



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Mecânica Estatística de Polímeros

Jürgen F. Stilck

IF-UFF - 9/12/09

Sumário

● Introdução

Sumário

- Introdução
- Entropia de cadeias polidispersas

Sumário

- Introdução
- Entropia de cadeias polidispersas
- Modelos para a transição de colapso de polímeros

Sumário

- Introdução
- Entropia de cadeias polidispersas
- Modelos para a transição de colapso de polímeros
- Conclusão

Introdução

Polímeros: moléculas de alto peso molecular, formadas pela repetição de monômeros.

Introdução

Polímeros: moléculas de alto peso molecular, formadas pela repetição de monômeros.

Classificação: Lineares ou ramificados, homo- ou heteropolímeros. Estamos interessados nas propriedades *termodinâmicas*.

Introdução

Polímeros: moléculas de alto peso molecular, formadas pela repetição de monômeros.

Classificação: Lineares ou ramificados, homo- ou heteropolímeros. Estamos interessados nas propriedades *termodinâmicas*.

Vamos considerar *homopolímeros lineares em redes*, modelando-os como *caminhadas aleatórias auto- e mutuamente excludentes* (SAW's, volume excluído).

Introdução

Polímeros: moléculas de alto peso molecular, formadas pela repetição de monômeros.

Classificação: Lineares ou ramificados, homo- ou heteropolímeros. Estamos interessados nas propriedades *termodinâmicas*.

Vamos considerar *homopolímeros lineares em redes*, modelando-os como *caminhadas aleatórias auto- e mutuamente excludentes* (SAW's, volume excluído).

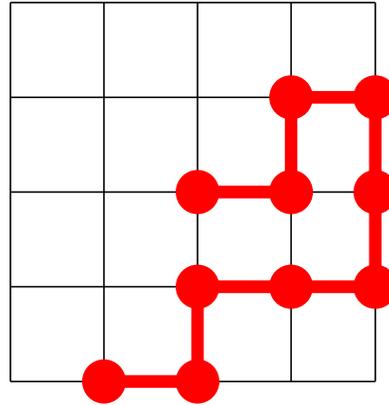
Problema básico de contagem: caminhada com monômero inicial na origem, número de caminhadas com M monômeros ($M - 1$ ligações ou passos): c_{M-1} .

Introdução

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:

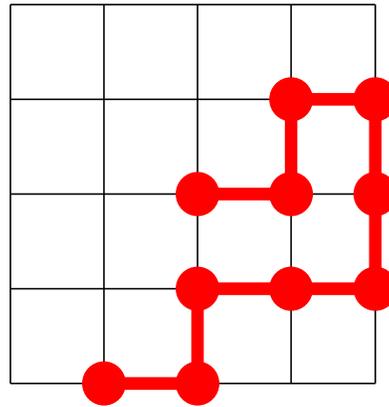
Introdução

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:



Introdução

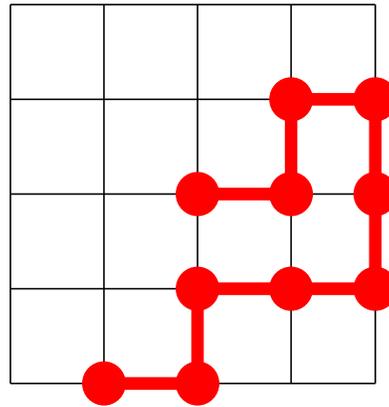
Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:



$$c_0^{(a)} = 1,$$

Introdução

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:

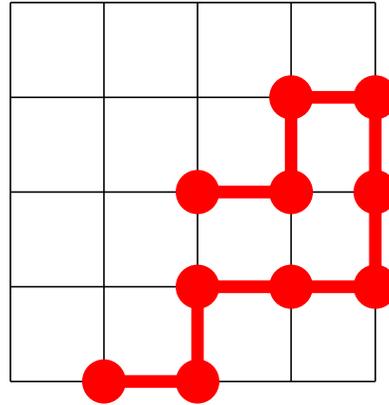


$$c_0^{(a)} = 1,$$

$$c_1^{(a)} = q,$$

Introdução

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:



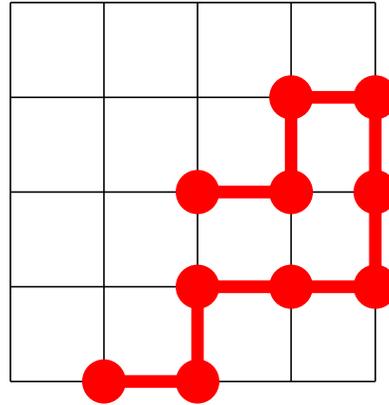
$$c_0^{(a)} = 1,$$

$$c_1^{(a)} = q,$$

$$c_2^{(a)} = q(q - 1).$$

Introdução

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:



$$c_0^{(a)} = 1,$$

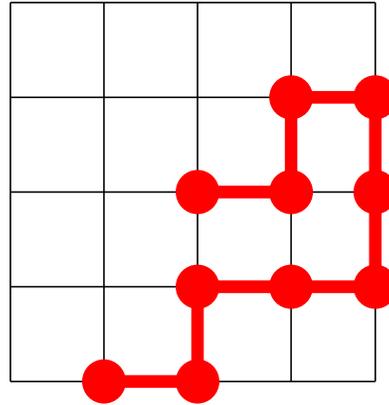
$$c_1^{(a)} = q,$$

$$c_2^{(a)} = q(q - 1).$$

Em geral: $c_0^{(a)} = 1, c_{M-1}^{(a)} = q(q - 1)^{M-2}, M > 1$

Introdução

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato:



$$c_0^{(a)} = 1,$$

$$c_1^{(a)} = q,$$

$$c_2^{(a)} = q(q - 1).$$

Em geral: $c_0^{(a)} = 1, c_{M-1}^{(a)} = q(q - 1)^{M-2}, M > 1$

Caminhadas aleatórias auto-excludentes: $c_{M-1}^{(ae)} \leq c_{M-1}^{(a)}$.

Introdução

Comportamento assintótico ($M \gg 1$): $c_n \approx An^{\gamma-1}q_c^n$.

Introdução

Comportamento assintótico ($M \gg 1$): $c_n \approx An^{\gamma-1}q_c^n$.

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato: $\gamma^{(a)} = 1$

(campo médio) e $q_c^{(a)} = q - 1$.

Introdução

Comportamento assintótico ($M \gg 1$): $c_n \approx An^{\gamma-1}q_c^n$.

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato: $\gamma^{(a)} = 1$

(campo médio) e $q_c^{(a)} = q - 1$.

Caminhadas auto-excludentes: $\gamma = 43/32$ e, para a rede quadrada ($q = 4$) $q_c \approx 2,6381$.

$S/(n k_B) = \lim_{c \rightarrow \infty} \ln c_n/n = \ln q_c$.

Introdução

Comportamento assintótico ($M \gg 1$): $c_n \approx An^{\gamma-1}q_c^n$.

Caminhadas aleatórias sem retorno imediato: $\gamma^{(a)} = 1$

(campo médio) e $q_c^{(a)} = q - 1$.

Caminhadas auto-excludentes: $\gamma = 43/32$ e, para a rede quadrada ($q = 4$) $q_c \approx 2,6381$.

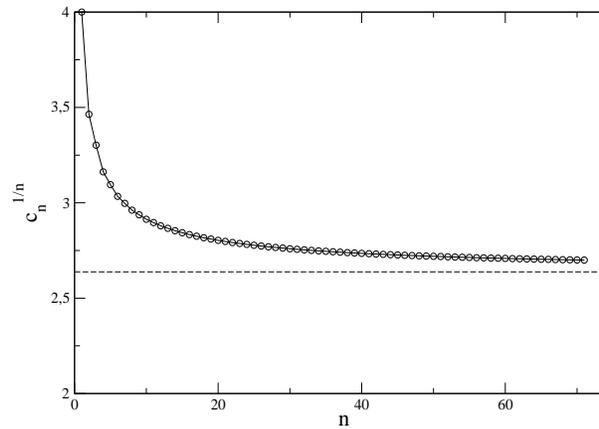
$S/(n k_B) = \lim_{c \rightarrow \infty} \ln c_n/n = \ln q_c$.

Comportamento de escala dos dados disponíveis até 71 passos na rede quadrada

($c_{71} = 4190893020903935054619120005916$ - I. Jensen J. Phys. A **37**, 5503 (2004)).

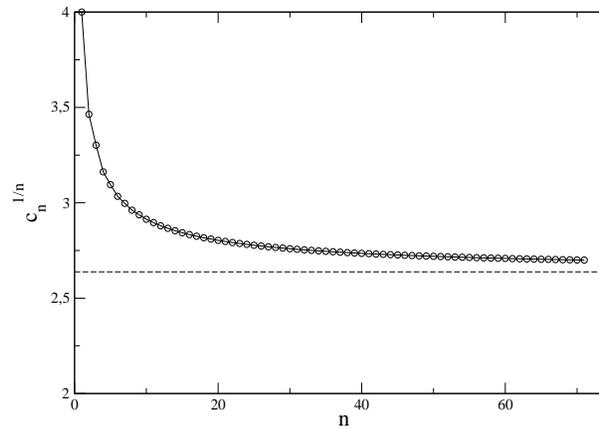
Introdução

Usando apenas o termo dominante:

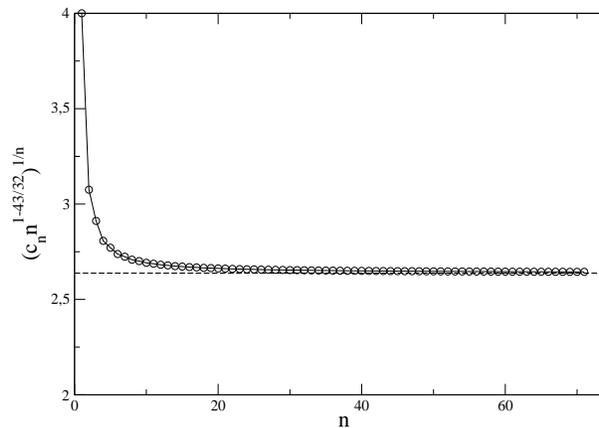


Introdução

Usando apenas o termo dominante:



Incluindo a correção de escala:



Introdução

Outra maneira de olhar para o problema: Função de partição grande canônica de um polímero:

$$\Xi(T, V, N) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1} c_n$$

é *função geratriz* dos c_n .

Introdução

Outra maneira de olhar para o problema: Função de partição grande canônica de um polímero:

$$\Xi(T, V, N) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1} c_n$$

é *função geratriz* dos c_n .

Termo dominante do comportamento assintótico: $c_n \approx Aq_c^n$.

Então:

Introdução

Outra maneira de olhar para o problema: Função de partição grande canônica de um polímero:

$$\Xi(T, V, N) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1} c_n$$

é *função geratriz* dos c_n .

Termo dominante do comportamento assintótico: $c_n \approx Aq_c^n$.

Então:

$$\Xi(T, V, N) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A}{q_c} (z q_c)^{n+1},$$

singular em $z = q_c^{-1}$: transição de polimerização.

Introdução

Transição paramagneto \rightarrow ferromagneto no modelo $n \rightarrow 0$ vetorial (De Gennes).

Introdução

Transição paramagneto \rightarrow ferromagneto no modelo $n \rightarrow 0$ vetorial (De Gennes).

Outra lei de escala: raio de giração ou distância ponta a ponta ($M \gg 1$): $R_M \approx M^{1/\nu}$.

Introdução

Transição paramagneto \rightarrow ferromagneto no modelo $n \rightarrow 0$ vetorial (De Gennes).

Outra lei de escala: raio de giração ou distância ponta a ponta ($M \gg 1$): $R_M \approx M^{1/\nu}$.

Em duas dimensões $\nu = 3/4 > 1/2$ para o caso com exclusão ($\nu = 1/d$ para caminhadas aleatórias): fase polimerizada de densidade nula.

Introdução

Transição paramagneto \rightarrow ferromagneto no modelo $n \rightarrow 0$ vetorial (De Gennes).

Outra lei de escala: raio de giração ou distância ponta a ponta ($M \gg 1$): $R_M \approx M^{1/\nu}$.

Em duas dimensões $\nu = 3/4 > 1/2$ para o caso com exclusão ($\nu = 1/d$ para caminhadas aleatórias): fase polimerizada de densidade nula.

Polímeros em maus solventes: introduzir *atração* entre monômeros em sitios primeiros vizinhos: SASAW's.

Transição de colapso, fase com densidade positiva de monômeros a baixas temperaturas (ponto Theta - Flory).

Introdução

Transição paramagneto \rightarrow ferromagneto no modelo $n \rightarrow 0$ vetorial (De Gennes).

Outra lei de escala: raio de giração ou distância ponta a ponta ($M \gg 1$): $R_M \approx M^{1/\nu}$.

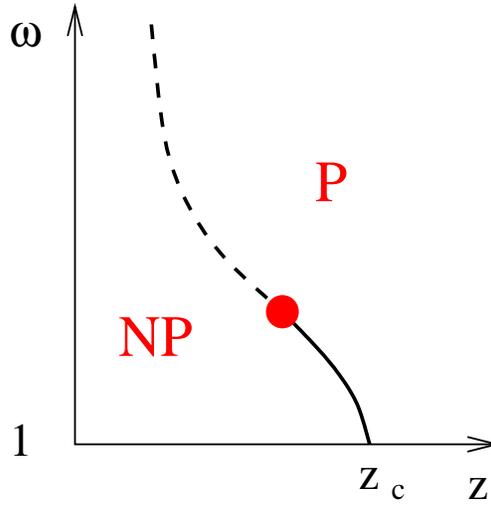
Em duas dimensões $\nu = 3/4 > 1/2$ para o caso com exclusão ($\nu = 1/d$ para caminhadas aleatórias): fase polimerizada de densidade nula.

Polímeros em maus solventes: introduzir *atração* entre monômeros em sitios primeiros vizinhos: SASAW's.

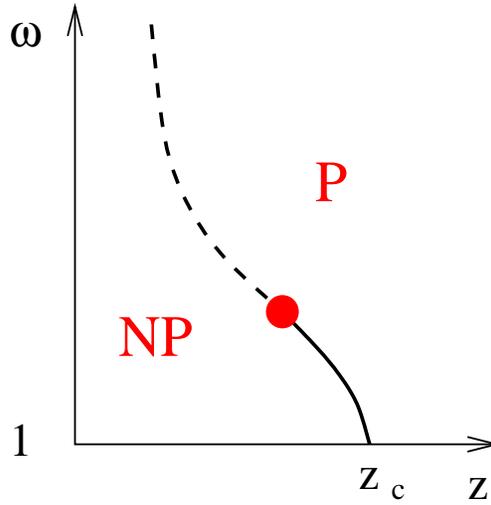
Transição de colapso, fase com densidade positiva de monômeros a baixas temperaturas (ponto Theta - Flory).

De Gennes: ponto tricrítico no formalismo grande-canônico. Analogia com modelo $n \rightarrow 0$ vetorial.

Introdução

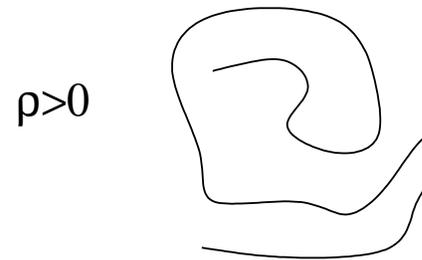
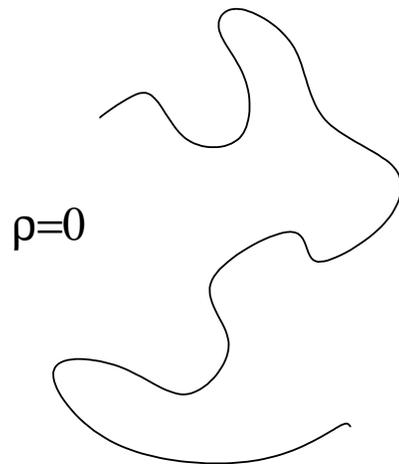


Introdução



$T > T_\theta$ $v > 1/d$

$T > T_\theta$ $v = 1/d$

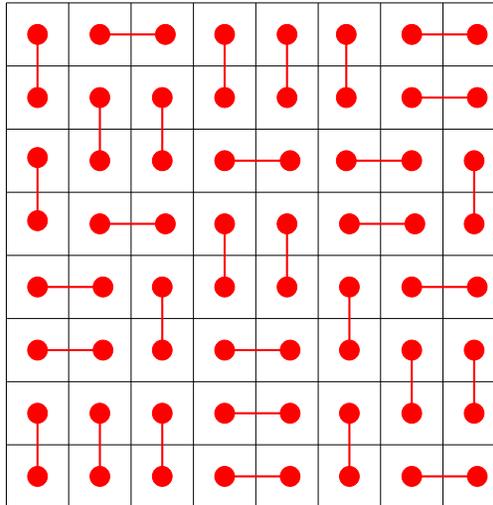


Entropia de cadeias polidispersas

Cadeias auto- e mutuamente excludentes inscritas numa rede. Exemplo: dímeros ($M = 2$) na rede quadrada:

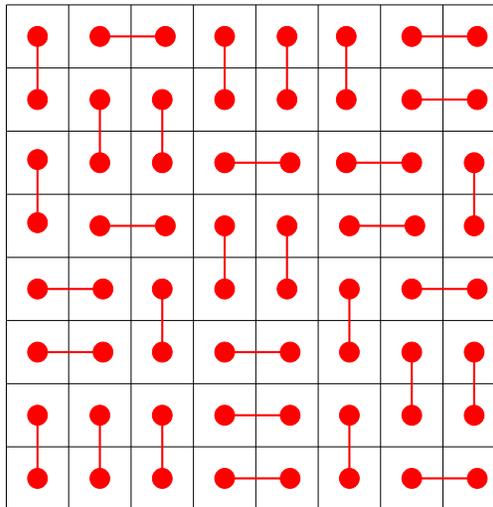
Entropia de cadeias polidispersas

Cadeias auto- e mutuamente excludentes inscritas numa rede. Exemplo: dímeros ($M = 2$) na rede quadrada:



Entropia de cadeias polidispersas

Cadeias auto- e mutuamente excludentes inscritas numa rede. Exemplo: dímeros ($M = 2$) na rede quadrada:



Solução exata para $M = 2$ (dímeros) em redes 2d cheias (Kasteleyn, Fisher e Temperley (1961)). Dominós em tabuleiro de xadrez: $\Gamma(32, 2; 64) = 12.988.816$.

Entropia de cadeias polidispersas

Generalização: Rede com V sítios, N_p cadeias com M monômeros, fração $\rho = MN_p/V$ sítios ocupados por monômeros.

Entropia de cadeias polidispersas

Generalização: Rede com V sítios, N_p cadeias com M monômeros, fração $\rho = MN_p/V$ sítios ocupados por monômeros.

Entropia:

$$s_M(\rho) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\ln \Gamma(\rho V/M, M; V)}{V}.$$

$s_2(1) = \frac{G}{\pi} \approx 0,29156\dots$, onde

$$G = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \frac{1}{(2l+1)^2} \approx 0,915965\dots$$

Entropia de cadeias polidispersas

Generalização: Rede com V sítios, N_p cadeias com M monômeros, fração $\rho = MN_p/V$ sítios ocupados por monômeros.

Entropia:

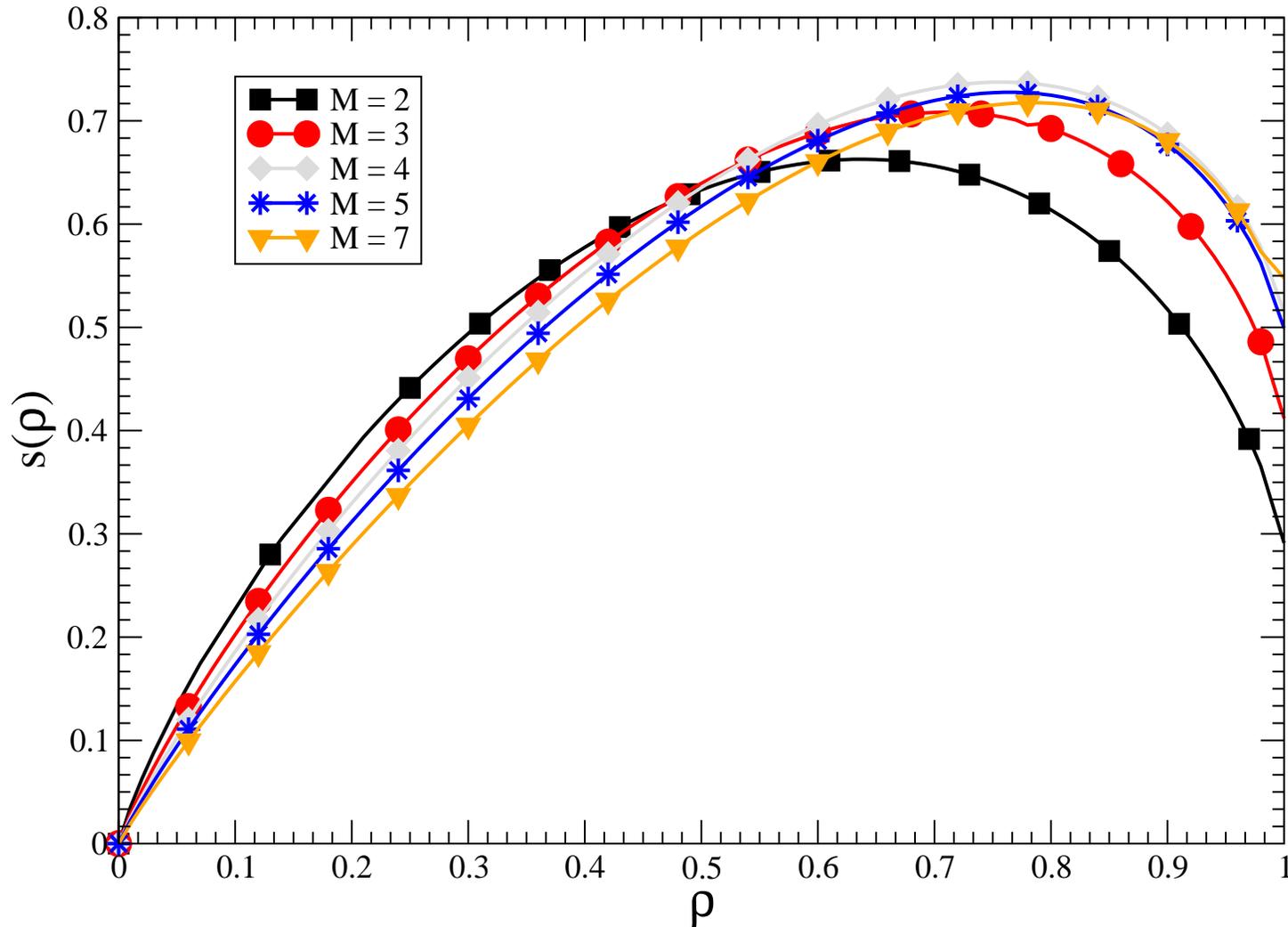
$$s_M(\rho) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\ln \Gamma(\rho V/M, M; V)}{V}.$$

$s_2(1) = \frac{G}{\pi} \approx 0,29156\dots$, onde

$$G = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \frac{1}{(2l+1)^2} \approx 0,915965\dots$$

Com Wellington G. Dantas (2003):

Entropia de cadeias polidispersas



Entropia de cadeias polidispersas

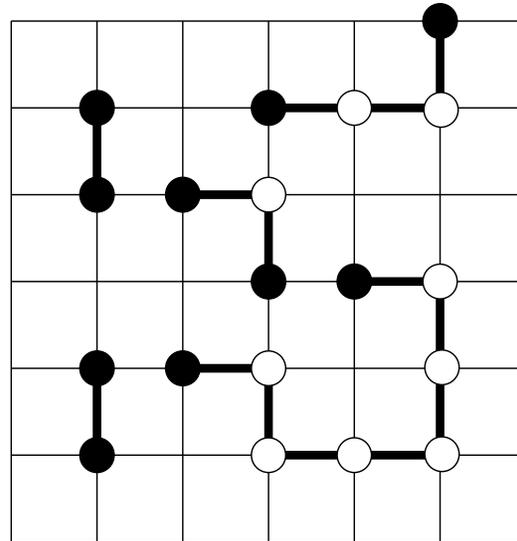
Caso polidisperso: cadeias com M variável. Monômero interno: $z_i = \exp(\mu_i/(k_B T))$, monômero extremo: $z_e = \exp(\mu_e/(k_B T))$.

Entropia de cadeias polidispersas

Caso polidisperso: cadeias com M variável. Monômero interno: $z_i = \exp(\mu_i/(k_B T))$, monômero extremo:

$$z_e = \exp(\mu_e/(k_B T)).$$

Exemplo:



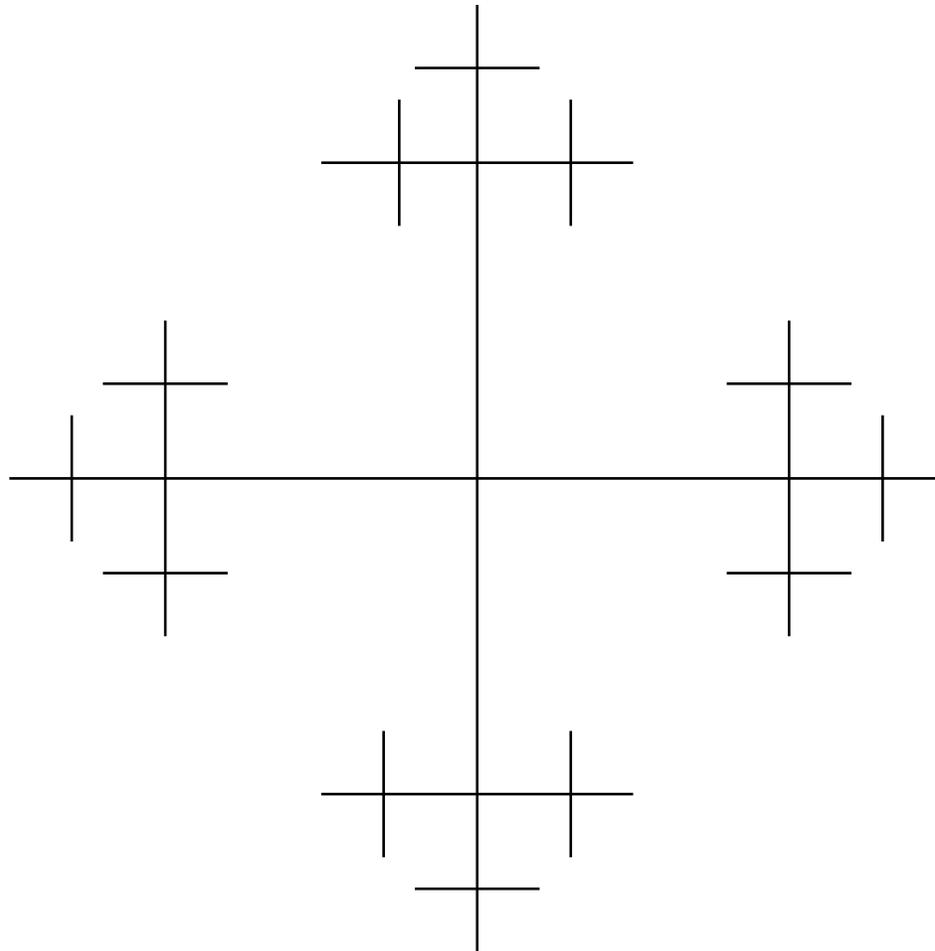
Peso estatístico $z_i^9 z_e^{10}$.

Entropia de cadeias polidispersas

Solução exata na rede de Bethe (região central de uma árvore de Cayley) de coordenação q :

Entropia de cadeias polidispersas

Solução exata na rede de Bethe (região central de uma árvore de Cayley) de coordenação q :



Entropia de cadeias polidispersas

Determinamos o potencial grande canônico e a entropia.

Entropia de cadeias polidispersas

Determinamos o potencial grande canônico e a entropia. Incremento de entropia em relação ao caso monodisperso ($\bar{M} = M$):

$$\Delta s(\rho, M) = \frac{\rho}{M} [(M - 1) \ln(M - 1) - (M - 2) \ln(M - 2)],$$

Independente do número de coordenação q

Entropia de cadeias polidispersas

Determinamos o potencial grande canônico e a entropia. Incremento de entropia em relação ao caso monodisperso ($\bar{M} = M$):

$$\Delta s(\rho, M) = \frac{\rho}{M} [(M - 1) \ln(M - 1) - (M - 2) \ln(M - 2)],$$

Independente do número de coordenação q
Probabilidade de encontrar uma cadeia com M monômeros na região central:

$$r_M = \frac{1}{\bar{M} - 1} \left(\frac{\bar{M} - 2}{\bar{M} - 1} \right)^{M-2},$$

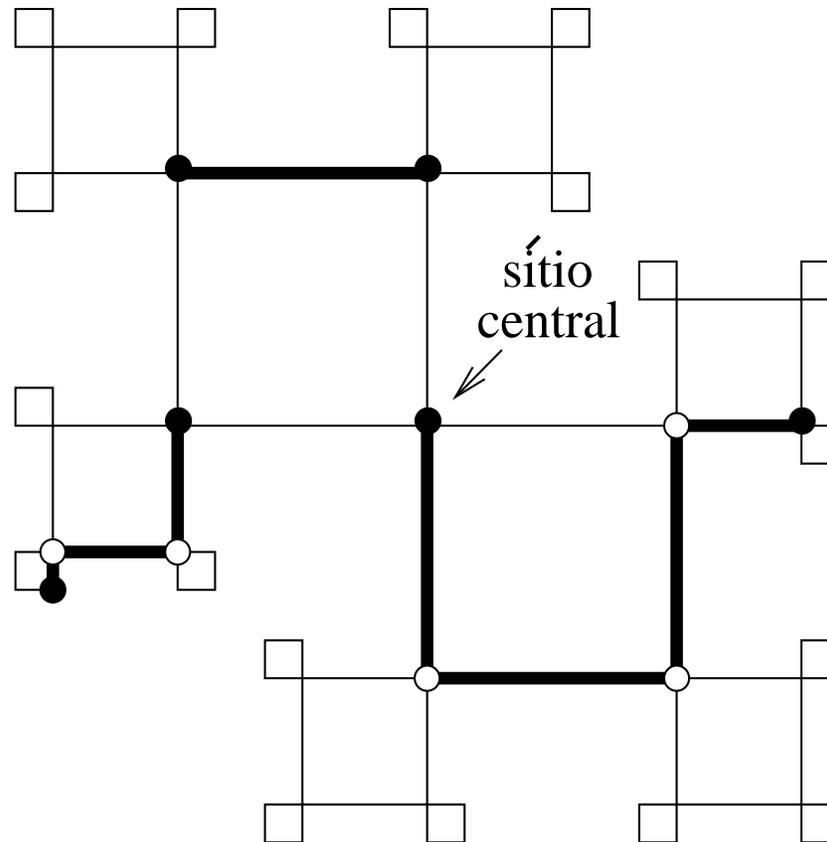
com $\bar{M} = 2(1 + \rho_i/\rho_e)$ sendo o peso molecular médio das cadeias. Independente de q e ρ .

Entropia de cadeias polidispersas

Modelo numa rede de Husimi formada por quadrados, ramificação σ . Exemplo com $\sigma = 1$:

Entropia de cadeias polidispersas

Modelo numa rede de Husimi formada por quadrados, ramificação σ . Exemplo com $\sigma = 1$:

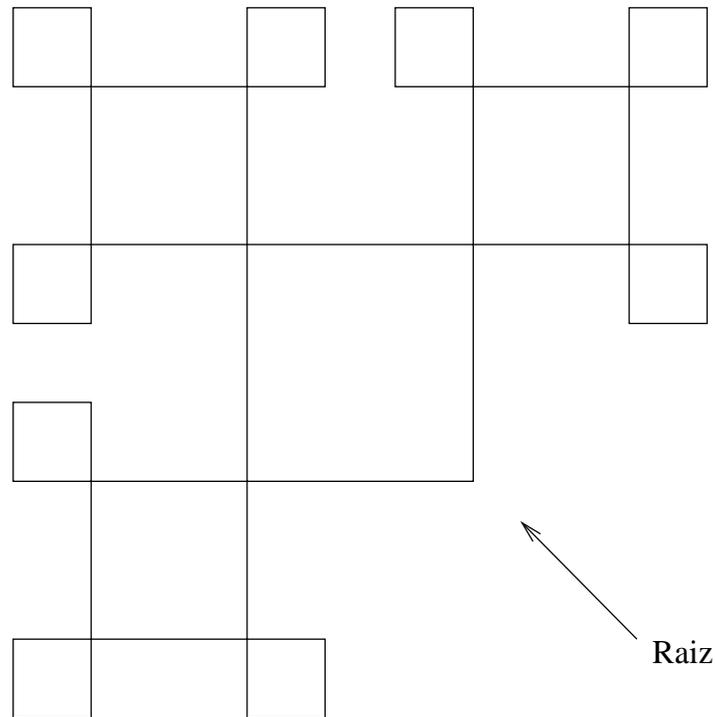


Entropia de cadeias polidispersas

Definimos funções de partição parciais de sub-árvores com configuração fixa da raíz:

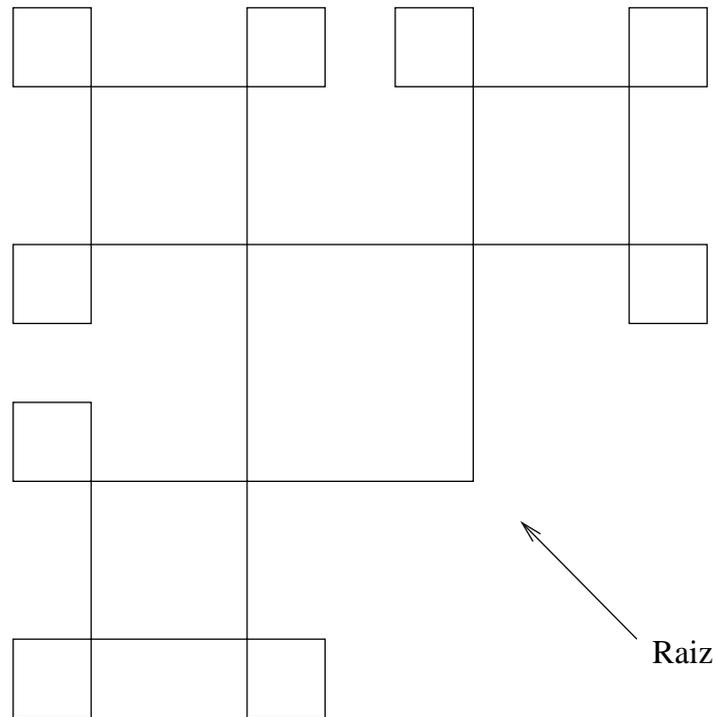
Entropia de cadeias polidispersas

Definimos funções de partição parciais de sub-árvores com configuração fixa da raiz:



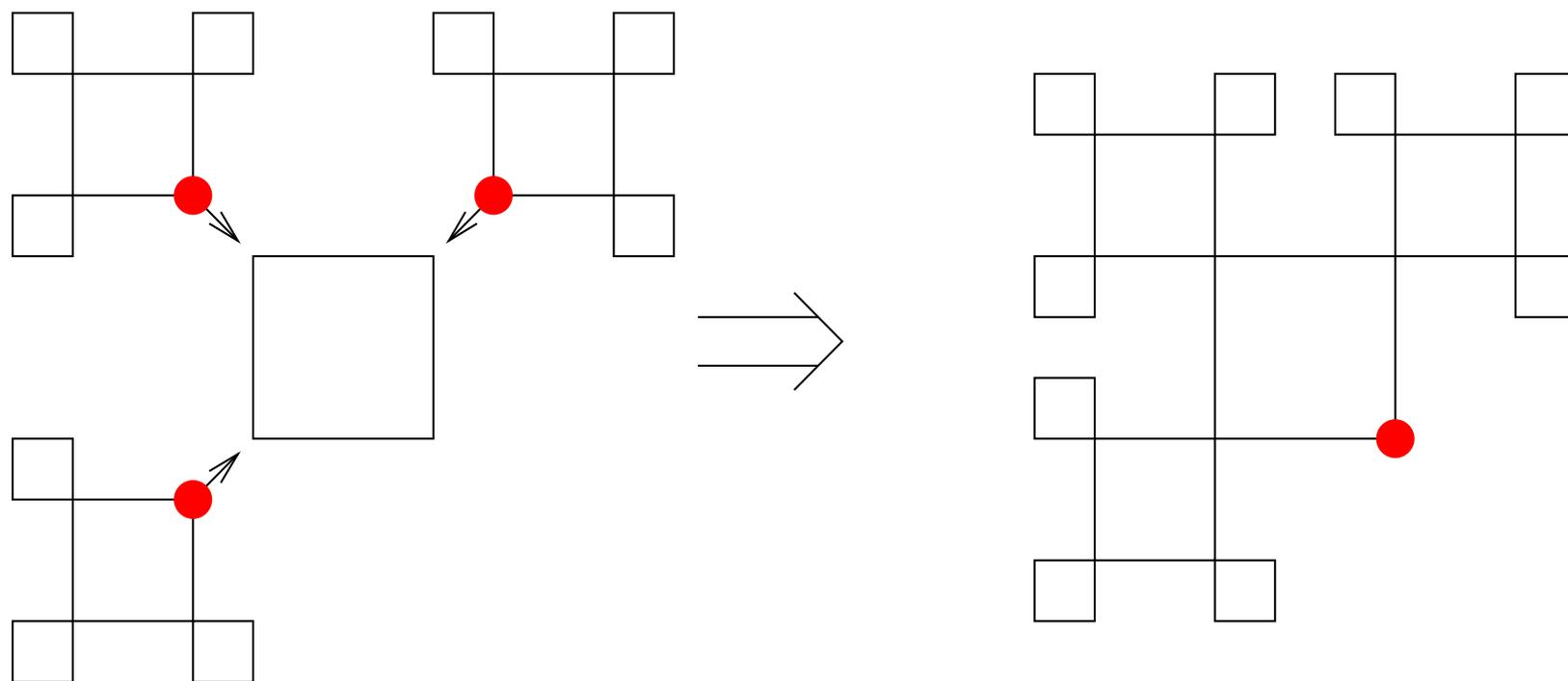
Entropia de cadeias polidispersas

Definimos funções de partição parciais de sub-árvores com configuração fixa da raiz:



Unindo 3σ sub-árvores com m gerações \rightarrow uma sub-árvore com $m + 1$ gerações. Relações de recorrência para as fpp.

Entropia de cadeias polidispersas

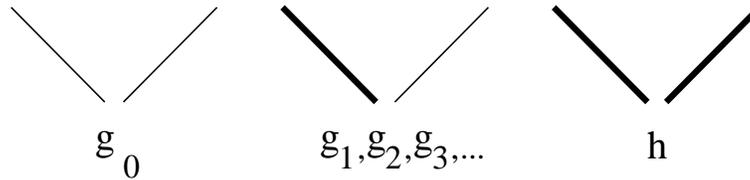


Entropia de cadeias polidispersas

Configurações da raiz:

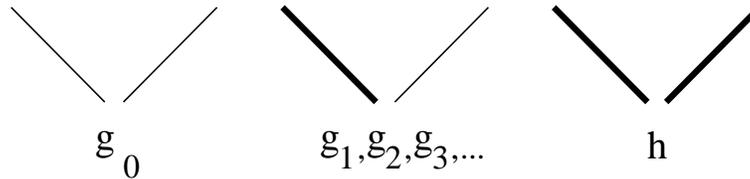
Entropia de cadeias polidispersas

Configurações da raiz:



Entropia de cadeias polidispersas

Configurações da raiz:



Razões entre as fpp:

$$G_i = \frac{g_i}{g_0}, \quad i = 1, 2, \dots$$

$$H = \frac{h}{g_0},$$

$$K = \frac{k}{g_0} = \sum_{i=1}^{\infty} G_i.$$

Entropia de cadeias polidispersas

Relações de recorrência para as razões: ponto fixo corresponde ao limite termodinâmico.

Entropia de cadeias polidispersas

Relações de recorrência para as razões: ponto fixo corresponde ao limite termodinâmico.

Função de partição grande-canônica para o modelo na árvore: conectar $\sigma + 1$ sub-árvores ao sítio central:

$$\Xi = g_0^{\sigma+1} \left[1 + (\sigma + 1)z_e K + (\sigma + 1)z_i H + \frac{(\sigma + 1)\sigma}{2} z_i K^2 \right].$$

Daí podemos obter as densidades ρ_i e ρ_e no sítio central.

Entropia de cadeias polidispersas

Relações de recorrência para as razões: ponto fixo corresponde ao limite termodinâmico.

Função de partição grande-canônica para o modelo na árvore: conectar $\sigma + 1$ sub-árvores ao sítio central:

$$\Xi = g_0^{\sigma+1} \left[1 + (\sigma + 1)z_e K + (\sigma + 1)z_i H + \frac{(\sigma + 1)\sigma}{2} z_i K^2 \right].$$

Daí podemos obter as densidades ρ_i e ρ_e no sítio central. Entropia pode ser obtida integrando as equações de estado. Outra maneira: calcular o potencial por sítio na região central ϕ_b (generalização de um argumento de Gujrati)

Entropia de cadeias polidispersas

Árvore com m gerações:

$$\Phi_m = -k_b T \ln \Xi_m = N_{s,m} \phi_s + N_{b,m} \phi_b.$$

Entropia de cadeias polidispersas

Árvore com m gerações:

$$\Phi_m = -k_b T \ln \Xi_m = N_{s,m} \phi_s + N_{b,m} \phi_b.$$

A partir de $N_{s,m}$ e $N_{b,m}$, considerando duas árvores (m e $m + 1$ gerações), obtemos:

$$\phi_b = -\frac{k_B T}{4} \ln \left(\frac{\Xi_{m+1}}{\Xi_m^{3\sigma}} \right),$$

no limite $m \rightarrow \infty$.

Entropia de cadeias polidispersas

Árvore com m gerações:

$$\Phi_m = -k_b T \ln \Xi_m = N_{s,m} \phi_s + N_{b,m} \phi_b.$$

A partir de $N_{s,m}$ e $N_{b,m}$, considerando duas árvores (m e $m + 1$ gerações), obtemos:

$$\phi_b = -\frac{k_B T}{4} \ln \left(\frac{\Xi_{m+1}}{\Xi_m^{3\sigma}} \right),$$

no limite $m \rightarrow \infty$.

Entropia por sítio é dada pela equação de estado:

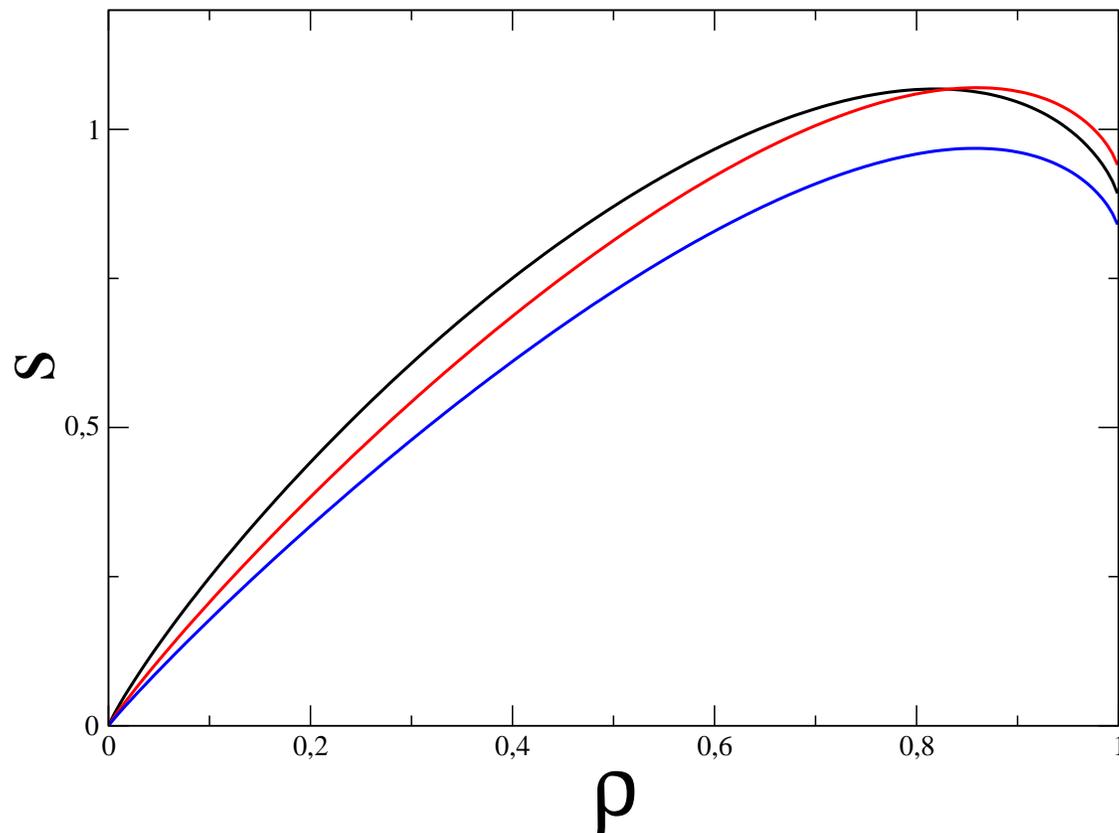
$$s = - \left(\frac{\partial \phi_b}{\partial T} \right)_{\mu_e, \mu_i}.$$

Entropia de cadeias polidispersas

Entropia como função da densidade para $\sigma = 1$ com $\bar{M} = 3, 6$ e 10 (cima para baixo). Resultados muito próximos dos da rede de Bethe ($\approx 1\%$).

Entropia de cadeias polidispersas

Entropia como função da densidade para $\sigma = 1$ com $\bar{M} = 3, 6$ e 10 (cima para baixo). Resultados muito próximos dos da rede de Bethe ($\approx 1\%$).



Entropia de cadeias polidispersas

Entropias de rede cheia ($\rho = \rho_i + \rho_e = 1$) para $q = 4$:

Entropia de cadeias polidispersas

Entropias de rede cheia ($\rho = \rho_i + \rho_e = 1$) para $q = 4$:

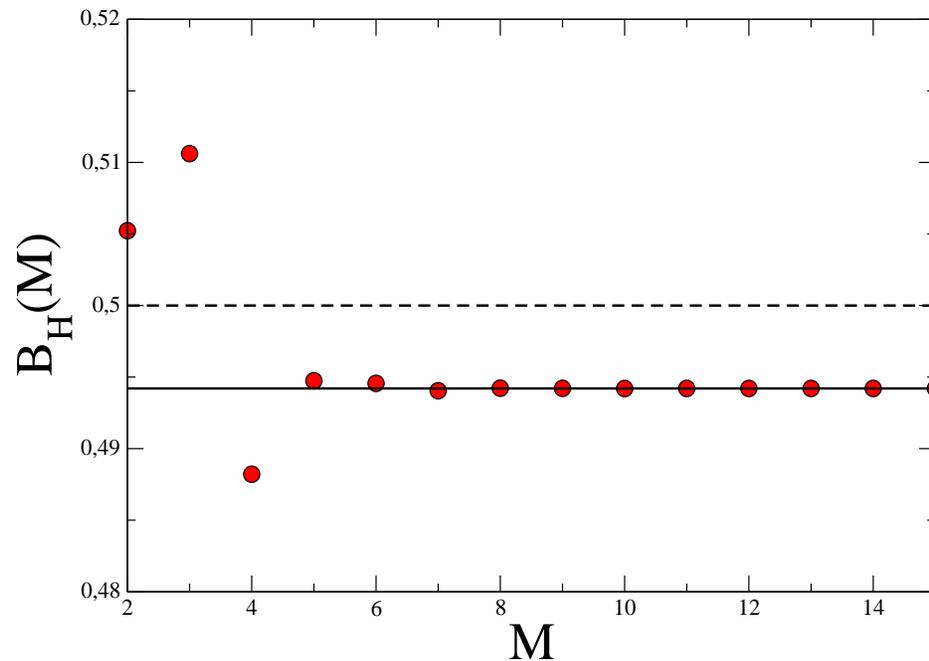
M	Bethe (m)	Husimi (m)	Bethe (p)	Husimi (p)
2	0,26162	0,26743	0,26162	0,26743
3	0,42284	0,41295	0,88493	0,88650
4	0,48166	0,48951	0,95904	0,95969
5	0,50669	0,50888	0,95656	0,95673
6	0,51349	0,51265	0,93473	0,93467
7	0,52217	0,52284	0,90836	0,90820
∞	0,4055	0,4090	0,4055	0,4090

Entropia de cadeias polidispersas

A partir das razões G_i : cálculo da probabilidade r_M de encontrar cadeias com M monômeros. Não é mais exponencial e depende de q e ρ . $B(M) = r_{M+1}/r_M$ para $\bar{M} = 3$ e $\sigma = 3$, com $\rho = 0.3019045$:

Entropia de cadeias polidispersas

A partir das razões G_i : cálculo da probabilidade r_M de encontrar cadeias com M monômeros. Não é mais exponencial e depende de q e ρ . $B(M) = r_{M+1}/r_M$ para $\bar{M} = 3$ e $\sigma = 3$, com $\rho = 0.3019045$:

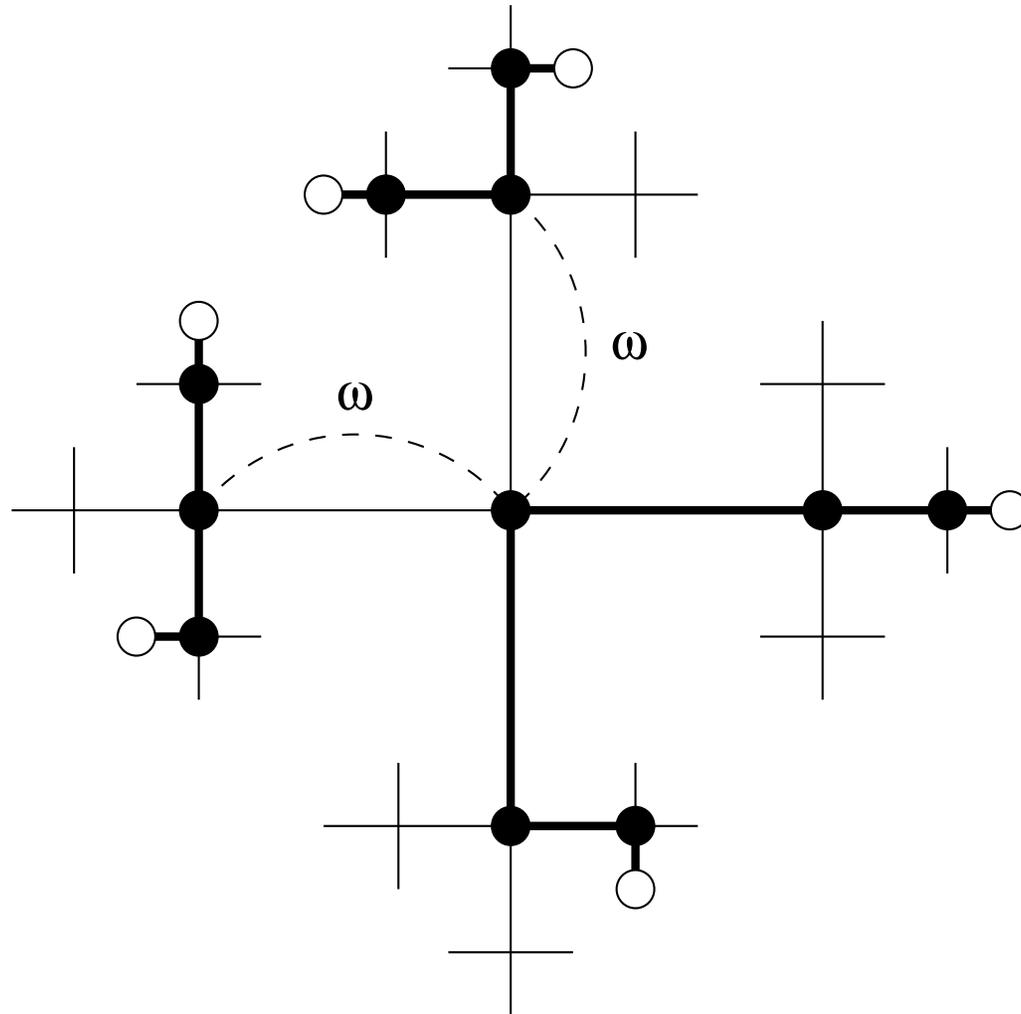


Transição de colapso

Modelo padrão: SASAW's. Na rede de Bethe: cadeias com monômeros extremos na superfície (peso $z^{11}\omega^2$):

Transição de colapso

Modelo padrão: SASAW's. Na rede de Bethe: cadeias com monômeros extremos na superfície (peso $z^{11}\omega^2$):

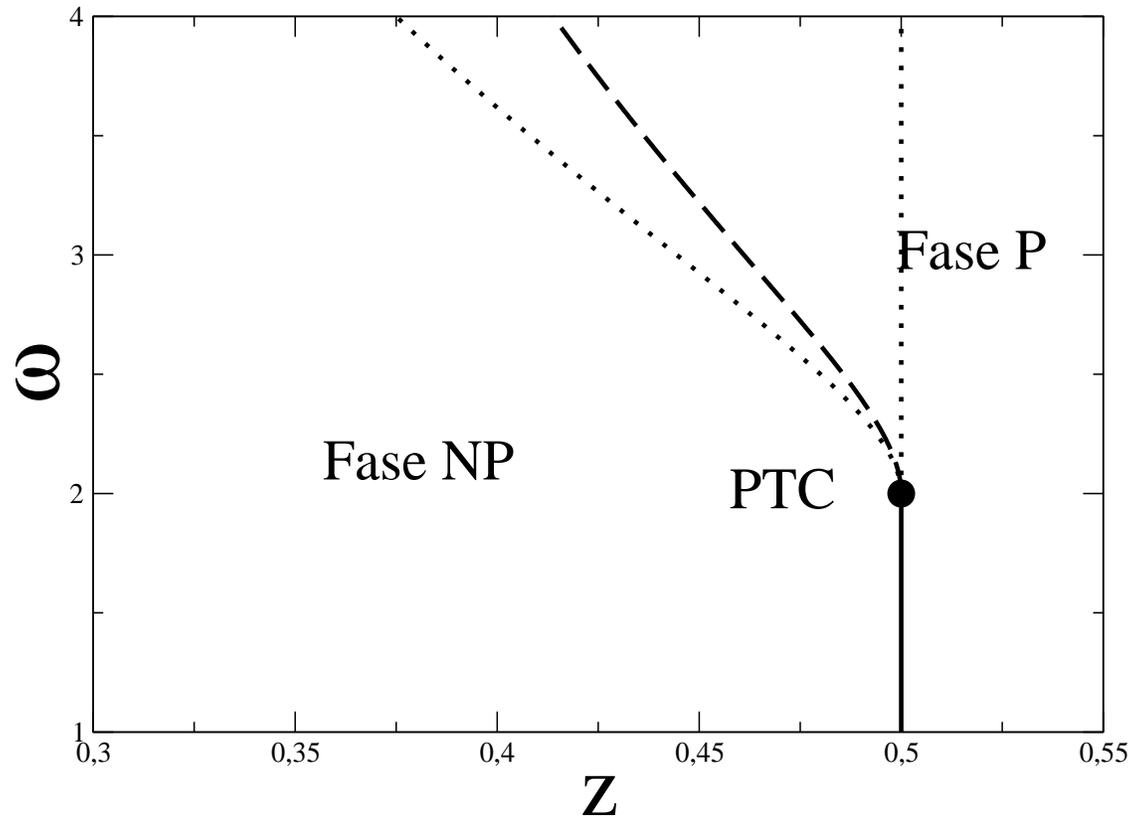


Transição de colapso

Diagrama de fases ($q = 3$):

Transição de colapso

Diagrama de fases ($q = 3$):



Transição de colapso

Em 2006, Krawczyk et al propuseram e estudaram um modelo alternativo: até K monômeros por sítio (MMS), interação apenas entre monômeros *no mesmo sítio*.

Transição de colapso

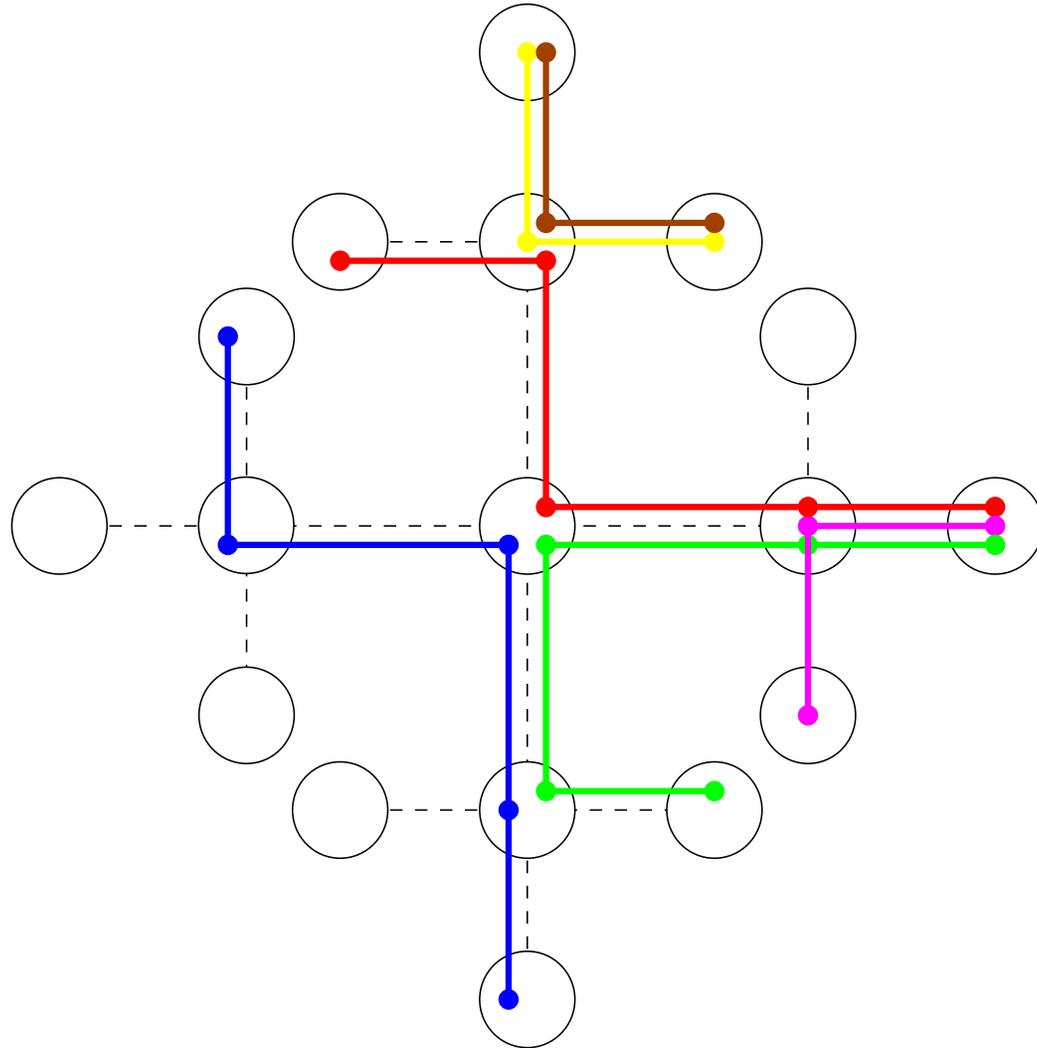
Em 2006, Krawczyk et al propuseram e estudaram um modelo alternativo: até K monômeros por sítio (MMS), interação apenas entre monômeros *no mesmo sítio*. Simulações canônicas nas redes quadrada e cúbica simples, caminhadas com reversão imediata proibida (RF) e permitida (RA) para $K = 3$.

Transição de colapso

Em 2006, Krawczyk et al propuseram e estudaram um modelo alternativo: até K monômeros por sítio (MMS), interação apenas entre monômeros *no mesmo sítio*. Simulações canônicas nas redes quadrada e cúbica simples, caminhadas com reversão imediata proibida (RF) e permitida (RA) para $K = 3$. Resolvemos o modelo RF com $K = 3$ (formalismo grande-canônico) na rede de Bethe de coordenação q .

Transição de colapso

Peso estatístico da configuração mostrada: $\omega_1^6 \omega_2^3 \omega_3^4$



Transição de colapso

Três pontos fixos estáveis: Não polimerizado (NP) e duas fases polimerizadas regulares (P1 e P2, a primeira mais anisotrópica). Outros pontos fixos (DO e TO) não correspondem nunca à fase de mínima energia livre.

Transição de colapso

Três pontos fixos estáveis: Não polimerizado (NP) e duas fases polimerizadas regulares (P1 e P2, a primeira mais anisotrópica). Outros pontos fixos (DO e TO) não correspondem nunca à fase de mínima energia livre. Regiões de estabilidade determinadas pelo jacobiano das relações de recorrência.

Transição de colapso

Três pontos fixos estáveis: Não polimerizado (NP) e duas fases polimerizadas regulares (P1 e P2, a primeira mais anisotrópica). Outros pontos fixos (DO e TO) não correspondem nunca à fase de mínima energia livre.

Regiões de estabilidade determinadas pelo jacobiano das relações de recorrência.

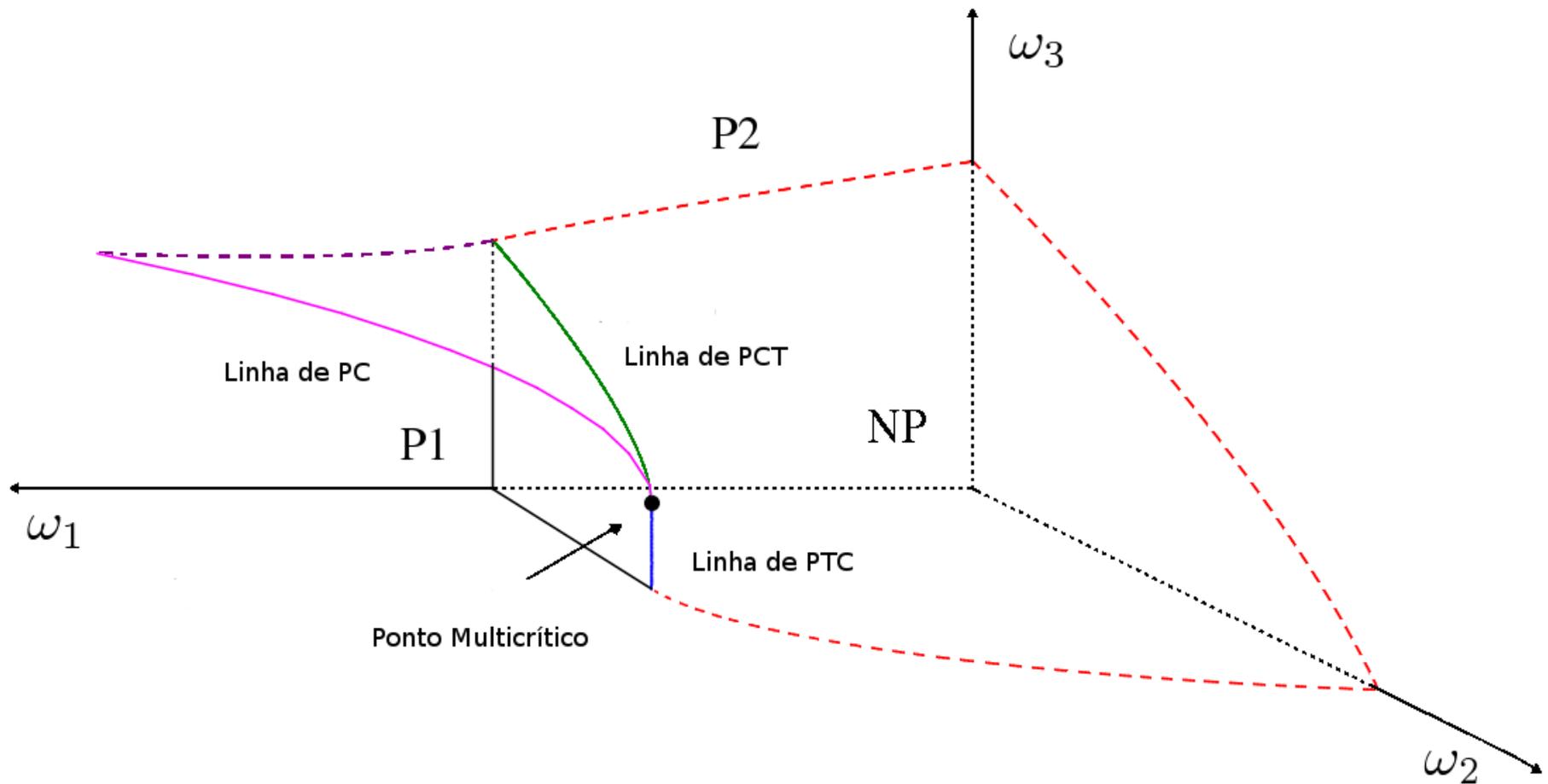
Superfícies de coexistência calculadas a partir do potencial grande-canônico por sítio interno.

Transição de colapso

Diagrama de fases do modelo na rede de Bethe:

Transição de colapso

Diagrama de fases do modelo na rede de Bethe:



Transição de colapso

Energias nas simulações canônicas: $\epsilon_0 = 0$ (sítio com 1 monômero) ϵ_1 (sítio com 2 monômeros) e ϵ_2 (sítio com 3 monômeros). Parâmetros $\beta_1 = -\epsilon_1/(k_B T)$ e $\beta_2 = -\epsilon_2/(k_B T)$

Transição de colapso

Energias nas simulações canônicas: $\epsilon_0 = 0$ (sítio com 1 monômero) ϵ_1 (sítio com 2 monômeros) e ϵ_2 (sítio com 3 monômeros). Parâmetros $\beta_1 = -\epsilon_1/(k_B T)$ e $\beta_2 = -\epsilon_2/(k_B T)$

Grande-canônico: $\omega_1 = z$, $\omega_2 = z^2 \exp[-\epsilon_1/(k_B T)]$ e $\omega_3 = z^3 \exp[-\epsilon_2/(k_B T)]$. Logo:

$$\beta_1 = \ln \left(\frac{\omega_2}{\omega_1^2} \right),$$

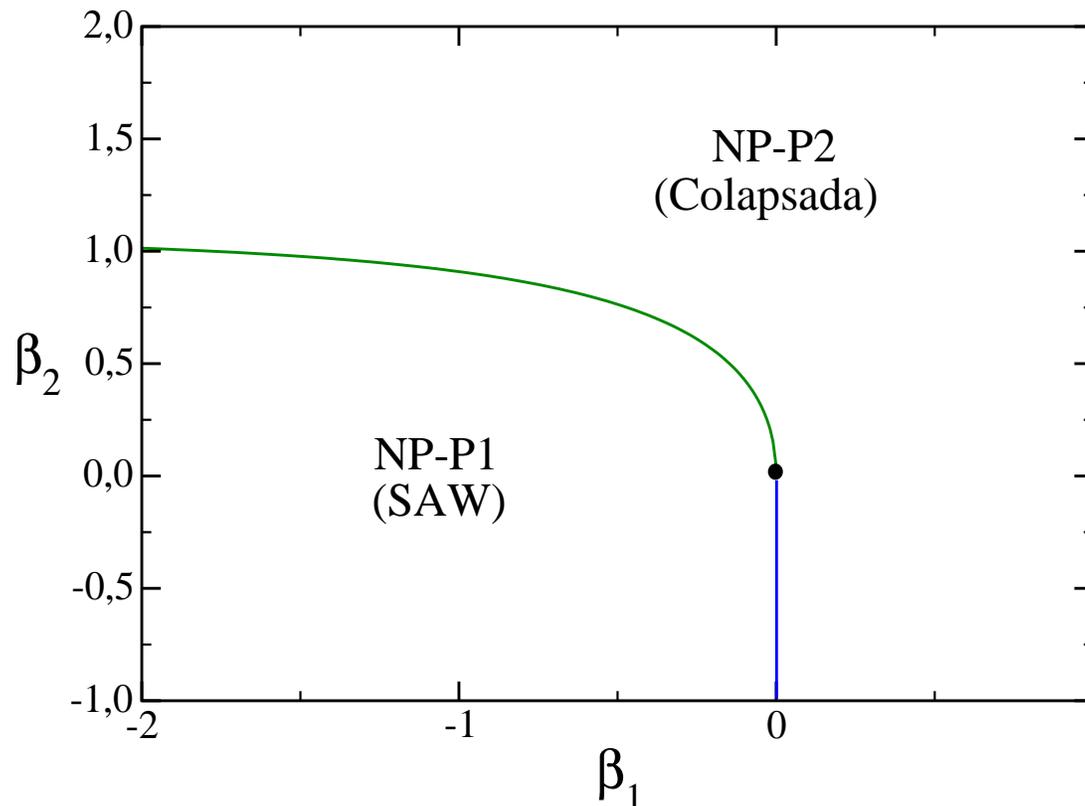
$$\beta_2 = \ln \left(\frac{\omega_3}{\omega_1^3} \right).$$

Transição de colapso

Simulações canônicas: excesso de solvente, sistema heterogêneo, sempre na fronteira da fase não polimerizada. Diagrama de fases canônico:

Transição de colapso

Simulações canônicas: excesso de solvente, sistema heterogêneo, sempre na fronteira da fase não polimerizada. Diagrama de fases canônico:

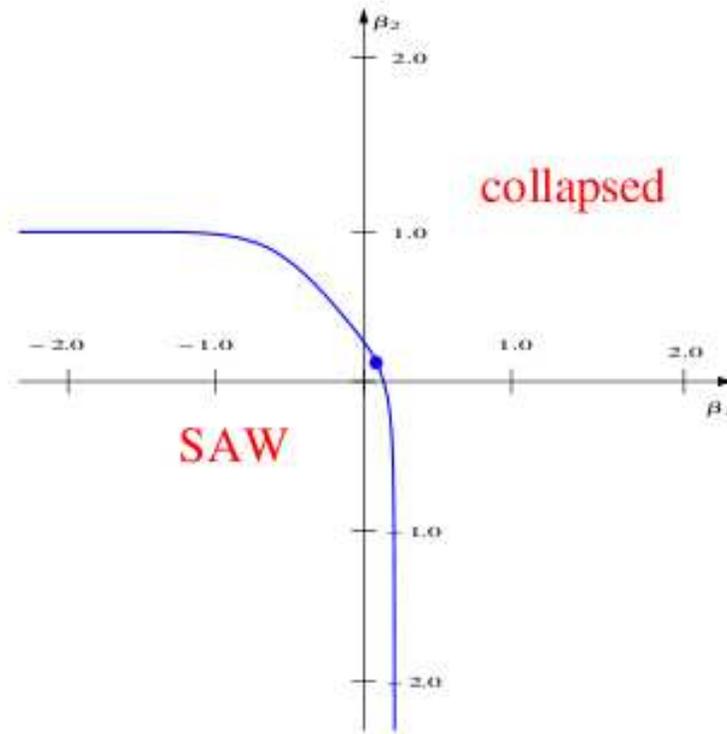


Transição de colapso

Diagrama de fases canônico (simulações na rede cúbica):

Transição de colapso

Diagrama de fases canônico (simulações na rede cúbica):



Transição de colapso

Relação entre modelo MMS e SASAW's: $\epsilon_1 = -\epsilon$ e $\epsilon_2 = -3\epsilon$. Isso implica $\beta_1 = 3\beta_2$. Rede de Bethe: cruza o ponto multicrítico. Rede cúbica: cruza a linha tricrítica?

Conclusão

- Cálculo do potencial nas redes de Bethe e de Husimi facilita a localização da coexistência de fases.

Conclusão

- Cálculo do potencial nas redes de Bethe e de Husimi facilita a localização da coexistência de fases.
- Cálculos em redes hierárquicas levam a resultados complementares aos de simulações.

Conclusão

- Cálculo do potencial nas redes de Bethe e de Husimi facilita a localização da coexistência de fases.
- Cálculos em redes hierárquicas levam a resultados complementares aos de simulações.
- Será interessante estudar o caso de cadeias polidispersas na rede quadrada por MT (iniciado com Pedro Renault de Barros).

Conclusão

- Cálculo do potencial nas redes de Bethe e de Husimi facilita a localização da coexistência de fases.
- Cálculos em redes hierárquicas levam a resultados complementares aos de simulações.
- Será interessante estudar o caso de cadeias polidispersas na rede quadrada por MT (iniciado com Pedro Renault de Barros).
- Estudo do modelo MMS na rede quadrada por MT.

Conclusão

- Cálculo do potencial nas redes de Bethe e de Husimi facilita a localização da coexistência de fases.
- Cálculos em redes hierárquicas levam a resultados complementares aos de simulações.
- Será interessante estudar o caso de cadeias polidispersas na rede quadrada por MT (iniciado com Pedro Renault de Barros).
- Estudo do modelo MMS na rede quadrada por MT.
- Modelo de cadeias rígidas na rede quadrada por MT (iniciado com R. Ravindran e D. Dhar).

Conclusão

- Cálculo do potencial nas redes de Bethe e de Husimi facilita a localização da coexistência de fases.
- Cálculos em redes hierárquicas levam a resultados complementares aos de simulações.
- Será interessante estudar o caso de cadeias polidispersas na rede quadrada por MT (iniciado com Pedro Renault de Barros).
- Estudo do modelo MMS na rede quadrada por MT.
- Modelo de cadeias rígidas na rede quadrada por MT (iniciado com R. Ravindran e D. Dhar).
- Gases de rede com exclusão de múltiplos vizinhos na rede quadrada por MT (iniciado com Tiago J. de Oliveira, Jefferson Arenzon e Heitor Fernandes).