tag{2}$$

As aproximações sucesivas

$$f_n = \frac{A_n}{B_n} = \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \cdots \frac{a_n}{b_n}$$

são dadas por

$$A_n = A_{n-1} b_n + A_{n-2} a_n \tag{3}$$

$$B_n = B_{n-1} b_n + B_{n-2} a_n \tag{4}$$

em que $A_{-1} = 1$, $A_0 = b_0$, $B_{-1} = 0$, $B_0 = 1$. Normalmente, na fracção continuada de um número toma-se $a_n = 1$ e as aproximações f_n convergem para esse número alternadamente por valores inferiores e superiores.

a) Obtenha os primeiros coeficientes b_n da fracção continuada do número π. Obtenha as sucessivas aproximações f_n correspondentes.

b) Proceda de um modo análogo para a "razão dourada" $\gamma = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Mostre que esta é a fracção continuada de convergência mais lenta. Mostre que ela é periódica e que γ é portanto solução de uma equação algébrica. Relacione com a sucessão de Fibonacci $0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \ldots$ Obtenha a expressão analítica de A_n e B_n resolvendo as suas equações de recorrência, com as condições fronteira associadas. Mostre que $\lim_{n\to\infty} f_n = \gamma$.

5. Dada uma função com um desenvolvimento em série de Taylor

$$f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + \cdots + f_{n+d} x^{n+d} + \cdots$$

a aproximação de Padé n/d a esta série tem a forma

$$f(x) = \frac{P_n(x)}{Q_d(x)} + O(x^{n+d+1})$$

em que $P_n(x)$ e $Q_d(x)$ são polinómios de grau n e d respectivamente

$$\begin{aligned} P_n(x) &= p_0 + p_1 x + \cdots + p_n x^n && (5) \\ Q_d(x) &= q_0 + q_1 x + \cdots + q_d x^d && (6) \end{aligned}$$

A aproximação de Padé n/d é dada pelo quociente dos determinantes

$$FP_n(x) = \begin{vmatrix} f_{n-d+1} & f_{n-d+2} & \cdots & f_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_n & f_{n+1} & \cdots & f_{n+d} \\ \sum_{k=0}^{n} f_{k-d} x^k & \sum_{k=0}^{n} f_{k-d+1} x^k & \cdots & \sum_{k=0}^{n} f_k x^k \end{vmatrix}$$

$$FQ_d(x) = \begin{vmatrix} f_{n-d+1} & f_{n-d+2} & \cdots & f_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_n & f_{n+1} & \cdots & f_{n+d} \\ x^d & x^{d-1} & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

sendo $f_k = 0$ se $k < 0$.

Calcule as primeiras aproximações de Padé, da forma $2n/2n \pm 1$, para a função $f(x) = \tan(x)$. Obtenha o valor do primeiro polo e do primeiro zero dessas aproximações e compare com $\frac{\pi}{2}$ e π.

6. Considere um problema em que as interações em vez de serem de curto alcance, da forma

$$\frac{1}{2}\int |\nabla\phi|^2 d^d x = \frac{1}{2}\int \phi(-q) q^2 \phi(q) \frac{d^d q}{(2\pi)^d}$$

são da forma

$$\frac{1}{2}\int \phi(x') \frac{1}{|x'-x|^{d+\sigma}} \phi(x) d^d x' d^d x \sim \frac{1}{2}\int \phi(-q) q^{\sigma} \phi(q) \frac{d^d q}{(2\pi)^d}$$

sendo no entanto a dependência na temperatura dada por $m^2 \sim t$ em

$$\frac{1}{2}\int m^2 \phi^2 d^d x$$

e em que o primeiro termo não trivial da expansão da energia livre for

$$\int g^p \phi^p(x) d^d x$$

a) Calcule os expoentes críticos α, β, γ, δ, ν e η na teoria de campo médio ou de Landau.

b) Verifique que as leis de scaling de Rushbrooke, Widom e Fisher são verificadas. Utilize a lei de scaling de Josepshon para determinar a dimensão crítica d_c.

c) Calcule o valor do expoente crítico α dado pela aproximação gaussiana. Verifique que a lei de scaling de Josepshon é verificada.

d) Derive o critério de Guizburg para este problema.

e) Particularize os resultados obtidos para o ponto tricrítico em que $\sigma = 2$, tal como habitualmente, mas em que $p = 6$. Obtenha os expoentes clássicos do ponto tricrítico e a sua dimensão crítica d_c.

7. Determine a forma como o valor da magnetização, dada pela teoria de campo médio, é reduzida pelas ondas de spin, tanto no caso do ferromagnetismo como no caso do antiferromagnetismo. Analise a dependência na dimensionalidade do espaço e determine a dimensão abaixo da qual o parâmetro de ordem é destruído pelas flutuações (dimensão crítica inferior).