Limite Termodinâmico para Sistemas Magnéticos: Expansões em Cluster

Artur Brandolff Filho & Petrus Henrique Ribeiro dos Anjos

Universidade Federal de Catalão

artur.brandolff@discente.ufcat.edu.br

Introdução

A expansão em polímeros fornece um método para determinar o logaritmo da função de partição [1]. Nesse método as configurações do sistema físico de interesse são mapeadas em conjuntos de objetos geométricos chamados polímeros de forma que cada configuração é um subconjunto único. Nesse método fator de Boltzmann é fatorado em um produto das atividades de cada configuração dos polímeros.

Gás de Polímeros

Seja Γ um conjunto de polímeros γ, Γ' os subconjuntos e uma função $\omega : \Gamma \to \mathbb{C}$, que determina o peso das atividades. A função de Partição para os Polímeros é [3, 5]

$$\Xi = \sum_{\Gamma' \subset \Gamma} \prod_{\gamma \in \Gamma'} \omega(\gamma) \prod_{\{\gamma,\gamma'\} \subset \Gamma'} \delta(\gamma,\gamma') \tag{1}$$

onde $\delta : \Gamma \times \Gamma \to \mathbb{R}$ é tal que:

$$\delta(\gamma,\gamma) = 0, \quad \delta(\gamma,\gamma') = \delta(\gamma',\gamma), \quad |\delta(\gamma,\gamma')| \leqslant 1.$$

A condição de compatibilidade entre os polímeros garante que apenas configurações possíveis são consideradas

Um Exemplo com dois polímeros

Para $\Gamma = \{\gamma_1, \gamma_2\}$, temos a função de partição

$$\Xi = 1 + \omega(\gamma_1) + \omega(\gamma_2) + \omega(\gamma_1)\omega(\gamma_2)\delta(\gamma_1,\gamma_2).$$

Convergência da energia livre do Modelo de Polímeros

A energia livre do Modelo de Polímeros:

$$\ln \Xi = \sum_{m \geq 1} \sum_{\gamma_1} \cdots \sum_{\gamma_m} \varphi(\gamma_1, \cdots, \gamma_m) \prod_{i \in V_m} \omega(\gamma_i) \tag{2}$$

onde, denotando G_c é um subgrafo conexo do grafo completo G_m com m vértices,

$$\varphi(\gamma_1, \cdots, \gamma_m) = \frac{1}{m!} \sum_{G_c \subset G_m} \prod_{\{i,j\} \in E_{G_c}} (\delta(\gamma_i,\gamma_j) - 1).$$

Teorema 1. *Se existe uma função $a : \Gamma \to \mathbb{R}_{>0}$ tal que para cada $\gamma_* \in \Gamma$*

$$\sum_{\gamma} |\omega(\gamma)| e^{a(\gamma)} |\zeta(\gamma,\gamma_*)| \leqslant a(\gamma_*) \tag{3}$$

então a eq. 2 converge.

Exemplo com 1 polímero: uma expansão de $\ln(1+z)$

Para $\Gamma = \{\gamma\}$ e $\omega(\gamma) \equiv z$. A eq. 1 se torna

$$\Xi = 1 + z \tag{4}$$

e temos que

$$\ln(1+z) = \sum_{m \geq 1} \varphi_m z^m, \tag{5}$$

onde $\varphi_m = \frac{1}{m!} \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k |\mathcal{G}_{m,k}|$, e $|\mathcal{G}_{m,k}|$ é o número de subgrafos conexos de G_m com k arestas. A condição de convergência mostra que a eq. 5 converge para todo $|z| < e^{-1}$

Modelo de Ising

A Hamiltoniana do modelo (ferromagnético) em uma rede $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ é dada por [4, 6]

$$H(s) = -J \sum_{\substack{i,j \in \Lambda \\ |i-j|=1}} s_i s_j - h \sum_{i \in \Lambda} s_i \tag{6}$$

onde $J > 0$ mede a intensidade de interação entre os spins $s_i = \pm 1$ e h o campo magnético externo. A função de partição Z é dada por

$$Z = \sum_{s} e^{-\beta H(s)} \tag{7}$$

onde $\beta = \frac{1}{kT}$. A função de partição permite calcular várias grandezas termodinâmicas do sistema, e em alguns casos observar o fenômeno de transição de fase magnética (veja a Figura 1) em função do aumento da temperatura.

Mapeamento do modelo de Ising em polímeros

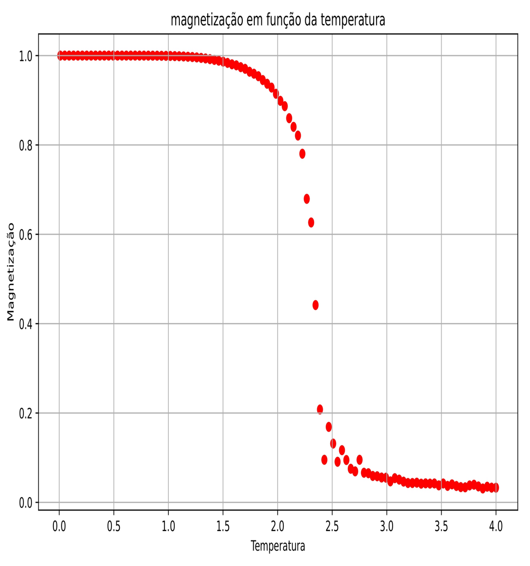

Figura 1: Magnetização em função da temperatura para modelo de Ising em uma rede quadrada 50×50 e condições periódicas de contorno e $h = 0$.

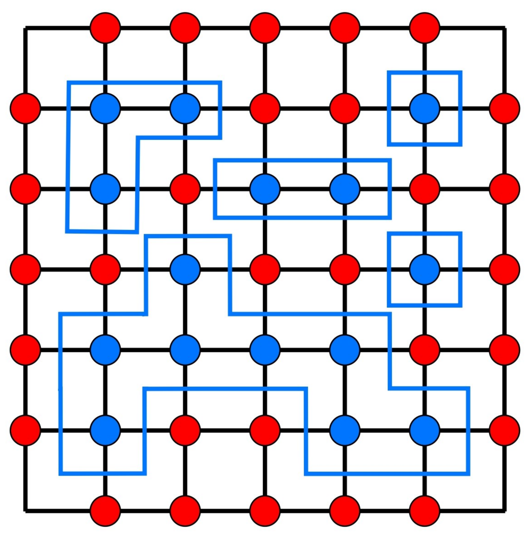

Figura 2: Correspondência entre uma configuração do modelo de Ising e um conjunto de Polímeros. Os polímeros correspondem aos contornos.

Os polímeros podem ser associados aos contornos de regiões de um dado sinal (veja a Figura 2) e $\omega(\gamma) = e^{-\beta|\gamma|}$, onde $|\gamma|$ denota o perímetro do contorno de γ, se dois polímeros compartilharem alguma ligação, esse polímeros são incompatíveis. Em baixas temperaturas, é possível mostrar que a eq. 3 é satisfeita tomando $a(\gamma) = |\gamma|$. Mais ainda, é possível mostrar que o limite de volume infinito (i.e. $\Lambda \to \mathbb{Z}^d$) da densidade de energia livre

$$f = |\Lambda|^{-1} \ln Z$$

existe e é independente das condições de contorno [2].

Referências

[1] Petrus Anjos. *Phase Transitions and Zeros of The Partition Function: Lecture Notes*. 11 2016.

[2] Gastao A Braga and Francisco Fontenele Araujo Jr. O limite termodinâmico e independência das condições de contorno para o modelo de ising d-dimensional. *Anais da VIII semana da iniciação cientifica da UFMG. Belo Horizonte*, 1999.

[3] Sacha Friedli and Yvan Velenik. *Statistical mechanics of lattice systems: a concrete mathematical introduction*. Cambridge University Press, 2017.

[4] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, 1925.

[5] Aldo Procacci. Cluster expansion methods in rigorous statistical mechanics. *Preprint (www. mat. ufmg. br/aldo/papers/book. pdf)*, 2005.

[6] David Ruelle. *Statistical Mechanis: Rigorous results*. Benjamin, New York, 1969.

Agradecimentos

Este trabalho foi parcialmente financiado pelo PIBIC/UFCAT.