2021-1, "STATPHYS", AULA 23

OBJETIVOS: DISCUTIR OS ASPECTOS MAIS SIMPLES DO MODELO DE ISING, SOB CAMPO MÉDIO.

* ISING E CAMPO MÉDIO

AGORA QUE TEMOS AS NOÇÕES BÁSICAS SOBRE A FENOMENOLOGIA DE TRANSIÇÕES DE FASE, PRECISAMOS DE MODELOS MICROSCÓPICOS QUE EXPRESSEM ESSA FENOMENOLOGIA NO DOMÍNIO TERMODINÂMICO. TAIS MODELOS PRECISAM INCORPORAR EFEITOS COLETIVOS (INTERAÇÕES) ENTRE SUAS UNIDADES ELEMENTARES.

VER p. 1-5 DA AULA 12 DE 2020!

$$\boxed{\mathcal{H}(\vec{S}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i . S_j - H \underbrace{\sum_{i=1}^{N} S_i}_{\equiv M(\vec{S})}}$$

EM TERMOS DAS GRANDEZAS INTENSIVAS T E H, A FUNÇÃO PARTIÇÃO PERTINENTE É

$$\boxed{Z(T,H) = \sum_{\vec{s}} e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{s}) + \beta . H . M(\vec{s})}},$$

QUE NÃO PODE SER CALCULADA EM GERAL (QUALQUER REDE OU DIMENSÃO).

MAS HÁ UMA FAMÍLIA DE TEORIAS APROXIMADAS, AS <u>TEORIAS DE CAMPO MÉDIO</u>, QUE FORNECEM ALGUMA INFORMAÇÃO EM CASOS DE MAIOR INTERESSE FÍSICO (DIMENSÃO ESPACIAL DE 2 A 4, INTERAÇÕES DE CURTO ALCANCE) E SÃO EXATAS EM ALTAS DIMENSÕES E PARA INTERAÇÕES DE ALCANCE INFINITO.

→ PARAMAGNETISMO ($J=0$)

É O "GÁS IDEAL" DO MAGNETISMO!

$$Z_{PARA} = \sum_{\vec{S}} e^{-\beta\left[-H\sum_i S_i\right]} =$$

$$= \sum_{\vec{S}} \prod_i e^{\beta H S_i} = \prod_i \left\{ \sum_{S\in\{-1,+1\}} e^{\beta H S} \right\}$$

$$\therefore \boxed{Z_{PARA} = \left[2\cosh \beta H\right]^N}$$

$$\begin{cases} dF = -S\,dT - M\,dH \\ F = -k_B T \log Z_{PARA} \end{cases} \Rightarrow M = \frac{k_B T}{Z_{PARA}} \cdot \frac{\partial}{\partial H}(Z_{PARA}) =$$

$$= \frac{k_B T}{\left[2\cosh\beta H\right]^N} N\left[2\cosh\beta H\right]^{N-1} \cdot 2\beta \sinh \beta H$$

$$\therefore \boxed{M = N \cdot \tanh \beta H}$$

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$\tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x}$$

$$(\cosh x)' = \sinh x$$

m: MAGNETIZAÇÃO POR PARTÍCULA

$$m \equiv \frac{M}{N}$$

$$\boxed{m = \tanh \beta H}$$

→ CAMPO MOLECULAR DE WEISS

O CAMPO MAGNÉTICO EFETIVO SOBRE CADA PARTÍCULA SERIA UMA SUPERPOSIÇÃO DO CAMPO EXTERNO COM O EFEITO MÉDIO DE TODOS OS VIZINHOS <u>PRÓXIMOS</u>.

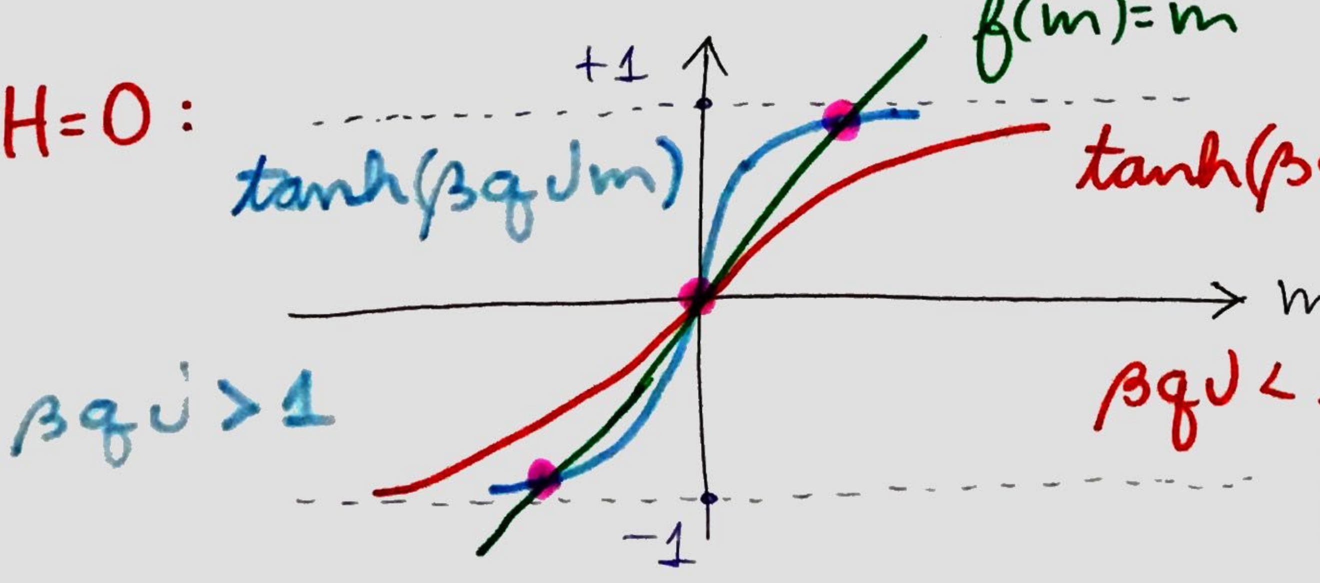
q: NÚMERO DE COORDENAÇÃO DA REDE (# DE VIZINHOS) $\boxed{q = 2d \text{ EM } \mathbb{R}^d}$

$H \to H + mqJ$

$$\boxed{m = \tanh[\beta(H + mqJ)]}$$

$$[\tanh(\alpha x)]' = \frac{4\alpha}{(e^{\alpha x} + e^{-\alpha x})^2} \leq \alpha$$

H=0:



ISSO SUGERE UMA TEMPERATURA CRÍTICA $\boxed{T_c = \frac{1}{k_B \beta_c}}$, COM $\boxed{\beta_c q J = 1}$,

$$\boxed{T_c = \frac{qJ}{k_B}}, \text{ (CAMPO MÉDIO)}$$

EM QUALQUER DIMENSÃO. A CONCORDÂNCIA É RAZOÁVEL PARA $d>2$, MAS O MODELO DE ISING NÃO ADMITE TRANSIÇÃO DE FASE CRÍTICA EM $d=1$.

POR QUE SURGIU ESSE GRAVE ERRO QUALITATIVO? SE A "PRESCRIÇÃO DE WEISS" FOSSE "RASTREADA RETROATIVAMENTE" ATÉ O HAMILTONIANO, DETECTARÍAMOS UM NEGLIGENCIAMENTO DE FLUTUAÇÕES ATÉ MAIS RELEVANTE DO QUE A PRIMEIRA VISTA SUGERE. VIZINHANÇAS DE PONTOS CRÍTICOS SÃO REGIÕES DO ESPAÇO DE PARÂMETROS ONDE O LIMITE

TERMODINÂMICO AINDA É RELEVANTE, MAS DE FORMA DISTINTA DO USUAL: AS FLUTUAÇÕES NÃO SÃO MAIS SUPRIMIDAS E SÃO DETERMINANTES DA NATUREZA DA TRANSIÇÃO DE FASE.

CADA SPIN s_i DA REDE É UMA VARIÁVEL ALEATÓRIA QUE ~~TOMA~~ REALIZA VALORES EM $\{-1,+1\}$ COM PROBABILIDADES DEPENDENTES DE T, H E DOS ESTADOS DOS VIZINHOS. SE TODOS OS SPINS FOREM EQUIVALENTES (CONDIÇÕES PERIÓDICAS DE CONTORNO),

$$\boxed{s_i = m + \delta s_i}$$

VALOR MÉDIO

V.A. DE MÉDIA NULA

E A V.A. ENERGIA $\mathcal{H}(\vec{s})$ PODE SER VISTA COMO FUNÇÃO DESSES "DESVIOS",

$\mathcal{H} \to \mathcal{H}(\vec{\delta s})$, E CONTÉM TERMOS

COMO $\delta S_i \cdot \delta S_j$, PRODUTO DE V.A.'S.
A EQ. DE CAMPO MÉDIO SURGE SE TAIS TERMOS FOREM OMITIDOS!

ANTES DE DISCUTIRMOS A ESTABILIDADE DAS RAÍZES DA EQ. DE CAMPO MÉDIO QUANDO $H=0$, ANALISEMOS A VIZINHANÇA DE $m=0$.

$$\boxed{|x| \ll 1 : \tanh x \approx x - x^3/3}$$

$$m = \tanh(\beta q J m) \longrightarrow m = \beta q J m - \frac{1}{3}(\beta q J m)^3$$

$m=0$ É RAIZ ÚNICA SE $\beta q J < 1$.

SE $\beta q J > 1$, AS DUAS OUTRAS SEGUEM

$$m^2 = 3\,\frac{\beta q J - 1}{(\beta q J)^3} = 3\,\frac{\frac{\beta}{\beta_c} - 1}{\left(\frac{\beta}{\beta_c}\right)^3} = 3\left(\frac{T}{T_c}\right)^3\left(\frac{T_c}{T} - 1\right) =$$

$$= 3\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \cdot \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

EXPOENTE CRÍTICO DE CAMPO MÉDIO

$$\therefore \quad m \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}, \quad T \to T_c^-.$$

→ MÉTODO VARIACIONAL DE BRAGG-WILLIAMS

IDEIA: ESCREVER DIRETAMENTE UMA ENERGIA LIVRE $F(\vec{s}) = \mathcal{H}(\vec{s}) - T.S(\vec{s})$ ONDE A ENTROPIA $S(\vec{s})$ SERÁ EXATA, MAS, POR NECESSIDADE, A ENERGIA SERÁ APROXIMADA.

NOVAS VARIÁVEIS:

N_+ : # SPINS UP

N_- : # SPINS DOWN

N_{++} : # ARESTAS ↑↑

N_{--} : # ARESTAS ↓↓

N_{+-} : # ARESTAS ↑↓

$$\mathcal{H}(\vec{s}) \downarrow \mathcal{H}(\text{"}\vec{N}\text{"})$$

$$\mathcal{H}(\vec{s}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i . s_j - H \sum_i s_i$$

$$\downarrow$$

$$\mathcal{H} = -J(N_{++} + N_{--} - N_{+-}) - H(N_+ - N_-)$$

RELAÇÕES EXATAS:

$$\boxed{N_{++} + N_{--} + N_{+-} = \frac{qN}{2}}$$

$$\boxed{N_+ + N_- = N}$$

CAMPO MÉDIO:

PROB. VIZINHO "UP"

$$N_{++} = \underbrace{\left(q \frac{N_+}{N}\right)}_{\text{\# MÉDIO DE VIZINHOS "UP"}} \cdot N_+ \cdot \frac{1}{2}$$

$$\boxed{N_{++} = \frac{q N_+^2}{2N}}$$

$$\boxed{N_{--} = \frac{q N_-^2}{2N}}$$

$$\boxed{N_{+-} = \frac{q N_+ N_-}{N} = \frac{q\, 2N_+N_-}{2N}}$$

ENTROPIA? SHANNON!

$$\boxed{S = N \cdot s = -N k_B \left\{ \frac{N_+}{N} \log \frac{N_+}{N} + \frac{N_-}{N} \log \frac{N_-}{N} \right\}}$$

ORA, MAS $\begin{cases} N_+ + N_- = N \\ N_+ - N_- = M = N \cdot m \end{cases} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{cases} N_+/N = (1+m)/2 \\ N_-/N = (1-m)/2 \end{cases}}$$

E $\mathcal{H}(\text{"}\vec{N}\text{"}) \to \mathcal{H}(m)$!

$$N_{++} + N_{--} - N_{+-} = \frac{q}{2N}\left(N_+^2 + N_-^2 - 2N_+N_-\right) = \frac{qN}{2} m^2$$

$$\mathcal{H}(m) = -\frac{qJN}{2}m^2 - H.N.m$$

$$S(m) = -NK_B\left\{\frac{1+m}{2}\log\left(\frac{1+m}{2}\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{1-m}{2}\log\left(\frac{1-m}{2}\right)\right\}$$

$$F(m) = \mathcal{H}(m) - T.S(m) \; ; \quad f \equiv \frac{F}{N}$$

$$0 = \frac{\partial f}{\partial m} \Rightarrow 0 = -qJm - H + K_BT.\left\{\frac{1}{2}\log\left(\frac{1+m}{2}\right) + \frac{1}{2} - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{2}\log\left(\frac{1-m}{2}\right) - \frac{1}{2}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta(qJm + H) = \frac{1}{2}\log\left(\frac{1+m}{1-m}\right) = \tanh^{-1} m}$$

OBTIVEMOS A MESMA EQ. DE CAMPO MÉDIO, MESMAS RAÍZES E MESMOS EXPOENTES CRÍTICOS (SÓ VIMOS UM).

EXPANDINDO $f(m)$ EM TORNO DE $m=0$:

$$f(m) = -\frac{qJm^2}{2} - H.m + K_BT\left\{\frac{1}{2}\log\left(\frac{1-m^2}{4}\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{m}{2}\log\left(\frac{1+m}{1-m}\right)\right\} =$$

$$-\log(1-x) = x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots$$
$$\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots$$

$$= -k_B T \log 2 - Hm - \frac{qJ}{2} m^2 +$$
$$+ k_B T \left\{ \left[-\frac{1}{2}\left(m^2 + \frac{m^4}{2} + \dots \right) \right] + \right.$$
$$\left. + \left[\frac{m}{2}\, 2 \left(m + \frac{m^3}{3} + \dots \right) \right] \right\}$$

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

QUANDO $H=0$, $f(-m) = f(m)$ E $m=0$ É UM MÁXIMO (MÍNIMO) LOCAL QUANDO $T < T_c = \frac{qJ}{k_B}$ ($T > T_c$).