

The background of the slide is a close-up photograph of a frozen surface, likely a window or a piece of plastic. It is covered in a dense layer of ice crystals and numerous small, clear bubbles trapped within the ice. The lighting creates a shimmering, textured effect across the entire surface.

# Transição de Fase

# O que é um transição de fase?

**Fases** são estados macroscópicos específicos da Matéria em equilíbrio termodinâmico. Exemplo: estado sólido, líquido ou gasoso.

**Transição de fase** é uma transformação termodinâmica onde o estado da matéria muda devido a alteração de um ou mais parâmetros termodinâmicos como pressão, temperatura, volume, campo magnético.

Estes parâmetros que levam a uma mudança de fase são chamados de **parâmetro de controle**. Esta mudança corresponde a mudanças nas condições ambientais ou mudança exterior.

## Como estudar a transição de fase?

- A transição de fase é fenômeno coletivo. Ela ocorre devido a uma mudança na organização interna do sistema promovida pela troca de energia com o meio. Em outras palavras, energia é usada para realização da mudança de fase
- Neste processo um número muito grande de partículas interagem entre si ( $N \sim 10^{24}$ ).
- Estas partículas apresentam características que podem diferir de uma para outra, o que torna o seu estudo individual impossível.

## Como estudar a transição de fase?

- Para contornar este problema, podemos fazer uso de ferramentas estatísticas e de algumas leis conhecidas.
- Partir de uma descrição microscópica pode ser muito difícil inicialmente, mas não impossível.
- A estratégia é fazer um estudo das **propriedades macroscópica** antes de se aventurar a estabelecer modelos microscópicos.
- A **termodinâmica** é o resultado da descrição das propriedades macroscópica em função de variáveis ou parâmetros mensuráveis no meio do meio ambiente.

# Variáveis Termodinâmicas

**Temperatura:** mede a quantidade média de energia cinética por molécula em um dado sistema.

Sistemas com diferenças de temperatura, podem entrar em **equilíbrio térmico** por meio da transferência de calor.

O sentido da transferência de calor se dá do corpo mais quente para o mais frio.

# Propriedade dos Gases

**Gás:** Pode ser visto como um conjunto de moléculas ou átomos em movimento permanente e aleatório, com velocidades que aumentam quando a temperatura se eleva.

- não apresentam volume ou forma definidos
- apresentam baixa densidade
- todos apresentam respostas semelhantes ao efeito de temperatura e pressão

**As variáveis de estado:**

**volume que ocupa ( V )**

**quantidade de matéria envolvida ( n – número de moles )**

**pressão ( p )**

**temperatura ( T )**

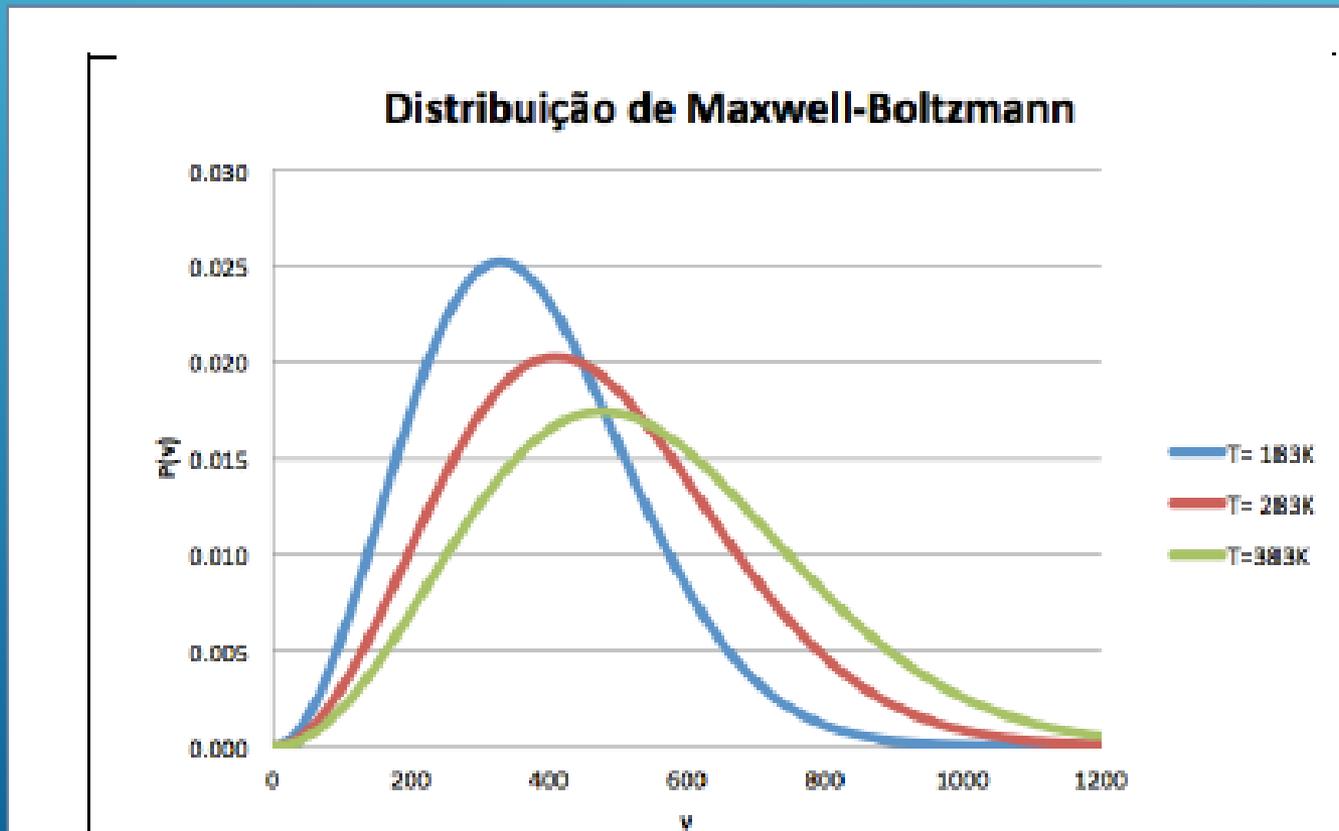
**Equação de estado:**

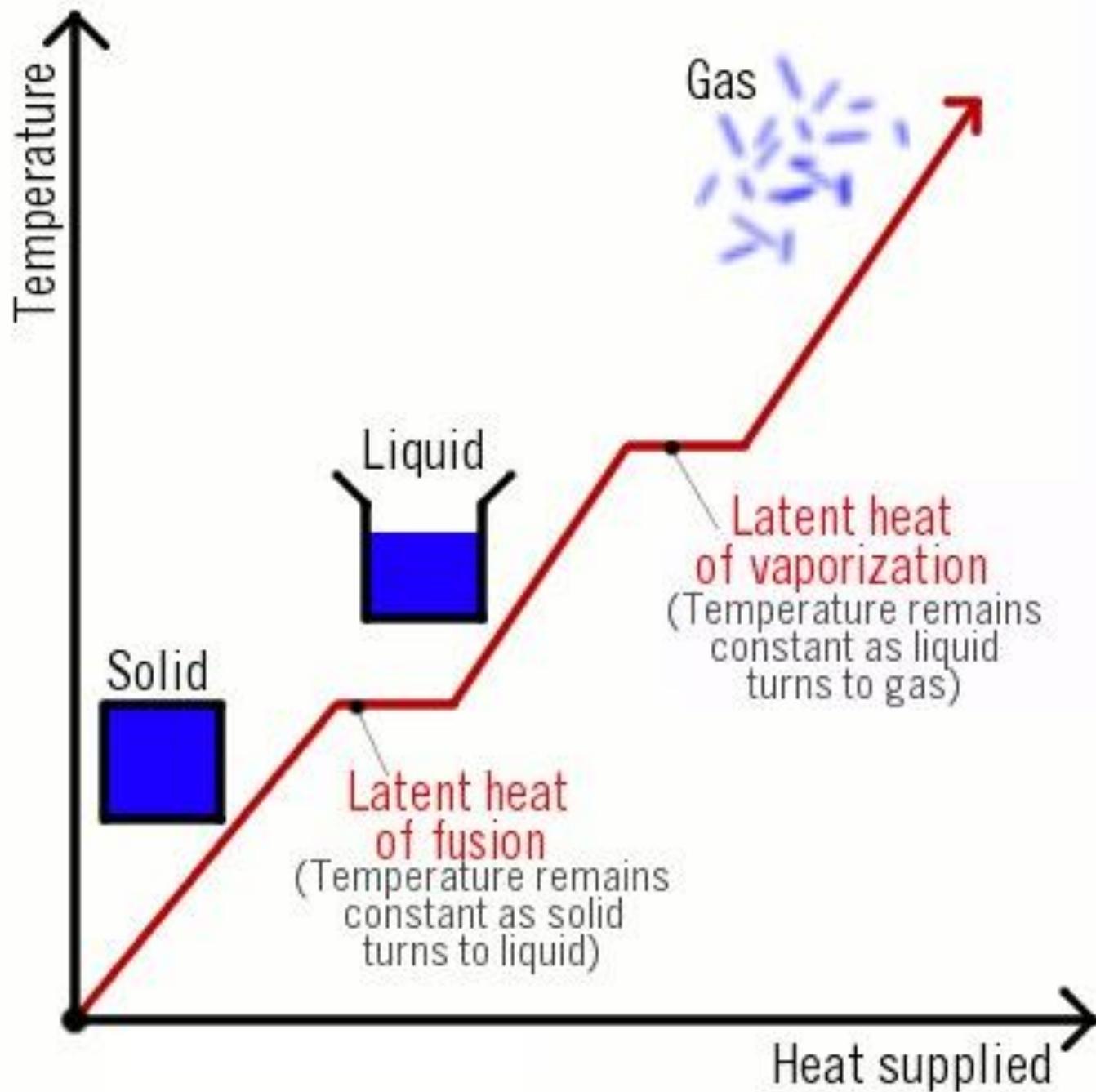
$$p = f(T, V, n)$$

**Exemplo de equação de estado:**  $pV = nRT$

# A distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann

$$P(v) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{1}{2}mv^2/kT} dv.$$





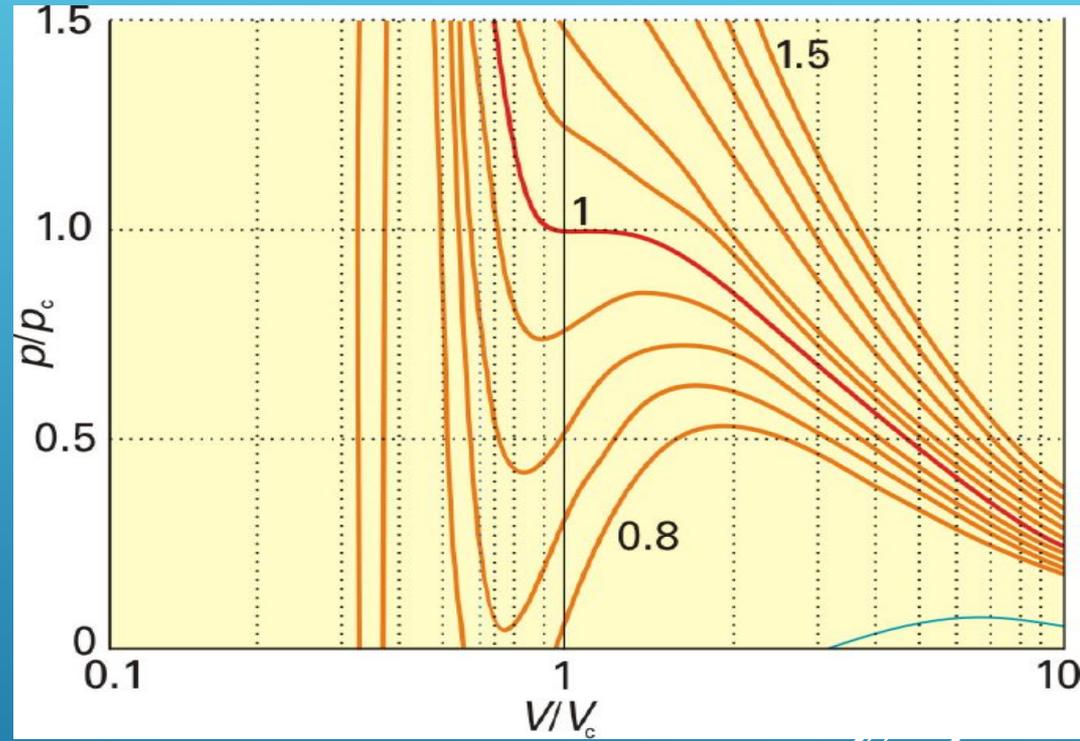
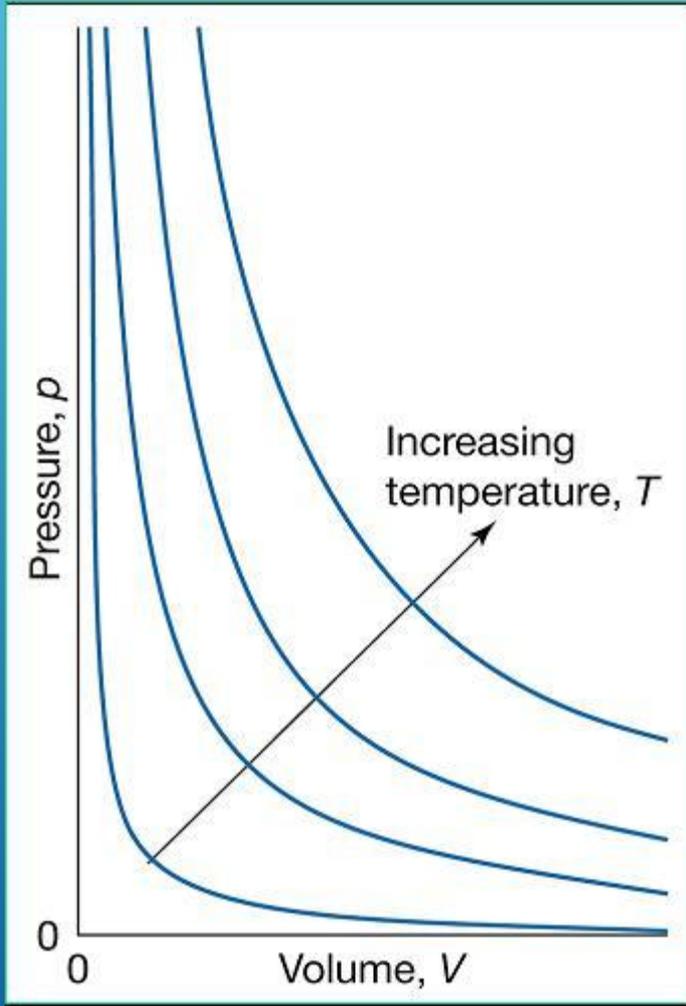
# Quando o gás deixa de ser ideal?

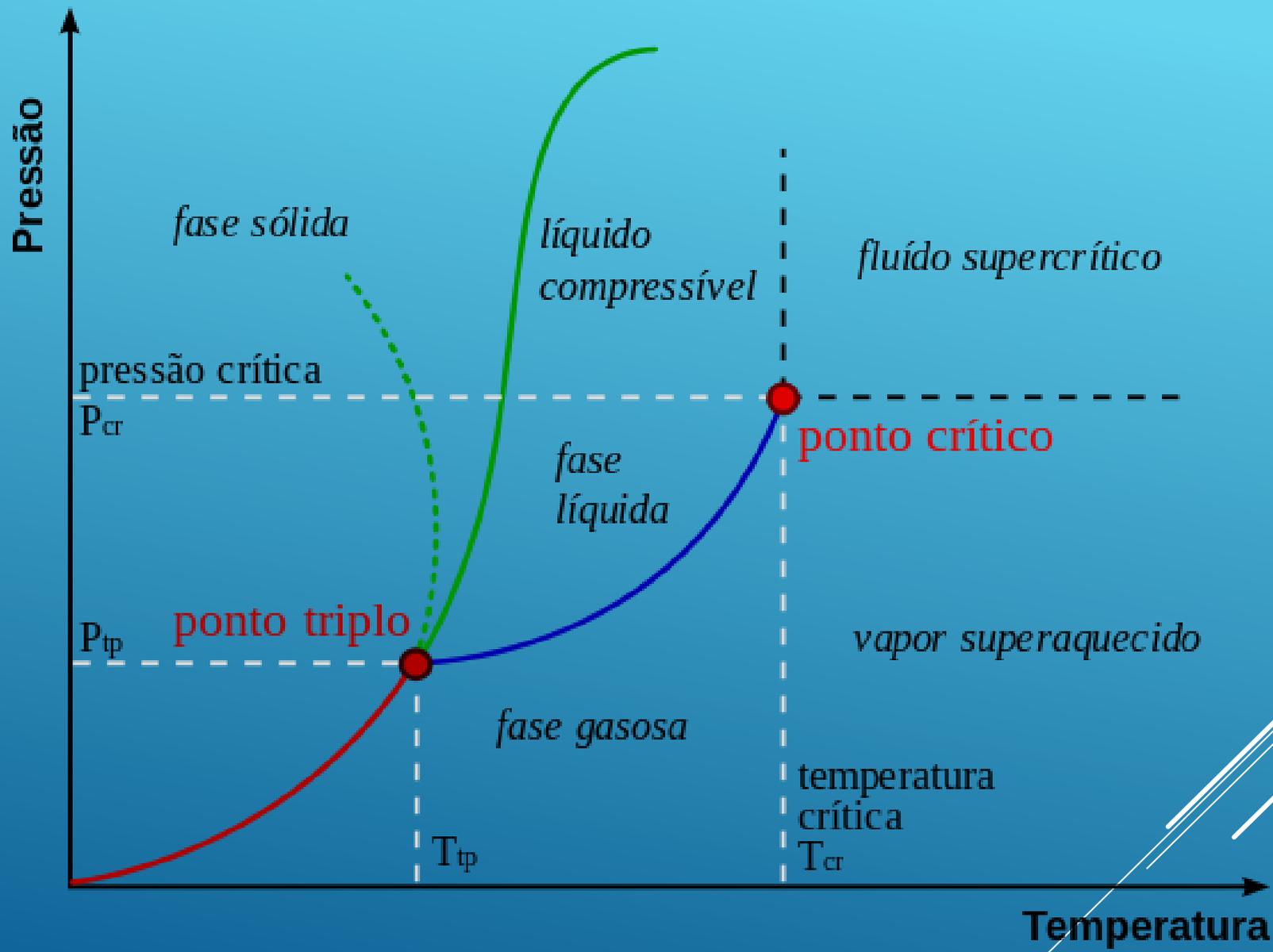
Quando a pressão aumenta muito ou a temperatura diminui bastante, as partículas ficam muito próximas e elas passam a interagir.

A interação entre elas pode trazer novidades!!!

A equação de estado muda:

$$\left( P + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = nRT$$





**Fusão:** A transição do estado sólido para a fase líquida

**Solidificação:** A transição da fase líquida para a fase sólida

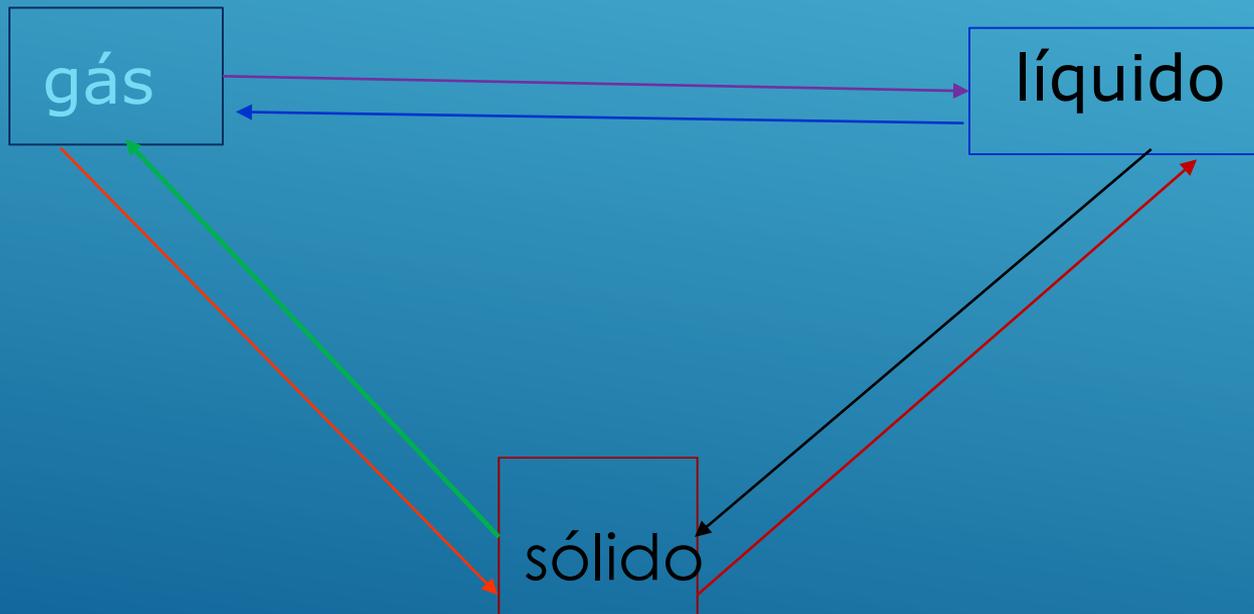
**Fusão:** A transição da fase sólida para a fase líquida

**Evaporação:** A transição da fase líquida para a fase gasosa

**Condensação:** A transição da fase gasosa para a fase líquida

**Sublimação:** A transição da fase sólida para a fase gasosa

**Deposição:** A transição da fase gasosa para a fase sólida



A **transição dita de primeira** ordem ocorrem ao longo de curvas que separam as fases. Estas transições são **descontínuas** (abruptas)

A **transição de fase de segunda** ordem ocorre no chamado **ponto crítico**.

O ponto crítico é o valor do parâmetro de ordem onde as **fases coexistem**. A transição é contínua



# Mecânica Estatística

Mecânica Clássica  
(poucas partículas)



Mecânica Estatística  
(muitas partículas)

Gases, líquidos, sólidos,  
radiação eletromagnética,  
magnetismo,

Termodinâmica

Parâmetros macroscópicos  
Temperatura, Pressão,  
Magnetização não depende  
de modelos específicos da  
interação  
É anterior ao modelo da  
matéria

Mecânica Estatística

Ponte entre o mundo micro,  
(grande número de partículas)  
obedecendo as leis da MC e o  
universo macroscópico das leis  
da Termodinâmica

# Mecânica Estatística

Quando  $N \sim 6 \times 10^{23}$  moléculas, as leis de Newton não podem ser aplicadas. → Recorremos a teoria das probabilidades, as leis estatística com o intuito de reproduzir as regularidades da termodinâmica

Leis da Mecânica + Teoria das  
Probabilidades

Objetivo

Uso das leis básicas para o desenvolvimento de conceitos para o entendimento das características do sistema estudado

## Termodinâmica de Equilíbrio

Parâmetros macroscópicos , termodinâmica clássica é teoria mais antiga , não requer detalhamento das propriedades microscópicas do sistema estudado.

## Mecânica Estatística de Equilíbrio

A partir da descrição microscópica das partículas, recupera toda a termodinâmica clássica .

Apresenta a relação entre parâmetros microscópicos e grandezas macroscópicas do sistema estudado.

## Função de Partição

$$Z \equiv \int e^{-E(p,q)/kT} d\Gamma \quad (\text{classical}) \quad (4.39)$$

$$Z \equiv \sum_i e^{-E_i/kT} \quad (\text{quantum}) \quad (4.40)$$

$$F = -kT \ln Z$$

Energia livre de Helmholtz (4.41)

A outras funções termodinâmicas podem ser calculadas a partir da função de partição

## Energia média do Sistema

$$\langle E \rangle = \sum_i E_i p_i = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{Z} = - \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Entropia  $S$

Energia Livre de Helmholtz

$$F = -Nk_B T \ln Z$$

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, B}$$

entropy

$$M = - \left( \frac{\partial F}{\partial B} \right)_{V, T}$$

magnetization

$$\chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = -\mu_0 \frac{\partial^2 F}{\partial B^2}$$

susceptibility

## O Campo de Magnetização

Quando um material é submetido a um **campo magnético H** (campo aplicado), é originado um **campo de magnetização** do material, **M**.

O **campo de indução magnética** gerado, **B**, é proporcional à soma de **H** e **M**.

O factor de proporcionalidade é a permeabilidade magnética no vazio.

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$$

## A susceptibilidade magnética

Uma vez que  $\mathbf{M}$  resulta da aplicação de  $\mathbf{H}$ , é natural que  $\mathbf{M}$  seja proporcional a  $\mathbf{H}$  ou seja,

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

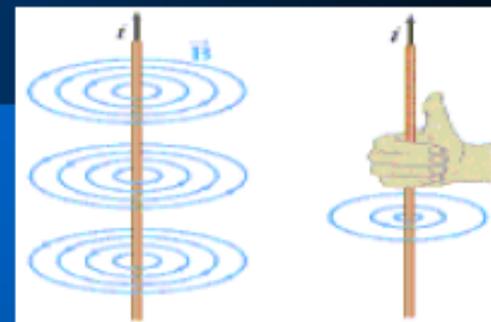
$\chi$  designa-se por **susceptibilidade magnética** do material.

A susceptibilidade magnética permite classificar os materiais em termos das suas propriedades magnéticas.

# Introdução ao Modelo de Ising:

## • Materiais Ferromagnéticos:

• *Corrente Elétrica no Fio*  $\Rightarrow$  *Gera um Campo Magnético em sua volta.*

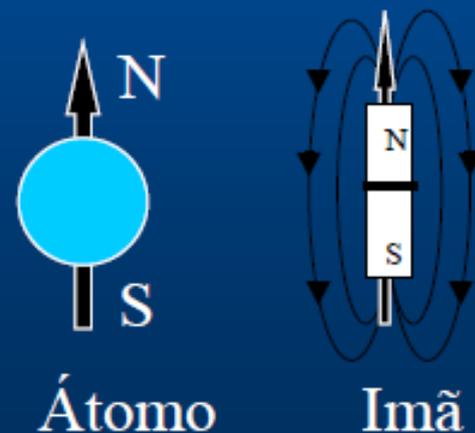


• *Movimento de Elétrons em volta de um átomo ou de uma molécula*  
 $\Rightarrow$  *Gera um minúsculo Campo Magnético orientado em cada átomo (Spin).*

• *Muitos Átomos ou Moléculas na rede*

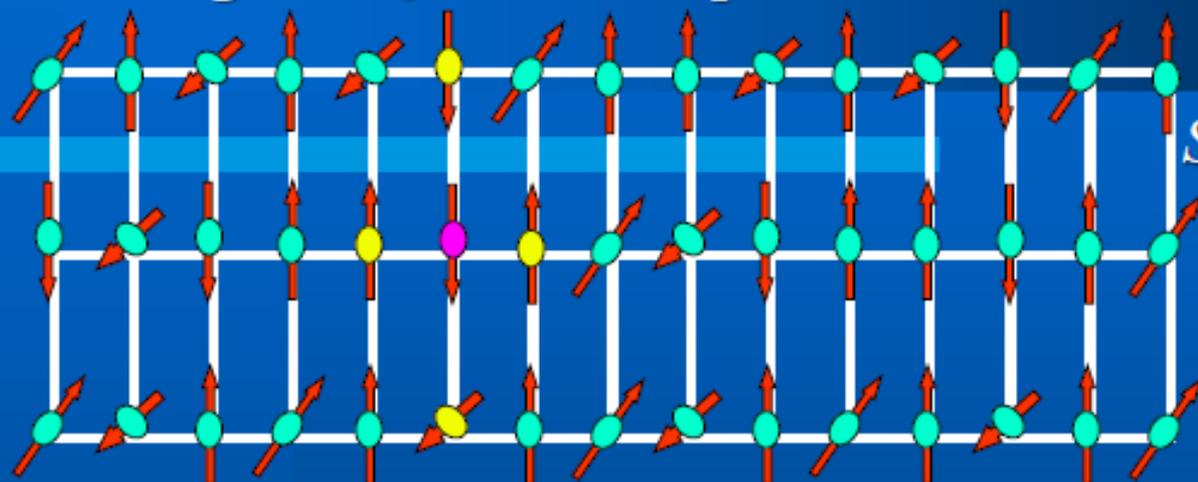
$\Rightarrow$  *Muitos Spins que vão interagir.*

$\Rightarrow$  *Spins gerados Aleatoriamente.*



• *Altas Temperaturas (Acima da Crítica)  $\Rightarrow$  Alta Agitação.*

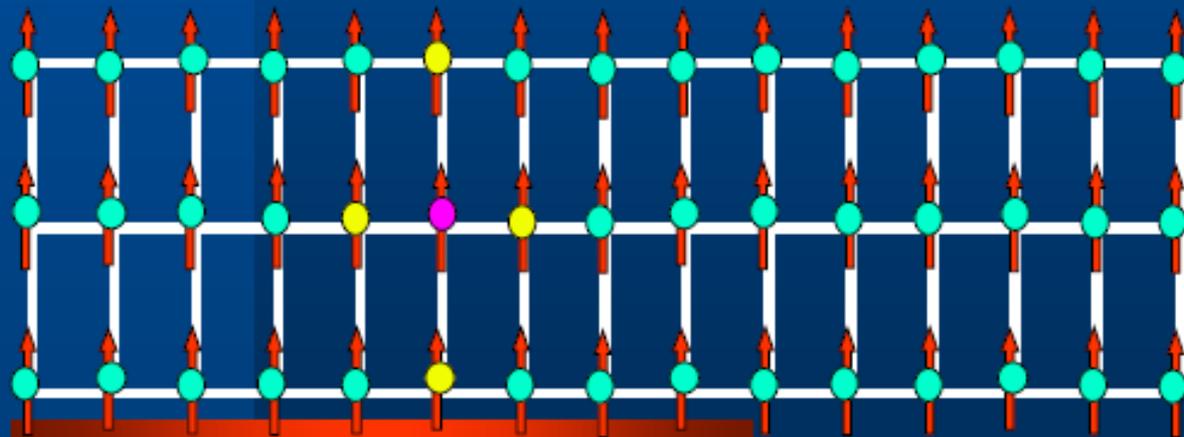
• *Magnetização Média aproximadamente zero.*



*Spins Desorientados.*

• *Baixas Temperaturas (Abaixo da Crítica).*

• *Magnetização Resultante diferente de zero (Spins Paralelos).*



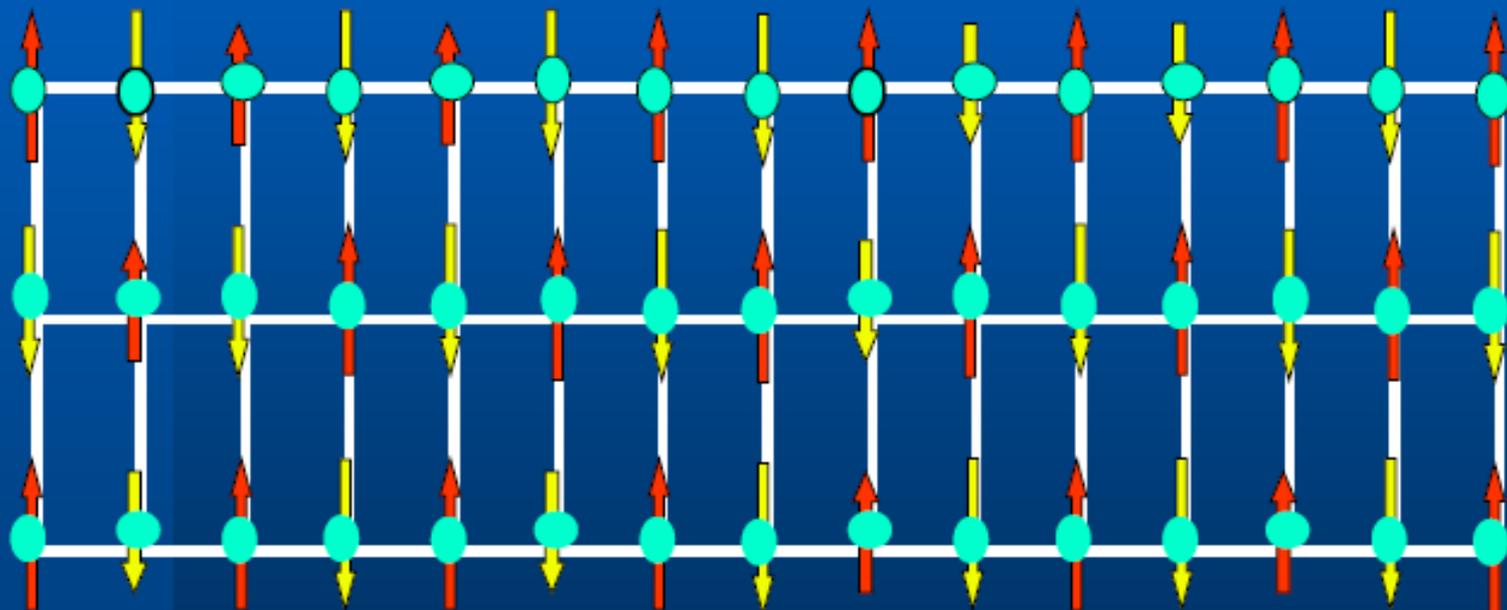
*Spins Orientados.*

• *Materiais Anti-Ferromagnéticos:*

• *Baixas Temperaturas (Abaixo da Crítica).*

• *Magnetização Resultante igual a zero e Spins Orientados (Spins Anti-Paralelos).*

*Spins Orientados.*



• *Explicação teórica detalhada destas e outras propriedades magnéticas*

• *Necessitam tratamento baseado na mecânica quântica.*

## •Explicação Modelo de Ising :

•A energia de interação entre os Spins é dada por:

$$E(\mathbf{s}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - H \sum_i^N \mathbf{s}_i$$

• $J$  = Constante de acoplamento entre os Spins:

• $J > 0$  (Spins tendem a se alinhar Paralelamente)

• $J < 0$  (Spins tendem a se alinhar Anti-Paralelamente)

• $S_i$  = Spin interagente. Pode ser +1 Spin Up (Para Cima) ou  
-1 Spin Down (Para Baixo)

$S_j$  = Spin Vizinho interagente.

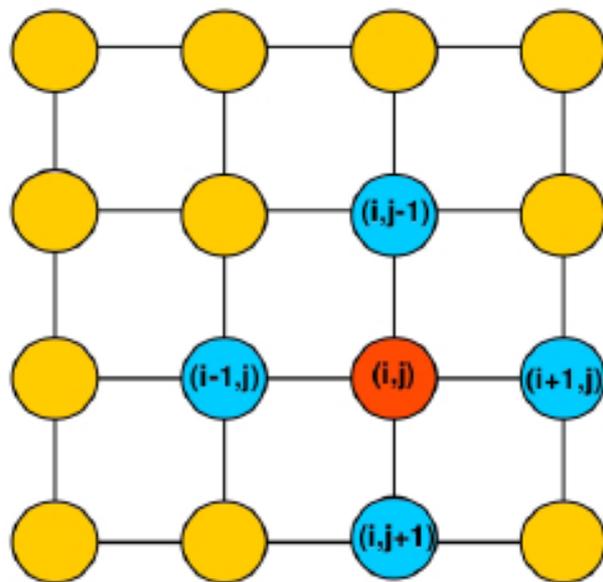
• $\langle i,j \rangle$  = Indica Soma Interação só com os Primeiros Vizinhos.

• $H$  = Campo Magnético Externo Aplicado.

# Modelo de Ising: ferromagnético

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

A soma é realizada sobre os pares de sítios vizinhos mais próximos, representando as energias de interação.



# Solução do Modelo de Ising: ferromagnético

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Soluções são dadas pela função de partição canônica:

$$Z(\vec{K}) = e^{Nf(\vec{K})} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}}$$

onde:

$$\vec{K} = \left( \frac{H}{k_B T}, \frac{J}{k_B T} \right);$$

$f(\vec{K})$  é a densidade de energia livre.

Exemplo Calculo da energia:

$$E_n = -J \sum S_i S_j \quad J = 1.$$

$$E_n = -1(\sum S_i S_j) = -1(-1-1-1-1) = +4$$

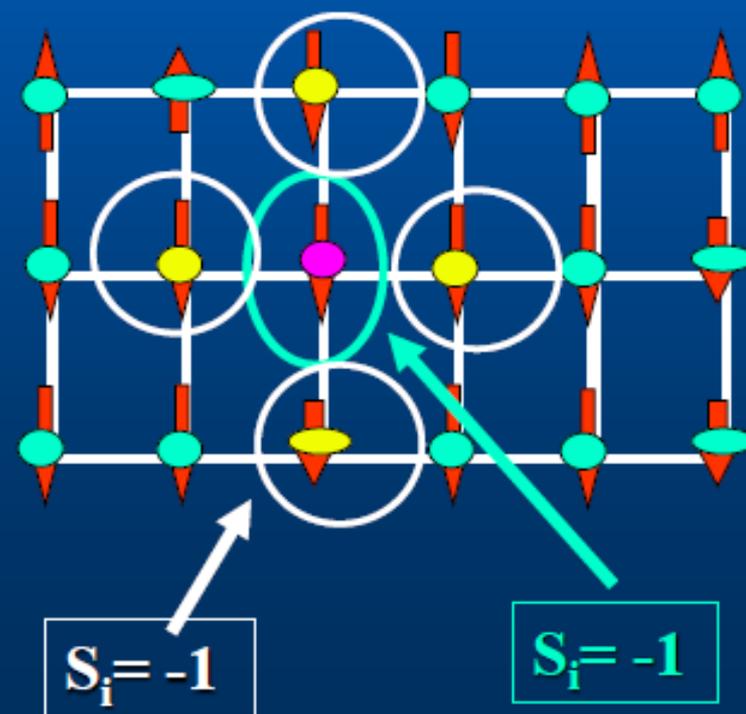
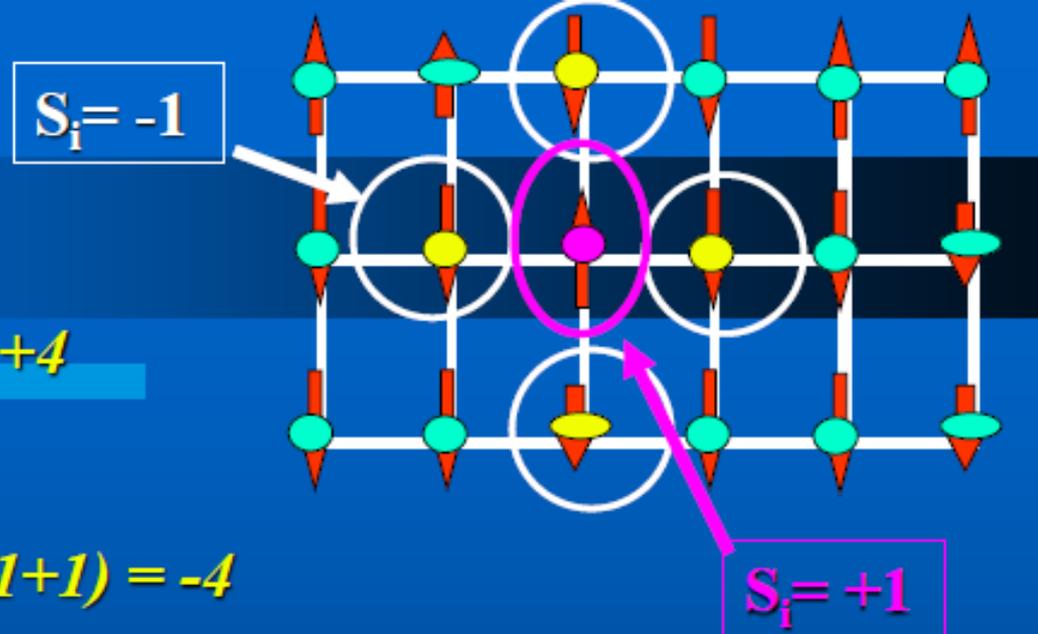
$$E_{n+1} = -1(\sum (-S_i) S_j) = -1(+1+1+1+1) = -4$$

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = -4 - (+4) = -8$$

Aceito essa nova configuração.

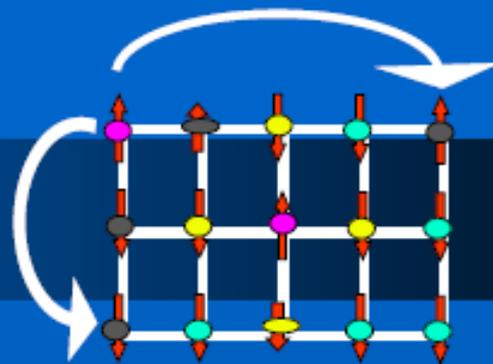
Se  $\Delta E > 0$  Aceito a nova configuração se:

$$\exp(-\Delta E / T) < P(E) < 1/2.$$



## •Condições de Contorno:

- Usamos condições de contorno periódicas:(Toroidais)



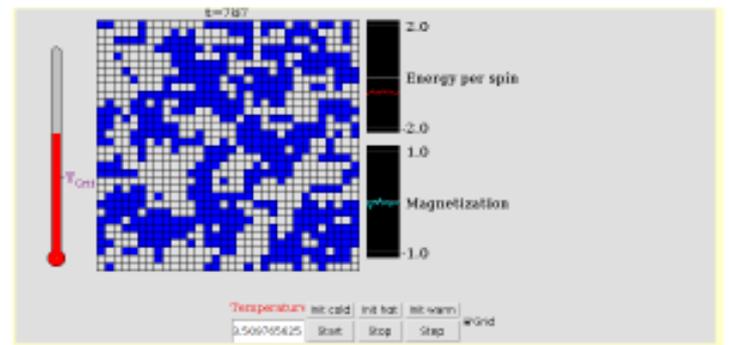
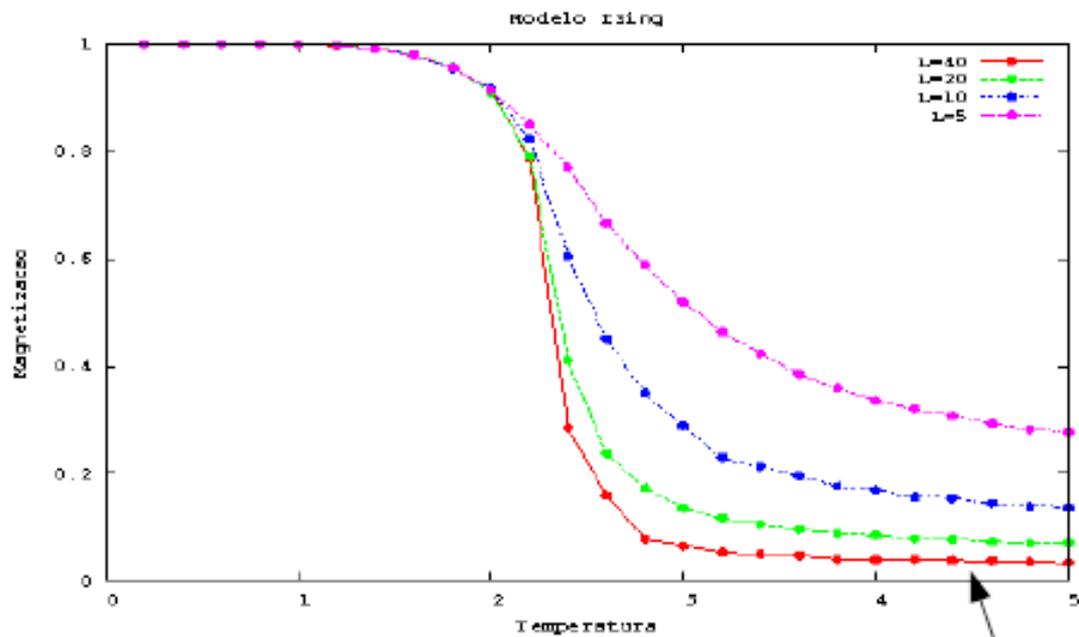
## •Observáveis Termodinâmicas e Magnéticas Medidas:

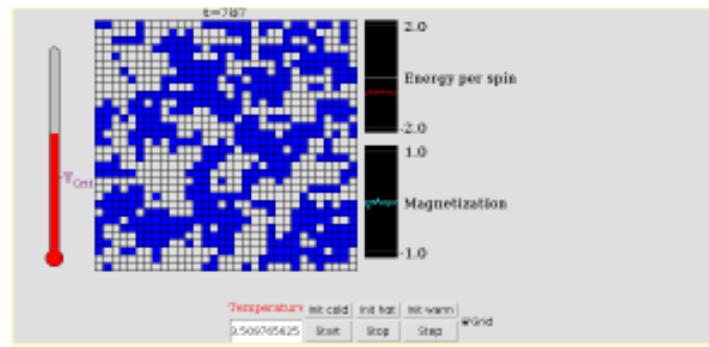
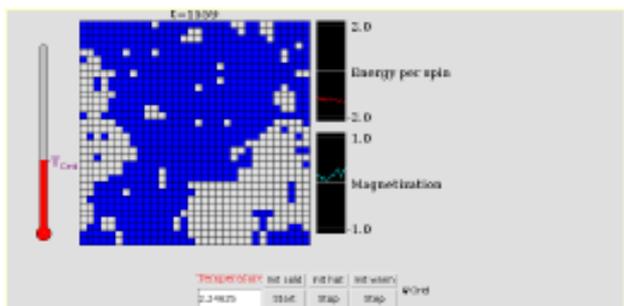
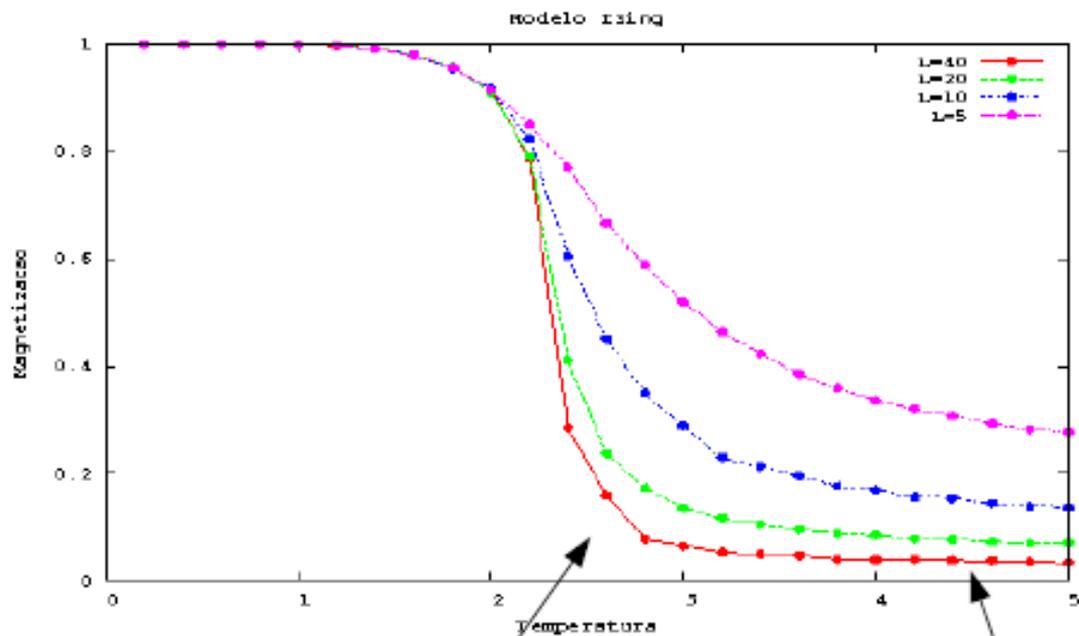
- Magnetização Média:  $M = \langle M(S_i) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i$

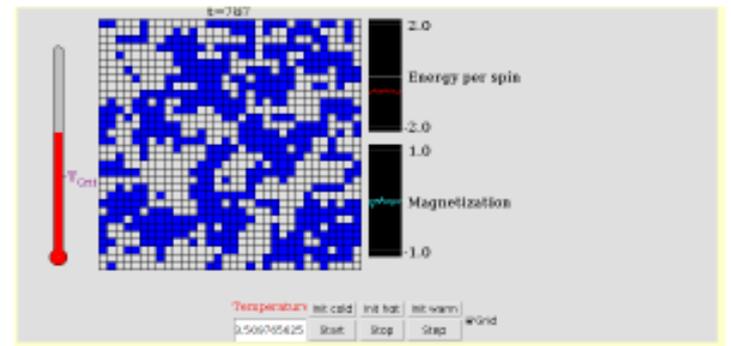
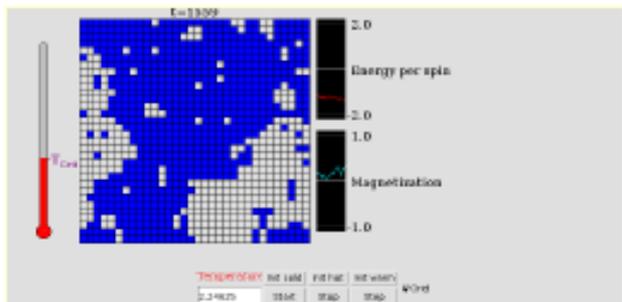
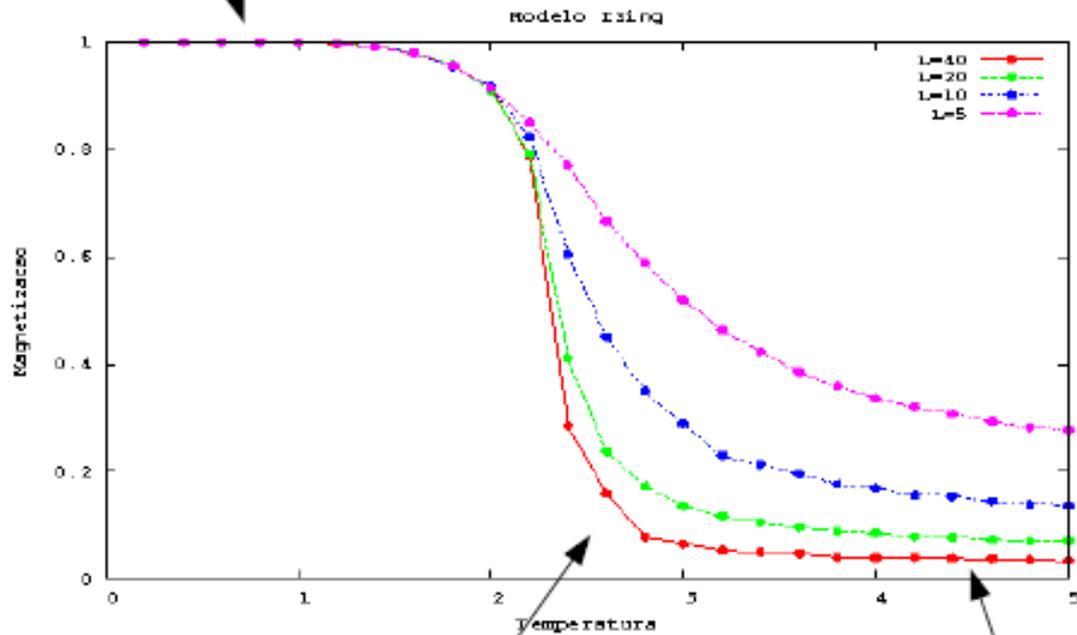
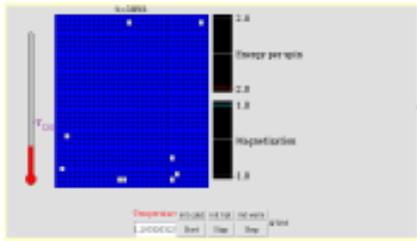
- Susceptibilidade Magnética:  $X = \frac{1}{T} \left\{ \langle [M(S_i)]^2 \rangle - \langle M(S_i) \rangle^2 \right\}$

- Energia Média:  $U = \langle E(S) \rangle = \frac{1}{N} \left( -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \right)$

- Capacidade Térmica:  $C = \frac{1}{T^2} \left\{ \langle [E(S)]^2 \rangle - \langle E(S) \rangle^2 \right\}$







# Parâmetro de Ordem e de Controle

**Parâmetro de controle** é uma variável termodinâmica que descreve a singularidade na energia livre no ponto Crítico

**Parâmetro de ordem** é uma grandeza termodinâmica que apresenta um valor não nulo para certa região dos valores do parâmetro de controle e nulo para a região complementar. é simplesmente uma quantidade que existe em uma fase (geralmente na fase de baixa temperatura) e desaparece na outra fase (a alta temperatura).

Exemplos:

**Parâmetro de controle** = Temperatura

**Parâmetro de ordem** = magnetização (ferromagnetos)  
= diferença de densidade (fluidos)

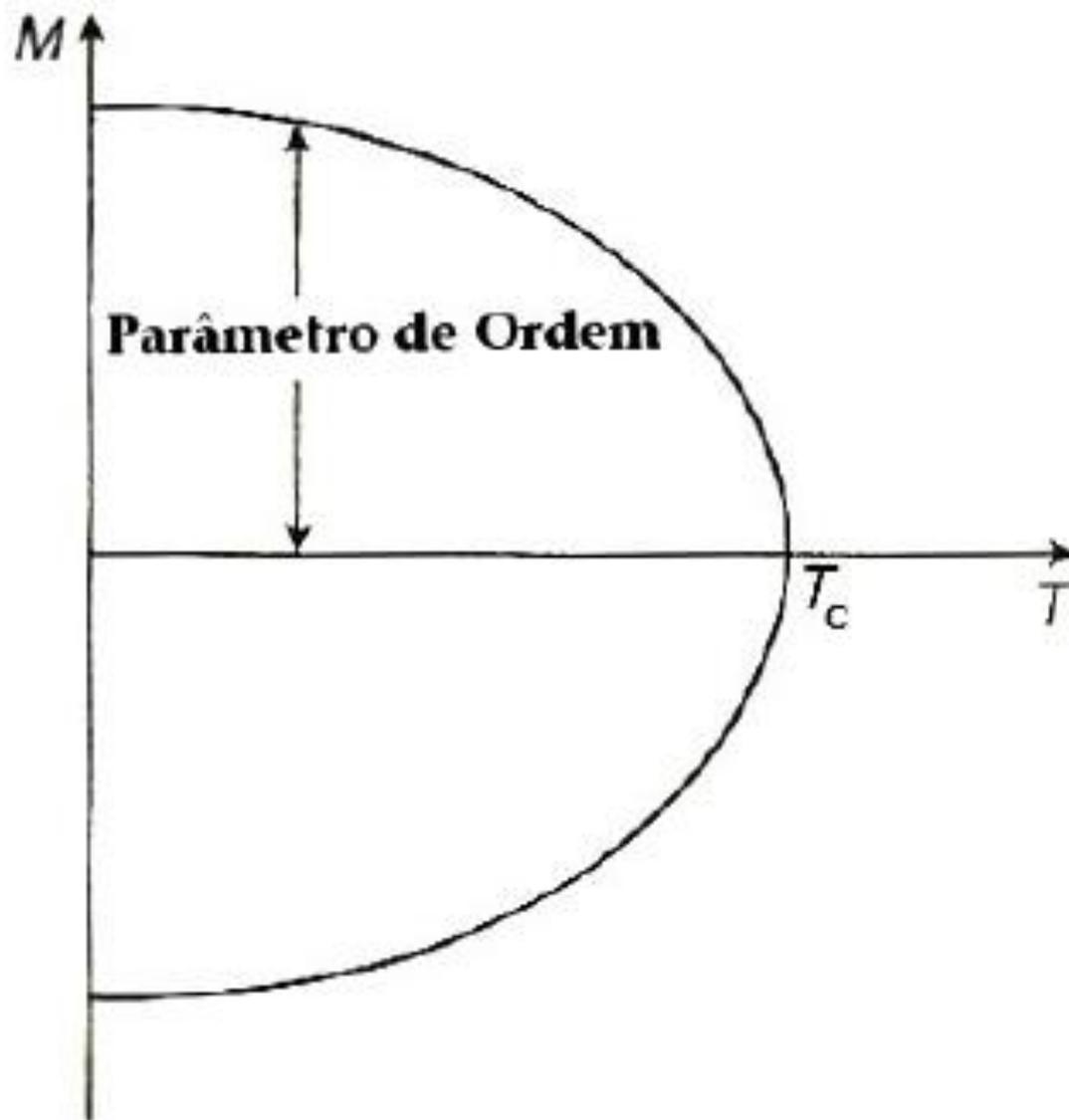


Figura 2.3: Magnetização a campo nulo de um ferromagneto simples.

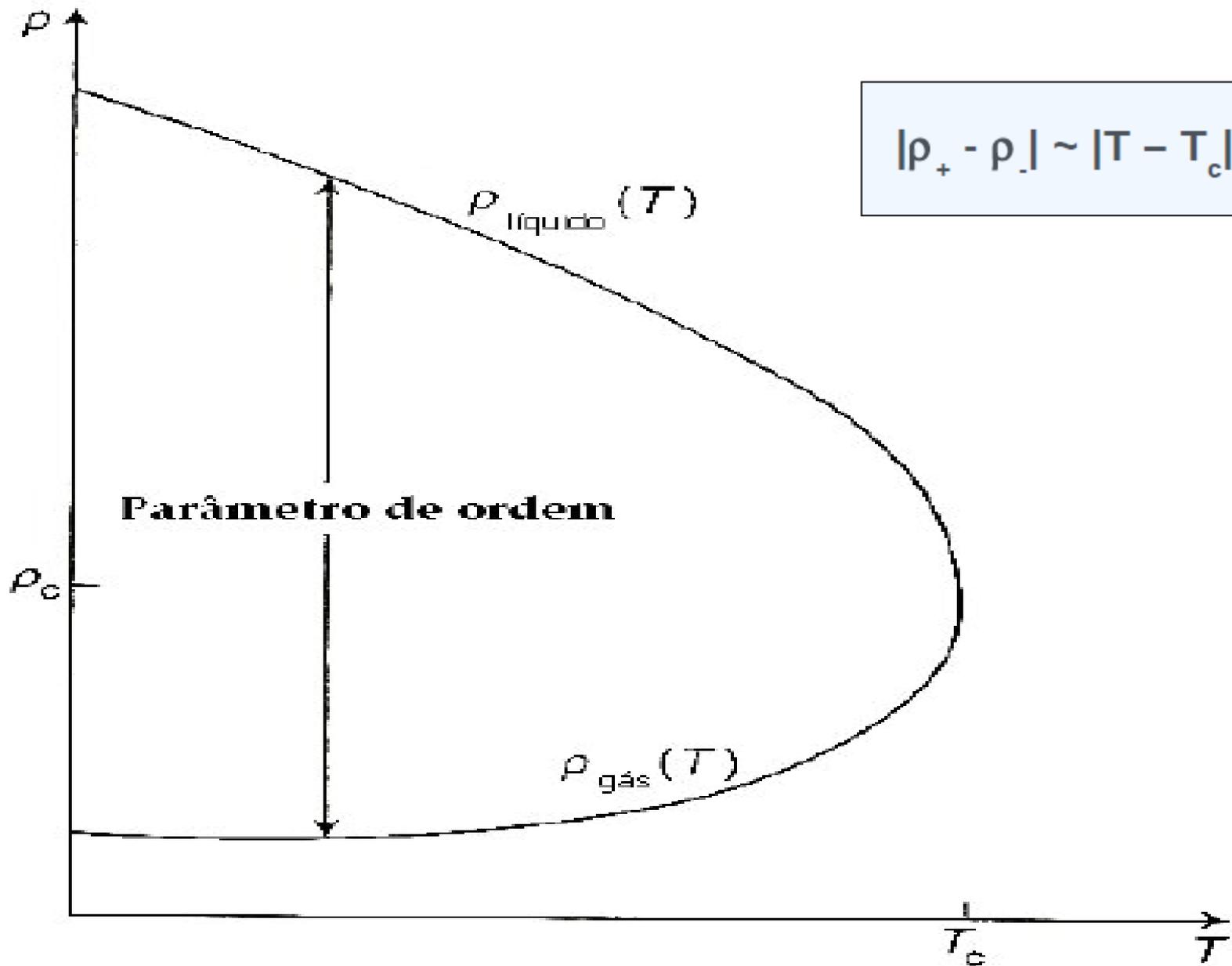


Figura 2.2: Linha de coexistência líquido-vapor.

A variância na energia (ou flutuação de energia) é

$$(\delta\langle E \rangle)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}.$$

Assim, o calor específico pode ser escrito como

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{1}{K_B T^2} (\delta\langle E \rangle)^2.$$

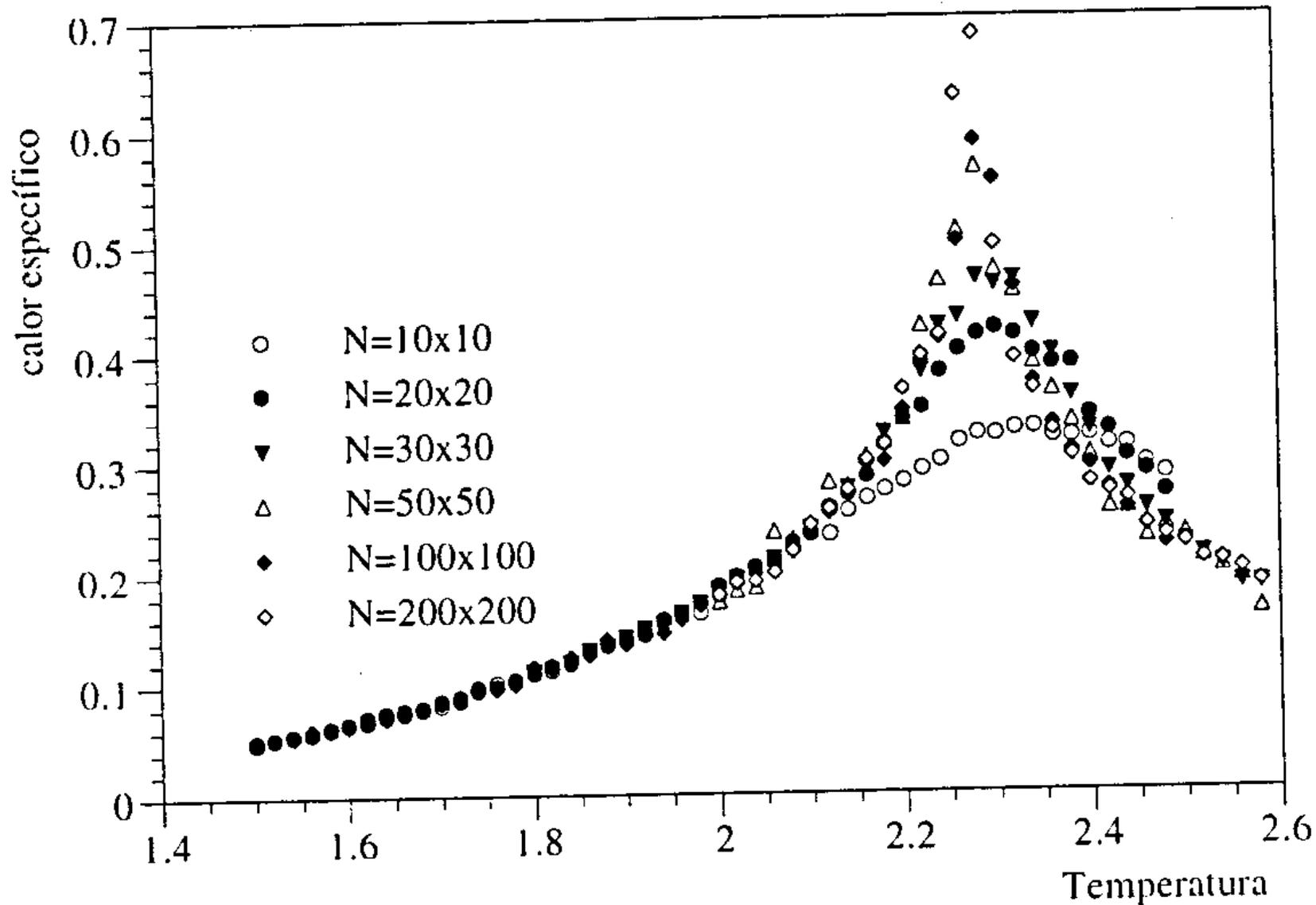


Figura 4.8: Calor específico por spin a duas dimensões.

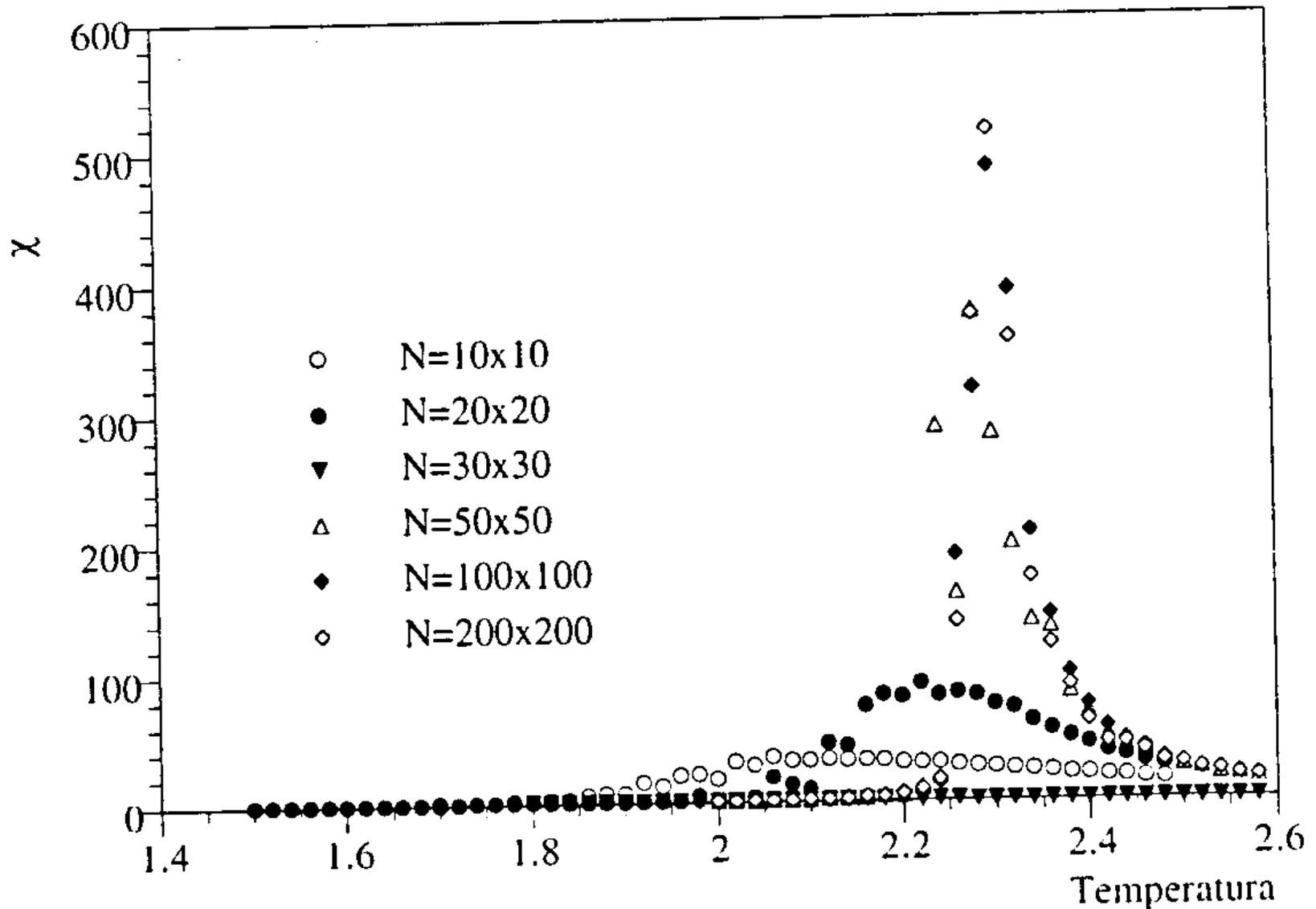
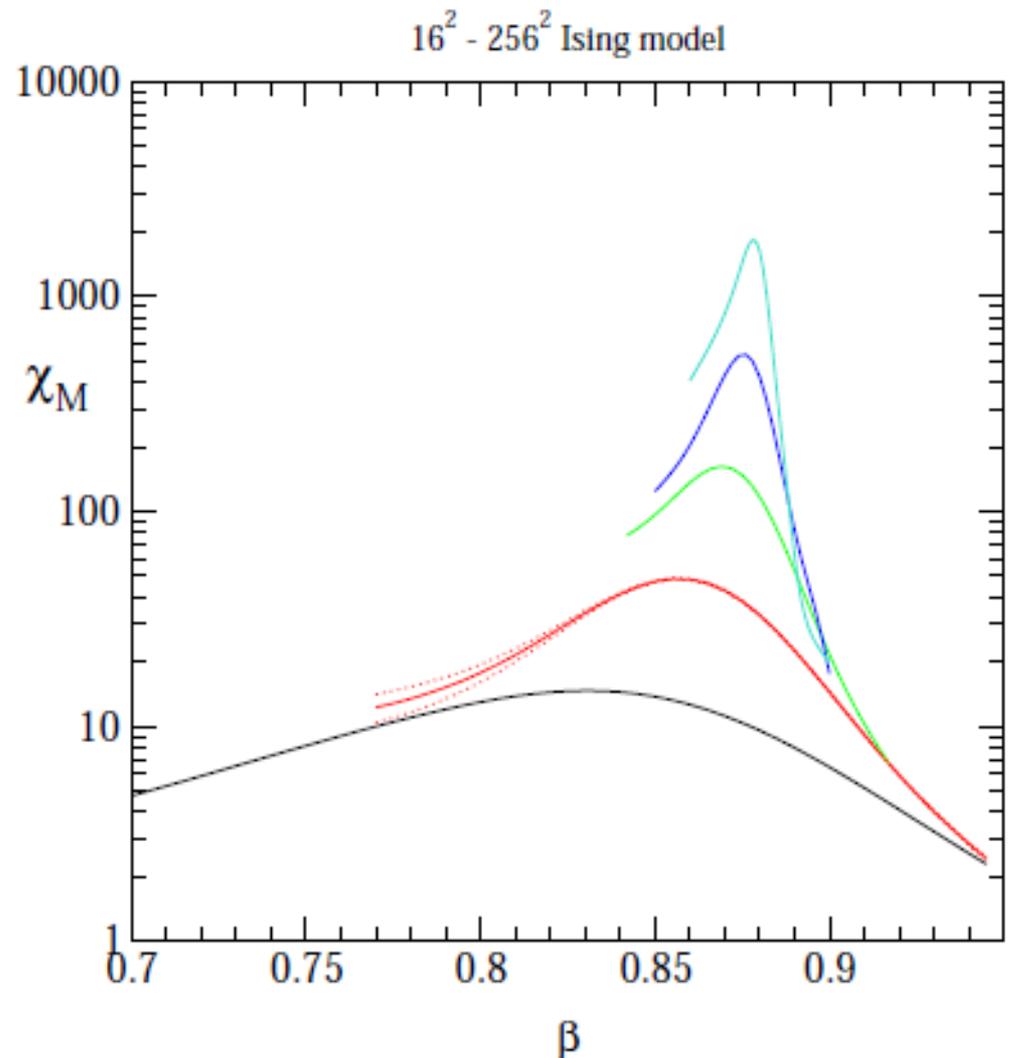


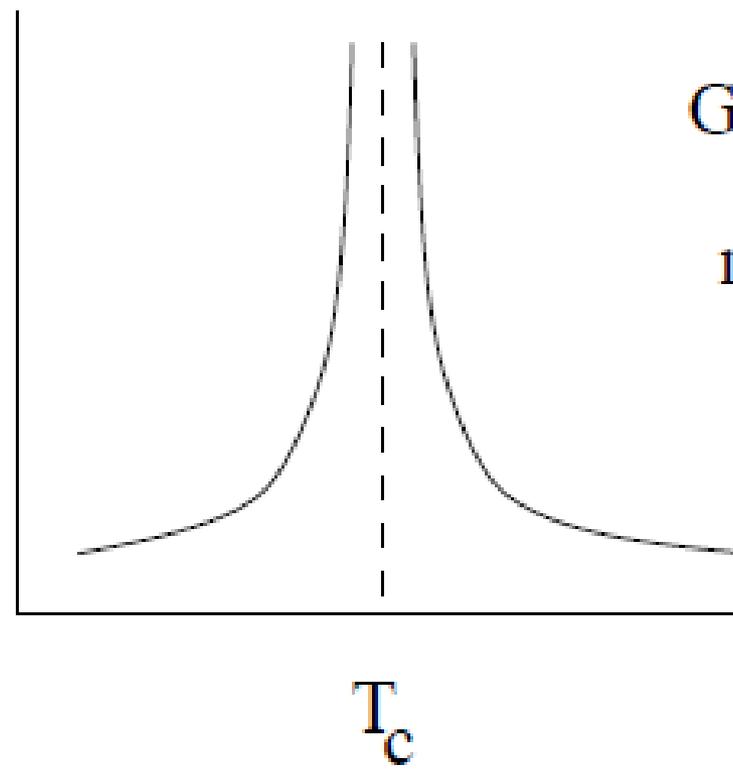
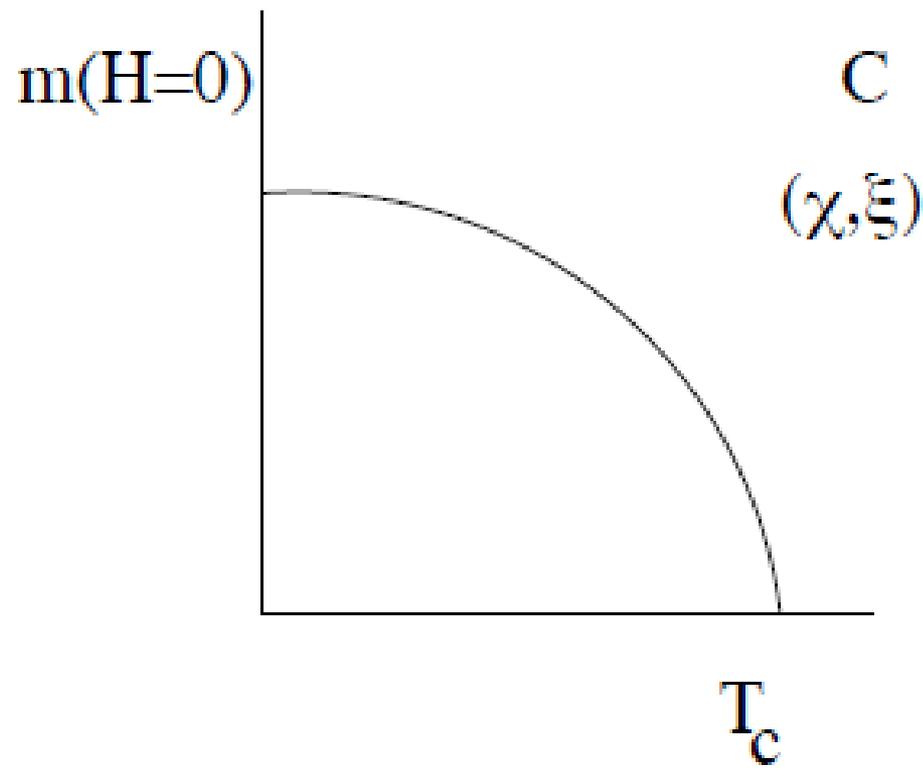
Figura 4.9: Susceptibilidade eléctrica para uma rede quadrada.

## Example: 2d Ising model

2d Ising model with volumes  $16^2$ ,  $32^2$ ,  $64^2$ ,  $128^2$  and  $256^2$ .  $\chi_{|M|}$  reweighted to a range of  $\beta$ -values around the critical point:

The peak of  $\chi_{|M|}$  clearly grows (like  $L^z$ , note log-scale) and the location moves to larger  $\beta$ .





# Fenômenos e expoentes Críticos

Comportamentos singulares das quantidades termodinâmicas são caracterizados pelos expoentes críticos e definem o que chamamos de fenômenos críticos. Sempre aparecem em transições de segunda ordem, associado a um ponto crítico no diagrama de fase do sistema.

- **Expoentes críticos**

No ponto crítico o sistema está fora do equilíbrio. Não existem propriedades determinísticas, pequenas variações no sistema podem levar a mudanças *catastróficas*.

# Fenômenos Críticos

Função de Correlação entre Spins distantes:

$$G(\mathbf{r}) = \langle [\mathbf{S}(\mathbf{r}) - \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle] \cdot [\mathbf{S}(\mathbf{0}) - \langle \mathbf{S}(\mathbf{0}) \rangle] \rangle,$$

onde  $\mathbf{r}$  denota a posição do spin.  $G(\mathbf{r})$  mede a correlação entre spins distantes e deve ser uma função decrescente Para  $\mathbf{r}$  suficientemente grande. Quando  $T \neq T_c$

$$G(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{\xi^{d-2}} \frac{e^{-r/\xi(T)}}{(r/\xi)^{(d-1)/2}} \quad (r \gg \xi).$$

$\xi(T)$  Chamado de **comprimento de correlação**, que determina A escala de decaimento de  $G(r)$  para longas distâncias

# Fenômenos Críticos

Spins separados por uma longa distância estarão Descorrelacionados? Para alta temperaturas sim, mas próxima temperatura crítica  $T=T_c$ , a **função de correlação** obedece a uma lei de potência:

Na vizinhança do ponto crítico, o comprimento de correlação é da forma

$$\xi(T) \sim \begin{cases} t^{-\nu}, & T > T_c, \\ t^{-\nu'}, & T < T_c. \end{cases}$$

Em  $T=T_c$  ele vai a infinito (para transições de segunda ordem).  $t$  é a temperatura reduzida  $(T-T_c)/T_c$

# Fenômenos Críticos

**M = magnetização do sistema**

$$M \sim (-t)^\beta, H = 0 \quad T < T_c$$

**C = Calor específico**

$$C \sim |t|^{-\alpha}, H = 0,$$

**$\chi$  = Susceptibilidade magnética**

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, H = 0,$$

## Classes de Universalidade

Dois sistemas diferentes pertencem a mesma classe de universalidade se tiverem os mesmos expoentes críticos ou seja Modelos que pertencem à mesma classe de universalidade compartilham o mesmo comportamento singular nas vizinhanças do ponto crítico, em particular, os valores dos chamados *expoentes críticos*

*Os expoentes críticos dependem da dimensão do sistema e da simetria do parâmetro de ordem e da simetria da interação. Não depende de muitos detalhes do sistemas e nem da forma e intensidade da interação*

# Statistical Mechanics of Driven Diffusive Systems

B. SCHMITTMANN AND R. K. P. ZIA



Vol 17 Phase Transitions and Critical Phenomena

Tian Ma - Shouhong Wang

# Phase Transition Dynamics

Springer

Malte Henkel  
Michel Peirling

Theoretical and Mathematical Physics

# Non-Equilibrium Phase Transitions

Volume 2  
Aging and Dynamical Scaling  
far from Equilibrium

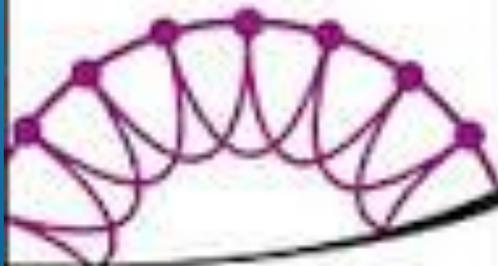
Springer

Wolfgang Gotman

# PHASE TRANSITIONS

Modern Applications

3rd Edition



World Scientific

New Studies in Architecture

# The Collapse of Complex Societies

JÜRGEN KRÄMER

