

2020-1, "STATPHYS", AULA 12

OBJETIVO: APRESENTAR O MODELO DE ISING E MOTIVAR O ALGORITMO DE METROPOLIS

ONDE ESTAMOS: 2.2 CMTD'S

* MODELO DE ISING

→ É UM MODELO SIMPLES ("TOY MODEL") PARA DESCREVER FERROMAGNETISMO.

→ MAIS ABSTRATAMENTE, É UM MODELO PARA SISTEMAS DE UNIDADES DISTRIBUÍDAS ESPACIALMENTE, COM INTERAÇÕES DE CURTO ALCANCE.


→ MODELO DE REDE ("LATTICE MODEL")

→ DESCREVE UMA "COMPETIÇÃO" ENTRE ORDEM E DESORDEM (ENERGIA VS. ENTROPIA)

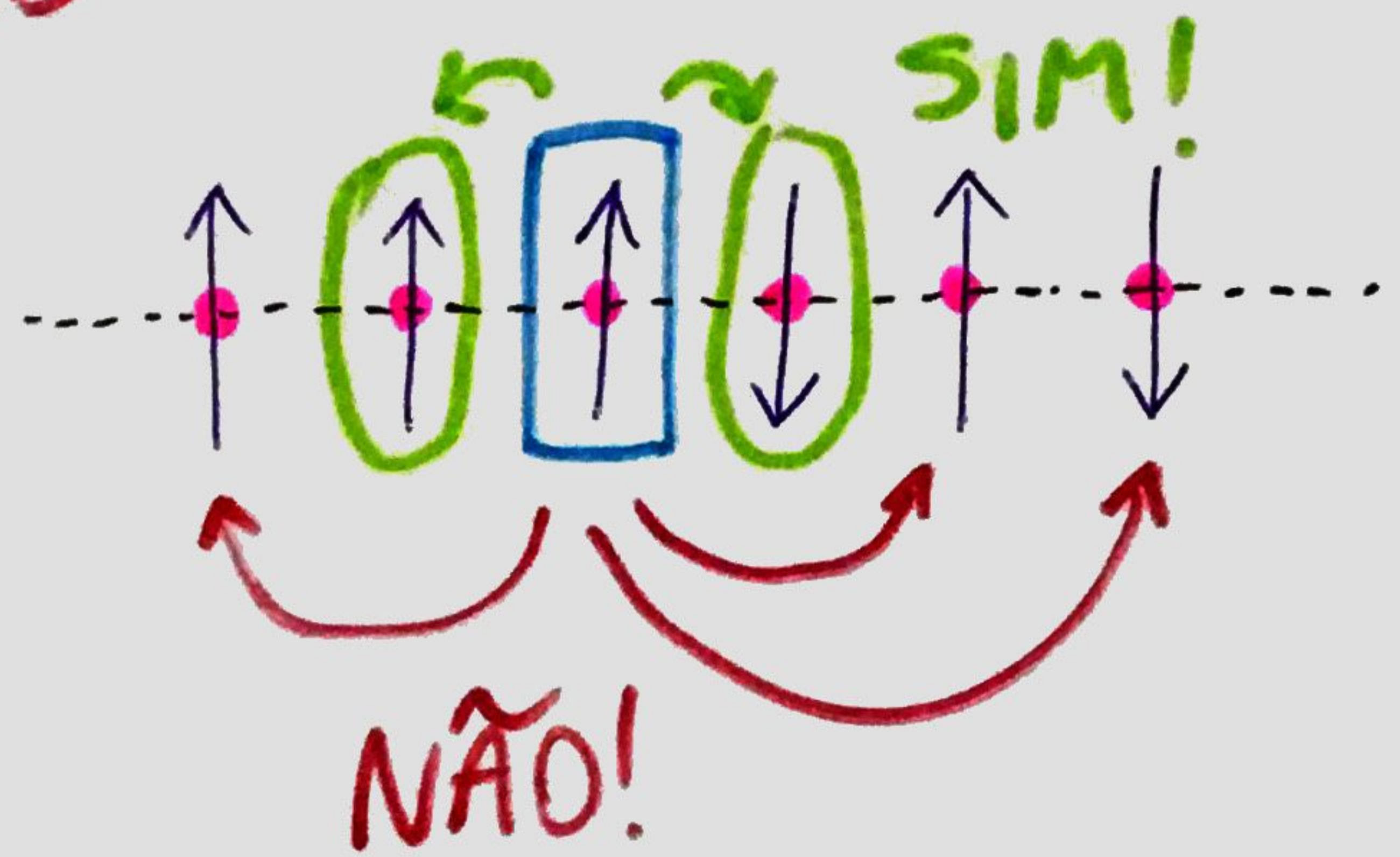
↳ TRANSIÇÃO DE FASE!

12-1

→ DIPOLOS MAGNÉTICOS CLÁSSICOS (MAS CHAMAREMOS DE "SPIN"!) E "DISCRETIZADOS":

REDE 1D: 

SPINS NA REDE:

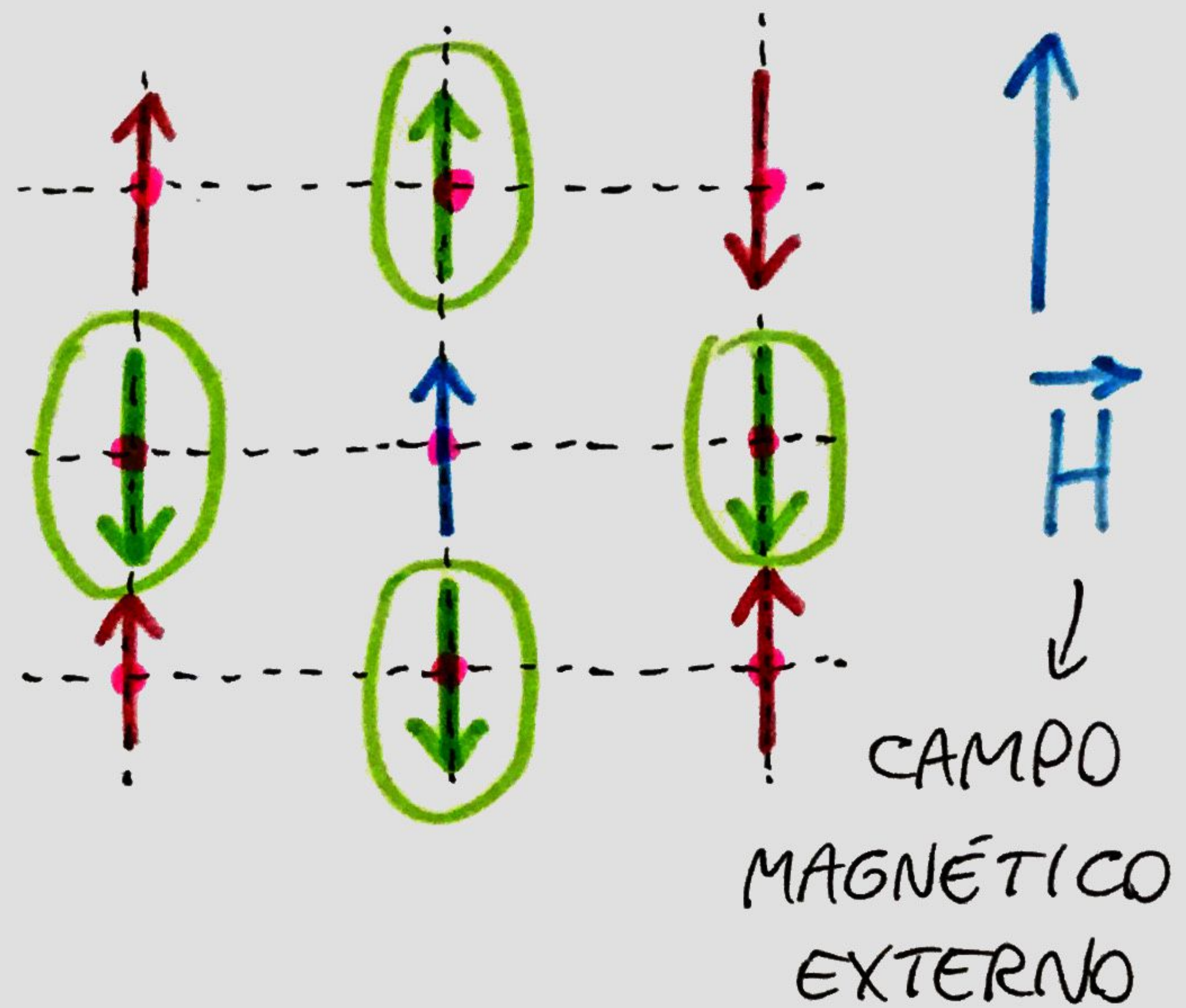


ISING 2D

$$i = 1, \dots, N = L^2$$

$$S_i \in \{-1, +1\}$$

$$\vec{S} = \{S_i\}$$



→ ENERGIA / "HAMILTONIANO"

$$\mathcal{H}(\vec{S}) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i \cdot S_j$$

TERMO FERROMAGNÉTICO

$$J > 0$$

ACOPLAMENTO FERROMAGNÉTICO

PRIMEIROS VIZINHOS

$$-H \sum_{i=1}^N S_i$$

TERMO PARAMAGNÉTICO

→ EM $T=0$, O SISTEMA "BUSCARIA" O ESTADO FUNDAMENTAL ("GROUND STATE"). EM $T>0$, PORÉM, O CONTATO COM UM BANHO TÉRMICO À TEMPERATURA T INDUZ "FLUTUAÇÕES TÉRMICAS" MESMO NO EQUILÍBRIO, REGIDO PELO ENSEMBLE CANÔNICO.

$$F(\vec{S}) = \mathcal{H}(\vec{S}) - T \cdot S(\vec{S})$$

→ ENTROPIA

SEM RELAÇÃO!

↓
ENERGIA LIVRE DE HELMHOLTZ PARA MAGNETISMO

→ TEMPERATURA

EXTENSIVAS

→ LEMBRETE: GÁS, $U = U(S, V, N)$

$$dU = Tds - PdV + \mu dN$$

← # PARTÍCULAS
← VOLUME

← PRESSÃO
← POTENCIAL QUÍMICO

T, P, μ : INTENSIVAS

$F = U - T \cdot S$; LEGENDRE, $S \rightarrow T$, $U \rightarrow F$

$$F(T, V, N) = U(S(T, V, N), V, N) - T \cdot S(T, V, N)$$

$$dF = dU - T.dS - SdT$$

$$= -SdT - PdV + \mu dN$$

→ MAGNETISMO: $U = U(S, M)$

$$dU = TdS + HdM$$

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

← INTENSIVA

→ MAGNETIZAÇÃO, EXTENSIVA

$F = U - HM$; LEGENDRE: $\begin{cases} M \rightarrow H \\ S \rightarrow T \end{cases}$, $\boxed{U \rightarrow F}$

$$\boxed{-TS}$$

ANALOGIA: GIBBS!

$$G = U - TS + PV$$

$$U(S, V, N)$$

↓

$$G(T, P, N)$$

OU

GRÃO CANÔNICO!

$$\Phi = U - TS - \mu N$$

$$U(S, V, N)$$

↓

$$\Phi(T, P, \mu)$$

$$F = F(T, H)$$

$$F(T, H) = U(S(T, H), M(T, H)) -$$

$$- H \cdot M(T, H) - T \cdot S(T, H)$$

↓

$$F(\vec{S}) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i \cdot S_j - H \sum_i S_i - T \cdot S(\vec{S})$$

$M(\vec{S})$: MAGNETIZAÇÃO
(ADIMENSIONAL)

$$\begin{cases} dU = TdS + HdM \\ F = U - TS - HM \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow dF = -SdT - MdH$$

$$S(T, H) = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_H$$

$$M(T, H) = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T$$

OK, QUEM É $F(T, H)$?

BOLTZMANN

$F = -k_B \cdot T \log Z$, ONDE Z É A

FUNÇÃO DE PARTIÇÃO DO SISTEMA,

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma} + \beta H M_{\sigma}}$$

ONDE $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$, $E_{\sigma} \equiv \mathcal{H}(\vec{S})$ E $M_{\sigma} = M(\vec{S})$

PARA CADA MICROESTADO σ DO SISTEMA,

$$\sigma = \vec{S} = (S_1, \dots, S_N) \text{ E } \sum_{\sigma} = \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N}$$

HÁ 2^N MICROESTADOS!!!

12-5

→ PELA COMPLEXIDADE COMPUTACIONAL, É IMPOSSÍVEL CALCULAR

Z!!!

→ PORÉM, SABEMOS QUE, NO EQUILÍBRIO E PARA $H=0$, A PROBABILIDADE DE σ É

$$p_{\sigma} = \frac{e^{-\beta E_{\sigma}}}{Z}$$

COM

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}$$

$$\frac{p_{\sigma}}{p_{\sigma'}} = \frac{e^{-\beta E_{\sigma}}}{\cancel{Z}} \cdot \frac{\cancel{Z}}{e^{-\beta E_{\sigma'}}} = e^{-\beta(E_{\sigma} - E_{\sigma'})}$$

SE ACHARMOS UMA DINÂMICA ESTO-CÁSTICA $T_{\sigma' \leftarrow \sigma}$ TAL QUE

$$p_{\sigma} T_{\sigma' \leftarrow \sigma} = p_{\sigma'} T_{\sigma \leftarrow \sigma'}$$

PODEREMOS "AMOSTRAR" p_{σ} MESMO SEM Z!!!

12-6

