

4ª aula (24/03/2004) - Carlos Heideiro

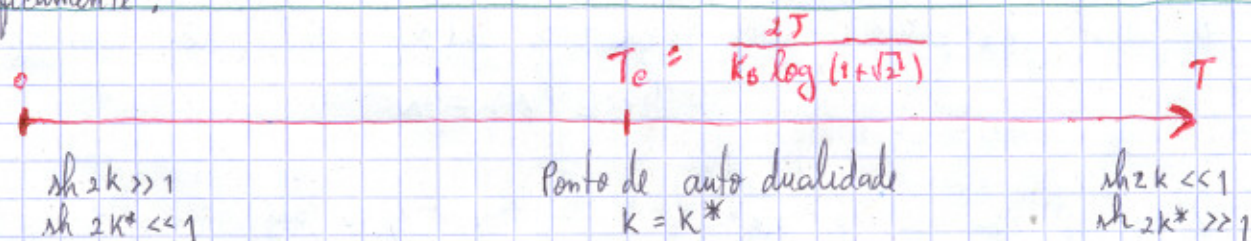
Terminamos a última aula com a observação de que no modelo de Ising 2-dimensional existe uma transformação - denominada dualidade - entre a expansão da função de partição a altas e baixas temperaturas. Explicitamente

$$\frac{Z_{\text{low}}(K^*)}{\text{sh}(2K^*)^{N/2}} = \frac{Z_{\text{high}}(K)}{\text{sh}(2K)^{N/2}}$$

onde N = número de sítios da rede ; $K = \frac{J}{K_B T}$

$$\text{sh} 2K \text{ sh} 2K^* = 1$$

Gráficamente:



Expansão em e^{-K} de $Z \Leftrightarrow Z_{\text{low}}$

Expansão em $\text{th} K$ de $Z \Leftrightarrow Z_{\text{high}}$

Este ponto de auto-dualidade coincide exactamente com o ponto crítico do modelo de Ising 2D, definido como uma singularidade da energia livre, calculada exactamente por Onsager em 1944.

~~Qual a importância dos pontos críticos?~~

i) Qual a importância dos pontos críticos.

~~Qual a importância dos pontos críticos?~~

- Os pontos críticos estão em geral associados a uma transição de fase.
- Qualitativamente esperamos que o valor médio do spin - magnetização M_s

seja

$M_s = 0$	$T > T_c$
$M_s \neq 0$	$T < T_c$

sem campo exterior

fase com desordem termodinâmica
fase com cooperação de longo alcance

→ Quantitativamente introduzimos o comprimento de correlação, ξ .
 Consideremos o limite termodinâmico do modelo de Ising 1D.
 Da pag. 8

$$F(T) = -k_B T \ln \left| 2 \cosh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \right|$$

que é analítica para $T \in \mathbb{R}^+$, mas podemos considerar $T=0 \equiv T_c$ como o ponto crítico. Por outro lado, da página 10

$$\langle \phi_0 \phi_n \rangle = \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^n = e^{n \ln \tanh \frac{J}{k_B T}}$$

ou,

$$\langle \phi_i \phi_j \rangle = e^{-\pi_{ij}/\xi}$$

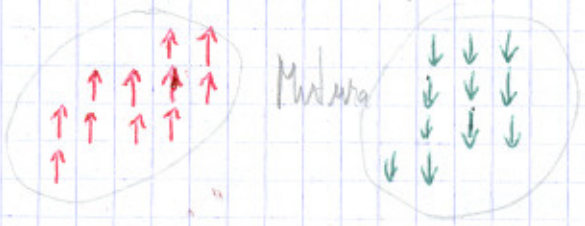
onde $\pi_{ij} = a |i-j|$, $a =$ malha da rede e o comprimento de correlação é

$$\xi = \frac{a}{|\ln \tanh \frac{J}{k_B T}|} \xrightarrow{T \rightarrow T_c = 0} \infty$$

(Note-se que $\xi \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{a}{2} e^{2J/k_B T}$, $\bar{\eta}$ não é lei de potências)

~~o~~ O comprimento de correlação fornece-nos a escala em que ~~sempre~~ a correlação entre spins é importante. Esta escala diverge no ponto crítico.

→ No modelo de Ising 2D, para $B=0$ e $T > T_c$ temos: (rede infinita)



ilhas de spin up e ilhas de spin down com tamanho médio ξ .
 Mas há ilhas com tamanho médio maior e menor que ξ .

Mas quando $T \xrightarrow{\text{dece}} T_c$, encontramos, (por exemplo) num oceano de spin up ilhas de spin down de todos os tamanhos, dado que $\xi \rightarrow \infty$.

3

As flutuações estendem-se sobre ~~todas~~ ^{de todos os tamanhos} regiões possíveis.
Já não há uma escala; o sistema torna-se invariante de escala. No ponto crítico o sistema apresenta uma estrutura fractal (cuja dimensão está ~~relacionada~~ relacionada com os expoentes críticos).

→ Estes sistemas têm ainda a notável propriedade que, tendo começado com interações entre vizinhos, encontramos correlações de longo alcance (ε) eventualmente infinito (quando $T \rightarrow T_c$). Deste modo, a transição de fase é um fenómeno cooperativo de longa escala e é de esperar que as suas ~~propriedades~~ características dependam de propriedades gerais e não dos detalhes da interação.

↳ como

- dimensão do espaço
- unidades do sistema
- dimensão do parâmetro de ordem.

Exemplo: o modelo de Ising 2D numa rede quadrada ou triangular têm os mesmos expoentes críticos (quantidades universais), mas diferente T_c (quantidade que depende dos detalhes).

Esta propriedade chama-se universalidade.

→ Esta propriedade manifesta-se em Teoria Quântica de Campos:

Teoria Quântica de Campos

Mecânica Estatística

- Divergências no Ultra-Violeta (UV) no cálculo de diagramas de Feynman
- Regularização (introdução cut-off) e renormalização
- Presença de cut-off finitas e independentes

• Perto de um ponto crítico universalidade

Mesma Ideia
"Wilson 60's"

Verdadeiros graus de liberdade microscópicos tornam-se irrelevantes e há graus de liberdade efetivos que capturam toda a física.

Dada a dificuldade em resolver exactamente os modelos da mecânica estatística é natural usar métodos aproximados.

A aproximação de "campo médio"

Nos modelos de mecânica estatística, cada componente interage com

- i) um campo externo
- ii) componentes vizinhos

substituído na aproximação de campo médio →

Média sobre todos os componentes.

Para fazermos esta substituição recordemos que definimos a magnetização no sítio i como:

$$M_i = \langle \phi_i \rangle = \frac{\sum_{\phi \in \Omega} \phi_i e^{-\beta H(\phi)}}{Z_N(\beta)}$$

Definimos a densidade de Magnetização como a média da magnetização no ~~sítio~~, para todos os j ; ~~no sistema~~

$$M = \frac{1}{N} \sum_j \langle \phi_j \rangle$$

Considerando o Hamiltoniano de Ising ~~no sistema~~

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \phi_i \phi_j - B \sum_i \phi_i$$

a energia no sítio i é aproximada por

$$E_i = -J \phi_i \sum_{\text{j vizinhos}} \langle \phi_j \rangle - B \phi_i \quad \text{que aproximamos por}$$

$$E_i = -J q M \phi_i - B \phi_i$$

→ dimensionalidade

Temos agora um sistema com espaço de configurações de dimensão 2:

$$\left. \begin{array}{l} \phi_i = +1 \\ \phi_i = -1 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} E_i = -JMq - B \equiv -E_0 \\ E_i = JMq + B \equiv E \end{array}$$

Dados estes níveis de energia, o valor médio de ϕ_i é:

$$\langle \phi_i \rangle = \frac{\sum_i \phi_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} = \frac{e^{+\beta E} - e^{-\beta E}}{e^{+\beta E} + e^{-\beta E}} = \tanh \beta E$$

Mas se nos aproximamos para todos os sítios $\langle \phi_i \rangle = M$, por consistência devemos ter

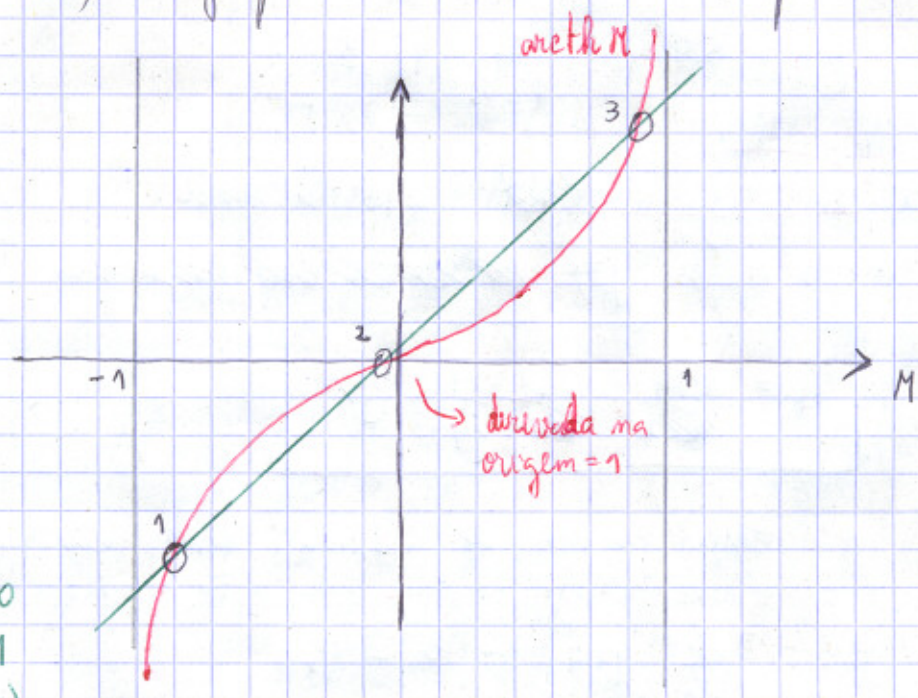
$$M = \tanh \beta E$$

(\Rightarrow)

$$\operatorname{arctanh} M = \frac{qJM + B}{k_B T}$$

Condição de auto-consistência da aproximação.

Esta equação é transcendente e tem de ser resolvida numericamente. Uma representação gráfica dá-nos uma ideia qualitativa do comportamento.



$B > 0$
 declive > 1
 $\left(\frac{qJ}{k_B T} > 1\right)$

As soluções 1 e 2 são instáveis ou meta estáveis, pois têm $M < 0$ com $B > 0$; A solução 3 é aceitável pois a magnetização é na direcção do campo externo.

Quando tomamos o limite $B \rightarrow 0^+$ há duas hipóteses para a solução estável:

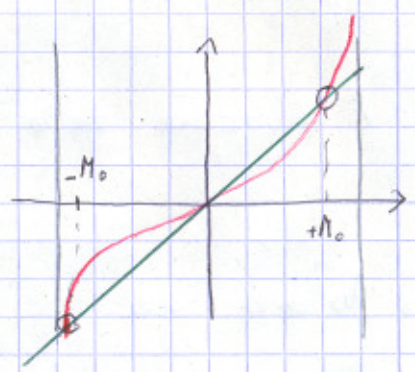
- Se $\frac{qJ}{k_B T} > 1$ solução tem $M \neq 0$

• Se $\frac{qJ}{k_B T} < 1$ solução tem $M=0$

Assim, a aproximação de campo médio preve uma magnetização espontânea (na ausência de campo magnético exterior) se

$$T < \frac{qJ}{k_B} = T_c$$

com valores $\pm M_0$. Note-se a quebra espontânea de simetria abaixo de T_c .



Crítica da aproximação de "campo médio":

	T_c	T_c (campo médio)
$D=1$	0	$2J/k_B$
$D=2$ (rede quadrada)	$\frac{2.27J}{k_B} \approx \frac{2J}{k_B} \log(1+\sqrt{2})$	$4J/k_B$

Falha redondemente; preve transições de fase e $m \neq 0$

Preve T_c maior q verdadeiro

→ Em geral a aproximação de campo médio favorece a ocorrência de uma transição de fase. A razão é que as flutuações - que a aproximação de campo médio negligencia - tendem a combater a transição de fase.

→ A aproximação torna-se exata em duas circunstâncias:

i) Quando $D \rightarrow \infty$

ii) Quando há interações fracas de longo alcance como no modelo que agora consideramos:

Modelo de Ising exatamente solúvel por campo médio:
Consideramos o Hamiltoniano:

$$H = - \frac{J}{2} \sum_{(i,j)} \phi_i \phi_j - B \sum_i \phi_i \quad \text{e tomamos } J = \frac{1}{N}$$

↳ todos os pares possíveis (inclui i=j)

A interação entre spins é agora: } de longo alcance
fraca (no sentido em q $J \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$)

Notemos que $\sum_{(i,j)} \phi_i \phi_j = \left(\sum_i \phi_i \right)^2$. Logo

$$e^{-\beta H} = e^{\frac{\beta}{2N} \left(\sum_i \phi_i \right)^2 + \beta B \sum_i \phi_i}$$
$$= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\frac{\beta N}{2} \left(\lambda - \frac{1}{N} \sum_i \phi_i \right)^2} e^{-\beta H}$$

↳ exercício de uma forma análoga!

$$\Leftrightarrow e^{-\beta H} = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\frac{\beta N \lambda^2}{2} + \sum_i \beta(\lambda+B)\phi_i}$$

Logo, a função de partição é:

$$Z = \sum_{\phi \in \Omega} \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\frac{\beta N \lambda^2}{2}} \prod_{i=1}^N e^{\beta(\lambda+B)\phi_i}$$

ou fazendo a soma sobre configurações

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\frac{\beta N \lambda^2}{2}} \left(2 \cosh \beta(\lambda+B) \right)^N$$

que pode ser reescrita

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\beta N A(\lambda)}$$

onde $A(\lambda) = \frac{\lambda^2}{2} - \ln \left(2 \cosh \frac{\beta(\lambda+B)}{\beta} \right)$

A densidade de energia livre é, no limite termodinâmico

$$F(\beta) = - \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{-\beta N A(\lambda)} \right\}$$

Usamos

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{N g(x)} = \max [g(x)]$$

- $g(x)$ tem máxima
- $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} g(x) = -\infty$

(Prova-se pelo método de steepest descent)

e obtemos

$$F(\beta) = \min A(\lambda)$$

É fácil de ver que $\bar{\lambda} = \min A(\lambda) \Leftrightarrow \bar{\lambda} = \text{th}(\beta(\bar{\lambda} + B))$

Interpretação física de $\bar{\lambda}$:

Considerando um Hamiltoniano

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \phi_i \phi_j - \sum_i B_i \phi_i$$

a magnetização no sítio i é:

$$M_i = \langle \phi_i \rangle = \frac{\sum_{\phi \in \Omega} \phi_i e^{-\beta H}}{Z} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B_i} = - \frac{\partial}{\partial B_i} F$$

No mesmo caso, que é homogêneo, a magnetização é

$$M = - \frac{\partial}{\partial B} F = - \frac{\partial}{\partial B} \left(\frac{\bar{\lambda}^2}{2} - \frac{\ln(2 \text{ch}(\beta(\bar{\lambda} + B)))}{\beta} \right) = \text{th}(\beta(\bar{\lambda} + B)) = \bar{\lambda}$$

Logo, $\bar{\lambda}$ significa

$$M = \text{th}(\beta(M + B))$$

Mas a aproximação de campo médio dá exatamente este resultado quando $q=N$, $J=1/N$. Assim, para este modelo, a aproximação de campo médio é exata.