2021-1, "STATPHYS", AULA 24

OBJETIVOS: INTRODUZIR A TEORIA DE LANDAU E ESTUDAR A CADEIA 1D DE ISING

* TEORIA FENOMENOLÓGICA DE LANDAU

TODAS AS ABORDAGENS DE CAMPO MÉDIO PARA O MODELO DE ISING LEVARAM À EQUAÇÃO

$$\boxed{m = \tanh\left[\beta\left(H + qJm\right)\right]}$$

PARA A MAGNETIZAÇÃO POR PARTÍCULA m. OBTIVEMOS UMA ELUCIDATIVA ENERGIA LIVRE PELA TEORIA DE BRAGG-WILLIAMS, MAS PODERÍAMOS TER PARTIDO DA EQUAÇÃO ACIMA!

OBTIVEMOS

$$\boxed{f(m) = -k_B T \log 2 - H.m - [qJ - k_B T]\frac{m^2}{2} + \frac{k_B T}{12} m^4 + O(m^6)}\,,$$

MAS m DEVERIA SER VISTO COMO FUNÇÃO DE T E H. UM "NOME" MELHOR TERIA SIDO $g = g(T,H)$, PARA EXPRESSAR MELHOR A ANALOGIA C/ A ENERGIA LIVRE DE GIBBS DE UM FLUIDO, DEPENDENTE DE DOIS PARÂMETROS INTENSIVOS.

ABAIXO, $f \to g$ E f SERÁ OUTRA GRANDEZA!

SE $G = U - TS - HM \Leftrightarrow g = u - Ts - Hm$,

$dg = -s\,dT - m\,dH \Rightarrow \boxed{m(T,H) = -\left(\frac{\partial g}{\partial H}\right)_T}$,

DE MODO QUE INTEGRAR m EM RELA-

ÇÃO A H PODERIA LEVAR A g. PORÉM, O CARÁTER TRANSCENDENTAL DA EQ. DE CAMPO MÉDIO INVIABILIZA ESSE PROCEDIMENTO "DIRETO".

SEM PROBLEMAS: PODEMOS USAR OUTRO ENSEMBLE E DEPOIS REALIZAR UMA TRANSFORMAÇÃO DE LEGENDRE!!!

EM TERMOS DE T E m, $F = F(T, M)$,

$$F = U - TS \iff f = u - Ts$$

$$df = -s\,dT + H\,dm \Rightarrow \boxed{H = \left(\frac{\partial f}{\partial m}\right)_T}.$$

INTEGRAR H EM RELAÇÃO A m LEVA A f, E É FÁCIL! A EQ. DE CAMPO MÉDIO NÃO É TRANSCENDENTAL EM RELAÇÃO A H!!! DEPOIS DE OBTIDA f,

$$\boxed{g = f - Hm}.$$

$$m = \tanh\left[\beta\left[H + qJm\right]\right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \tanh^{-1} m = \beta(H + qJm) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow H = -qJm + k_B T \tanh^{-1} m$$

$$= -qJm + \cancel{k_B T}\, \frac{1}{2} \log\left(\frac{1+m}{1-m}\right)$$

$$= -qJm + k_B T \sum_{j=0}^{\infty} \frac{m^{2j+1}}{2j+1}$$

AULA 23

$$\Downarrow$$

$$\Rightarrow f(T,m) = \int dm\, H(T,m) =$$

$$= f_0(T) - \frac{qJm^2}{2} + k_B T \sum_{j=0}^{\infty} \frac{m^{2j+2}}{(2j+2)(2j+1)}$$

$$= f_0(T) - (qJ - k_B T)\frac{m^2}{2} + k_B T \frac{m^4}{12} + O(m^6).$$

COM $g(T,H) = f(T, m(T,H)) - H \cdot m(T,H)$, RECUPERAMOS A ENERGIA LIVRE DE BRAGG-WILLIAMS ($f_0(T)$ NÃO IMPORTA...).

UMA CONSTRUÇÃO ANÁLOGA PODE SER REALIZADA COM A EQ. DE VAN DER WALLS (VER [SALINAS] OU [GOLDENFELD]).

ISSO FEZ COM QUE LEV LANDAU POSTULASSE, NA DÉCADA DE 1930, QUE TRANSIÇÕES DE FASE CONTÍNUAS PODERIAM SER DESCRITAS POR UMA ENERGIA EXPRESSA COMO UMA SÉRIE DE POTÊNCIAS DE UM PARÂMETRO DE ORDEM (QUE DENOTAREMOS POR m) NULO NA CHAMADA FASE DESORDENADA DE MAIOR ENTROPIA/TEMPERATURA E NÃO NULO NA CHAMADA FASE ORDENADA. TIPICAMENTE, UMA TAL TRANSIÇÃO ORDEM-DESORDEM OCORRE QUANDO UM PARÂMETRO DE CONTROLE COMO A

TEMPERATURA É AJUSTADO PARA PASSAR POR UM VALOR CRÍTICO (ENTRANDO OU SAINDO DE UMA CURVA DE COEXISTÊNCIA POR UM PONTO CRÍTICO, EM UM DIAGRAMA DE FASES). MAIS PRECISAMENTE, SE O HAMILTONIANO DO SISTEMA FOR

$$\boxed{-\frac{H}{k_B T} = \sum_n K_n \sigma_n},$$

ONDE OS K_n's SÃO AS CONSTANTES DE ACOPLAMENTO (COMBINAÇÕES DE PARÂMETROS COMO $H, T, J, \ldots$) E OS σ_n's SÃO OS OPERADORES LOCAIS (COMBINAÇÕES DOS GRAUS DE LIBERDADE DO SISTEMA, SOMADOS NA FUNÇÃO PARTIÇÃO, COMO OS SPINS), A DENSIDADE DE ENERGIA LIVRE DE LANDAU É

$$\boxed{\mathcal{L} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n([K]).m^n}$$

E, EMBORA O PRÓPRIO PARÂMETRO DE ORDEM m DEPENDA DE [K], O MÍNIMO GLOBAL DE $\mathcal{R}$ INDICARIA O ESTADO DE EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO DO SISTEMA.

ESSE FORMALISMO É ÚTIL. ELE PODE SER ADAPTADO PARA DESCREVER FENOMENOLOGICAMENTE TRANSIÇÕES DE 1ª ORDEM, APESAR DE m FICAR DESCONTÍNUO NA TRANSIÇÃO (VER [GOLDENFELD] E [PLISCHKE-BERGERSEN]). A TEORIA PODE SER GENERALIZADA PARA SISTEMAS HETEROGÊNEOS COM O FORMALISMO DE LANDAU-GINZBURG PARA $m = m(\vec{r})$, UMA TEORIA EFETIVA DE CAMPOS (ALÉM DAS REFS. LOGO ACIMA, VER TAMBÉM [GOULD-TOBOCHNIK]). MAS ESPECIALMENTE ESTE CASO HETE-

ROGÊNEO REVELA CLARAMENTE (SEÇÃO 5.6 DE [GOLDENFELD]) QUE $\mathcal{L}$ NÃO É A ENERGIA LIVRE MAS SIM UMA ENERGIA "ENGROSSADA" (COARSE-GRAINED) QUE NUNCA PODERIA DESCREVER PERFEITAMENTE AS FORTES FLUTUAÇÕES NA VIZINHANÇA DE UM PONTO CRÍTICO, O QUE SE MANIFESTA NA FAMÍLIA DE EXPOENTES CRÍTICOS DA TEORIA.

* EXPOENTES CRÍTICOS

AS SINGULARIDADES EMPIRICAMENTE OBSERVADAS NO COMPORTAMENTO DE CERTAS GRANDEZAS DE UM SISTEMA PRÓXIMO DA CRITICALIDADE SÃO DESCRITAS POR LEIS DE POTÊNCIAS, COM EXPOENTES CARACTERÍSTICOS.

SEJA

$$\boxed{t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}}$$

A TEMPERATURA REDUZIDA DO SISTEMA, SE T_c FOR SUA TEMPERATURA CRÍTICA. VAMOS USAR UMA "NOTAÇÃO DE ISING", MAS O CONCEITO É GERAL, ALÉM DO CAMPO MÉDIO! $m(T,H) \longrightarrow m(t,H)$

(i) EXPOENTE β

$$m(t, H=0) \sim B.(-t)^{\beta} \quad , \quad t \to 0^-$$

(ii) EXPOENTE γ (SUSCEPTIBILIDADE)

$$\frac{\partial m}{\partial H}(t, H=0) \sim \begin{cases} C.t^{-\gamma} & , \ t \to 0^+ \\ C'.(-t)^{-\gamma'} & , \ t \to 0^- \end{cases}$$

(iii) EXPOENTE α (CALOR ESPECÍFICO)

$$C_H(t, H=0) \sim \begin{cases} A.t^{-\alpha} & , \ t \to 0^+ \\ A'(-t)^{-\alpha'} & , \ t \to 0^- \end{cases}$$

(iv) EXPOENTE δ

$$m(t=0, H) \sim H^{1/\delta}, \quad H \to 0$$

- EXPOENTES CLÁSSICOS (LANDAU, CAMPO MÉDIO)

$$\beta = \frac{1}{2}; \quad \alpha = \alpha' = 0; \quad \gamma = \gamma' = 1; \quad \delta = 3$$

- EXPERIMENTOS (MAGNETOS)

$$0{,}3 \leq \beta \leq 0{,}36; \quad 0 \leq \alpha, \alpha' \leq 0{,}2; \quad 4{,}2 \leq \delta \leq 4{,}8$$

$$1{,}2 \leq \gamma \leq 1{,}4; \quad 1{,}0 \leq \gamma' \leq 1{,}2$$

- HÁ OUTROS EXPOENTES CRÍTICOS, DE OUTRAS GRANDEZAS.

- É ASSINTÓTICO! POR EXEMPLO,

$$m(t, H=0) = B.(-t)^{\beta}\left[1 + (-t)^{z_1} + \dots\right], \quad z_1 > 0,$$

E $\displaystyle \beta \equiv \lim_{t \to 0^-} \frac{\log m(t, H=0)}{\log(-t)}$.

LANDAU: $\mathcal{L} = -Hm + atm^2 + \frac{b}{2}m^4$

* ISING 1D

$$\sum_{\langle i,j\rangle} s_i . s_j \rightsquigarrow \sum_{i=1}^{N} s_i . s_{i+1}$$

$\boxed{s_{N+1} = s_1, \text{ ANEL! CONDIÇÕES PERIÓDICAS DE CONTORNO}}$

H=0

$$Z = \sum_{\vec{s}} e^{-\beta(-J)\sum_i s_i . s_{i+1}} =$$

$$= \sum_{\vec{s}} \prod_i e^{\beta J s_i s_{i+1}}$$

→ ELEMENTO DE MATRIZ 2x2, POIS $s_i \in \{-1,+1\}$

MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

$$T = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} s_{i+1}=+1 & s_{i+1}=-1 \end{array} \\ \begin{array}{c} s_i=+1 \\ s_i=-1 \end{array} & \begin{pmatrix} e^{+\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{+\beta J} \end{pmatrix} \end{array}$$

$$Z = \sum_{\vec{s}} \prod_i T_{s_i, s_{i+1}} = \sum_{\vec{s}} T_{s_1 s_2} . T_{s_2 s_3} \dots T_{s_N s_1} =$$

$$= \sum_{s_1} \dots \sum_{s_{N-1}} T_{s_1 s_2} \dots T_{s_{N-2} s_{N-1}} \left[\sum_{s_N} T_{s_{N-1} s_N} . T_{s_N s_1} \right]$$

$$A = B.C \iff A_{ij} = \sum_k B_{ik} C_{kj}$$

ENTÃO

$$Z = \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_{N-1}} T_{s_1 s_2} \cdots \underbrace{T_{s_{N-2} s_{N-1}} (T^2)_{s_{N-1} s_1}} =$$

$$= \cdots = \sum_{s_1} (T^N)_{s_1 s_1} = \mathrm{Tr}\, T^N .$$

MAS T É SIMÉTRICA, E DIAGONALIZÁVEL! A MATRIZ M CUJAS COLUNAS SÃO OS AUTOVETORES DE T É TAL QUE

$$\boxed{M^{-1} T M = D},$$

COM D DIAGONAL.

$$M^{-1} T M = D \Rightarrow T = M D M^{-1} \Rightarrow \boxed{T^N = M D^N . M^{-1}}$$

$$Z = \mathrm{Tr}\, T^N = \mathrm{Tr}\,(M D^N M^{-1}) = \mathrm{Tr}\,(\overbrace{M^{-1} M}^{= I} D^N)$$

$$\therefore \boxed{Z = \mathrm{Tr}\, D^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N},$$

ONDE λ_1 E λ_2 SÃO OS AUTOVALORES DE T,

COLUNAS

$$\boxed{T u_i = \lambda_i u_i} \, , \qquad M = (u_1 \;\; u_2) \, .$$

$$0 = \begin{vmatrix} e^{\beta J} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} - \lambda \end{vmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lambda^2 - 2e^{\beta J} . \lambda + (e^{+2\beta J} - e^{-2\beta J}) = 0$$

$$\therefore \begin{cases} \lambda_+ = 2 \cosh \beta J \\ \lambda_- = 2 \sinh \beta J \end{cases}$$

O QUE MUDA COM $H \neq 0$? QUASE NADA, DESDE QUE O TRUQUE

$$\sum_i S_i = \frac{1}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1})$$

SEJA USADO PARA OBTERMOS A SIMÉTRICA

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} \end{pmatrix} .$$

AGORA, A EQ. CARACTERÍSTICA É

$$0 = \lambda^2 - \left(e^{\beta J + \beta H} + e^{\beta J - \beta H}\right)\lambda + \left(e^{+2\beta J} - e^{-2\beta J}\right)$$

E

$$\boxed{\lambda_{\pm} = e^{\beta J}\left\{\cosh \beta H \pm \sqrt{\cosh^2 \beta H - 1 + e^{-4\beta J}}\right\}}.$$

MAS $\lambda_+ > \lambda_-$ E

$$F = -k_B T \log Z = -k_B T \log\left(\lambda_+^N + \lambda_-^N\right) =$$

$$= -k_B T \log\left[\lambda_+^N\left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)\right] =$$

$$= -k_B T \log \lambda_+^N - k_B T \log\left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{f = \lim_{N \to \infty} \frac{F}{N} = -k_B T \log \lambda_+}$$