

Capítulo 1

Elementos de la teoría de fenómenos críticos

1.1 Ising 1

- Modelo sencillo de sistema interactuante
- Magnetización espontánea 1D y 2D:
 - En 1D no hay magnetización espontánea
 - En 2D hay magnetización espontánea

Fase es una porción de materia física y químicamente homogénea (asociada a la densidad atómica o molecular uniforme) que no puede separarse por medios mecánicos.

Una fase puede ser una única sustancia o una mezcla.

El concepto de fase está también relacionado con el pasaje de la materia de una a otra fase.

corregir

Estados de agregación (en función de la proximidad de sus componentes). Agua y aceite (líquido) es un sistema de dos fases.

La materia puede encontrarse en gran variedad de fases; las más conocidas están relacionadas con los estados de agregación. Pero dentro del estado sólido tenemos fases dependiendo de cómo sea la estructura interna.

Tenemos también sistemas que manifiestan fases ordenadas y desordenadas; aleaciones de sólidos, superconductividad.

Transición de fase: cuando una propiedad del sistema cambia discontinuamente frente a la variación de un parámetro intensivo (T , p campo magnético).

interacciones entre partículas \rightarrow CORRELACIÓN A GRAN ESCALA

Las transiciones de fase emergen de la interacción. Uno de los modelos más sencillos fuera del gas ideal es el modelo de Ising (red con interacción entre primeros vecinos)

$$E_{\nu} = -H \sum_{i=1}^N (\mu S_i) - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j$$

Ising es energía dada por (1.1) e interacción a primeros vecinos.

dibujo

donde ν es una dada configuración de la red (valores S_i con $i = 1, 2, \dots, N$)

$$S_i = \pm 1 \quad \rightarrow \quad \pm \mu S_i \text{ Momento magnético del spin } i\text{-ésimo}$$

donde $\mu > 0$, J es constante de acoplamiento y $\sum_{\langle i,j \rangle}$ se extiende sobre los pares de vecinos (primeros).

Con $J > 0$ es favorable que todos los spines se hallen alineados. Entonces esto llevará a la magnetización espontánea: fenómeno de cooperación; la mayoría de los spines se orienta en una dirección y dan un valor de magnetización $\langle M \rangle \neq 0$

$$M_{\nu} = \sum_{i=1}^N \mu \cdot S_i^{\nu} \text{ (Magnetización)}$$

$J > 0$ ferromagnetismo y
 $J < 0$ paramagnetismo

Si los spines están orientados al azar, entonces habrá igual cantidad de $+1$ que de -1 y entonces

$$M \approx 0$$

Si $H = 0$ entonces M es la magnetización espontánea.

Habrà magnetización con T baja (o J alto) y hasta una T_{curie}

M se define como un momento dipolar magnético por unidad de volumen.

$$Q_N(H, T) = \sum_{s_1=-1}^{+1} \sum_{s_2=-1}^{+1} \dots \sum_{s_N=-1}^{+1} e^{+\beta H \mu \sum_i S_i + \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j}$$

donde las sumatorias toman para cada i los valores $S_i = +1, -1$

$$A = -kT \log Q \quad \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Q = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \log Q$$

EJEMPLO 1.1 (Ejercicio 5.1 Chandler)

$$E_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j = -J \sum_i^N \sum_j^\gamma \frac{S_i S_j}{2}$$

para cada i sumo en sus γ vecinos el j (sobre 2 para no contar dos veces).

$$E_0 = -J \sum_i^N \frac{S_i \gamma}{2} = -JN \frac{\gamma}{2} = -JND$$

donde D es la dimensionalidad.

Como es

$$E_\nu = -H \sum_{i=1}^N \mu \cdot S_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j \quad \text{y} \quad \langle M \rangle = \left\langle \sum_i^N \mu \cdot S_i \right\rangle$$

entonces

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \left\langle \sum_i^N \mu \cdot S_i \right\rangle = \frac{\sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{\beta H \mu \sum_i^N S_i + \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j}}{Q_N} \\ \langle M \rangle &= \frac{\sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \frac{\partial}{\partial \beta H} \left[e^{\beta H \mu \sum_i^N S_i + \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j} \right]}{Q_N} = \frac{\frac{\partial}{\partial \beta H} (Q_N)}{Q_N} \\ \langle M \rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta H} (\log Q_N) = \frac{\partial}{\partial \beta H} (-\beta A) = \frac{\partial}{\partial H} (A) \end{aligned}$$

1.1.1 No hay magnetización espontánea en 1D

DIBUJO

Con $H = 0$ invierto spines detrás de una pared.

$$E_0 = -J(N-1) \quad E_f = -J[(N-1) - 2p]$$

Error en Huang (14.6); es
 $-\frac{\partial}{\partial H}(A_I)$

p es el número de paredes

Varían los términos asociados a la pared

$$\Delta E = E_f - E_0 = 2Jp > 0$$

con $p = 1$ es $\Delta E = 2J$ y con $p = 2$ es $\Delta E = 4J$ (es 2 por pared puesto que desaparece un + y aparece en su lugar un -).

La variación de S está asociada con el número de formas de ubicar la pared

$$S = l \log(N-1)$$

y es la S del estado con una pared, el desordenado.

$$\Delta S = k \log(N - 1) \quad (S_0 \equiv 0)$$

que define al estado sin pared como de entropía $S_0 = 0$

$$A = U - TS \rightarrow \delta A = \delta U - T\delta S$$

$$\delta J - kT \log(N - 1)$$

Con $T > 0$ tenemos que si desordenamos (agrego paredes) sube U y sube S . En general, como

$$\frac{\delta A}{kT} = \frac{2J}{kT} - \log(N - 1)$$

vemos que para $N \rightarrow \infty$ $\delta A < 0$ a menos de que J/kT sea muy grande.

En un sistema macroscópico 1D el desorden baja la A , entonces el equilibrio tiende al desorden (no al orden).

Es decir, un sistema 1D de spines a $T \neq 0$ espontáneamente irá hacia A mínimas (mayor aleatoriedad), no se tiende a alcanzar estados ordenados.

Para p paredes es

$$\Delta A = 2Jp - kT \log[(N - 1)(N - 2) \dots (N - p)]$$

S domina la minimización de A .

1.1.2 Magnetización espontánea en 2D

La magnetización media por spin es

$$\mathcal{M} = \frac{1}{2} \left(\frac{N_+ - N_-}{N} \right)$$

Con $N \rightarrow \infty$ claramente será 0 a no ser que exista una preferencia por cierta dirección $+$ o $-$.

Queremos calcular todas las configuraciones posibles de un arreglo 2D de spines. Para ello sistematizamos una dada construcción en dominios \square que engloban spines $(-)$ y están limitados por paredes.

DIBUJO ising

Los spines $+$ son una condición de contorno que con $N \rightarrow \infty$ es una perturbación que rompe la simetría. También sirven para cerrar los dominios.

Cada dominio tiene una longitud b medido en paredes $|$ y una dirección de recorrido de forma que los spines $-$ están siempre a la izquierda de la pared. El tamaño de la red es $\sqrt{N} \times \sqrt{N} = N$. El área se mide en términos del dominio mínimo " \square "

$$\text{dominio} = (b, i)$$

donde b es el número de paredes e i una etiqueta.

A un mismo número de paredes según forma y localización tendrá varios dominios.

Una dada configuración del sistema tendrá ciertos dominios (b, i)

b (paredes)	Areas (spines)	$b^2/16$
4	1	1
6	2	2.25
8	3,4	4

Si cada spin ocupa un área de 1, en términos de paredes el área que engloba un dominio de b paredes es

$$\text{Área dominio} \neq \frac{b^2}{16} \quad \rightarrow \quad S([b, i]) = \text{Área dominio}$$

Tengo una figura de longitud b y si la quiero llevar a un cuadrado con suerte el lado será $b/4$ de modo que su área es $b^2/16$

Definimos ahora

$$\chi([b, i]) = \begin{cases} 1 & \text{Si } (b, i) \text{ ocurre en una dada configuración} \\ 0 & \text{En caso contrario} \end{cases}$$

y $m(b)$ número de dominios de b paredes.

Luego;

$$N_- = \sum_b \sum_i^{m(b)} \chi([b, i]) S([b, i]) \quad [1]$$

en el caso dibujado sería

$$N_- = 1 \cdot S(6, i) + 1 \cdot S(8, i') + 1 \cdot S(26, i'') \quad N_- = 1 \cdot 2 + 1 \cdot 4 + 1 \cdot 12 = 18$$

Por la [1] se puede acotar, empezando por $m(b)$. Para ver el número de dominios de longitud b piénsese que para la primera pared tengo N posibilidades; para las siguientes $b - 1$ tengo tres opciones pues no puedo volver, y entonces

$$m(b) \leq N3^{b-1}$$

Nótese que estamos considerando paredes abiertas y cerradas.

Luego,

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_b \sum_i^{N3^{b-1}} \chi([b, i]) \underbrace{S([b, i])}_{\leq b^2/16}$$

$$N_- \leq \sum_b \frac{b^2}{16} \sum_i^{N3^{b-1}} \chi([b, i])$$

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_b \frac{b^2}{16} \sum_i^{N3^{b-1}} \langle \chi([b, i]) \rangle$$

Pero

$$\langle \chi([b, i]) \rangle = \frac{\sum'_{\{Si\}} e^{-\beta E_{\{Si\}}}}{\sum_{\{Si\}} e^{-\beta E_{\{Si\}}}}$$

donde la sumatoria es en aquellas configuraciones que contienen al dominio (b, i) .

Removemos términos del denominador para acotar: pensamos que si en una dada configuración C con $\{b, i\}$ revertimos en el dominio $\{b, i\}$ los spines llegamos a una configuración \tilde{C}

num: de todas las configuraciones posibles aquellas en las cuales se da el dominio (b, i) . **den:** todas las configuraciones posibles.

$$E_C - E_{\tilde{C}} = 2\varepsilon b$$

Al revertir los spines de un dominio pasamos a una configuración más ordenadas y por ende de menor energía

DIBUJO

$$\frac{\sum'_{\{Si\}} e^{-\beta E_{\{Si\}}}}{\sum_{\{Si\}} e^{-\beta E_{\{Si\}}}} \leq \frac{\sum_{\{C\}} e^{-\beta E_C}}{\sum_{\{C'\}} e^{-\beta E_{\tilde{C}}}} = \frac{\sum_{\{C\}} e^{-\beta E_C}}{\sum_{\{C\}} e^{-\beta E_{\tilde{C}}} e^{2\beta\varepsilon b}} = e^{-2\beta\varepsilon b}$$

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_b \frac{b^2}{16} e^{-2\beta\varepsilon b} N 3^{b-1} = \frac{N}{48} \sum_b b^2 [3 e^{-2\beta\varepsilon}]^b$$

$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{48} \sum_{b=4,6,8,\dots} b^2 x^2,$$

$$\text{con } x \equiv 3 e^{-2\beta\varepsilon}$$

$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{48} (16x^4 + 36x^6 + 64x^8 + \dots)$$

Sea $b = 2n$, entonces

$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{48} \sum_{n=2,3,4,\dots} 4n^2 (x^2)^n,$$

$$\text{con } x^2 = 9 e^{-4\beta\varepsilon}$$

$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{12} \sum_{n=2}^{\infty} n^2 r^n,$$

$$\text{con } r = 9 e^{-4\beta\varepsilon}$$

$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{3} \frac{r^2}{(1-r)^3} \left[1 - \frac{3}{4}r + \frac{1}{4}r^2 \right]$$

y esta cantidad para algún β grande pero finito es menor a $N/2$.

1.2 Ising 2

La energía se podía escribir como

$$E_{\nu} = -H \sum_i^N (\mu s_i) - J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i \cdot s_j$$

El grado de un nodo es γ que depende de la red y de la dimensión,

2D	cuadrada	$\gamma = 4$
3D	SC	$\gamma = 6$
3D	BCC	$\gamma = 8$

γ es el número de vecinos. De cada nodo salen γ líneas.

$$\sum_{\langle i, j \rangle} = \frac{\gamma N}{2} = \text{nro total de líneas}$$

dibujos

Tomando un nodo y trazando líneas a sus γ vecinos tengo $\gamma N/2$ líneas dibujadas (se divide en 2 por el doble conteo).

Tomando cada \oplus trazo líneas a sus vecinos y defino

$$N_+ = \text{nro de spines } \uparrow \quad N_- = \text{nro de spines } \downarrow$$

$$N_{++} = \text{nro de pares } \uparrow\uparrow \quad N_{--} = \text{nro de pares } \downarrow\downarrow$$

$$N_{+-} = \text{nro de pares } \uparrow\downarrow \text{ o } (\downarrow\uparrow)$$

- 1) $\gamma N_+ = 2N_{++} + N_{+-}$
- 2) $\gamma N_- = 2N_{--} + N_{+-}$
- 3) $N_+ + N_- = N$

$$\gamma N = 2N_{++} + 2N_{--} + 2N_{+-}$$

$$\gamma N_+ + \gamma N_- = (2N_{++} + N_{+-}) + (2N_{--} + N_{+-})$$

$$\frac{\gamma N}{2} = N_{++} + N_{--} + N_{+-}$$

Podemos poner todo en términos de N_{++}, N_+, N y entonces

$$N_{+-} = \gamma N_+ - 2N_{++} \quad N_- = N - N_+$$

$$N_{--} = \frac{\gamma}{2}(N - N_+) - \frac{1}{2}(\gamma N_+ - 2N_{++}) = \frac{\gamma}{2}N - \gamma N_+ + N_{++}$$

$$\sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-} = N_{++} + \frac{\gamma}{2}N - \gamma N_+ + N_{++} - \gamma N_+ + 2N_{++} =$$

$$4N_{++} - 2\gamma N_+ + \frac{\gamma}{2}N$$

$$s_i = N_+ - N_- = N_+ - (N - N_+) = 2N_+ - N$$

La energía se puede escribir en función de estas variables

$$E_I = -H\mu(2N_+ - N) - J(4N_{++} - 2\gamma N_+ + \frac{\gamma}{2}N)$$

$$E_I = -4JN_{++} - 2(H\mu - \gamma J)N_+ - \left(\frac{\gamma J}{2} - H\mu\right)N$$

La función canónica será

$$Q_I = \sum_{E_I} e^{-\beta E_I} = e^{\beta(J\gamma/2 - H\mu)N} \sum_{N_+=0}^N \left(e^{2\beta(\mu H - J\gamma)N_+} \sum_{N_{++}}' e^{4\beta J N_{++}} g(N_+, N_{++}) \right)$$

La energía depende de las cantidades N , N_+ , N_{++} y no del detalle de la distribución de los mismos.

donde $g(N_+, N_{++})$ es el número de configuraciones de N_{++} y N_+ y la sumatoria primada se hace sobre los valores de N_{++} consistentes con que hay N_+ spines up.

Esta expresión no ha sido resuelta salvo en 2D.

1.2.1 Aproximación de Bragg-Williams

$$\frac{N_+}{N} = (\text{promedio}) \leftarrow \text{correlaciones de largo rango}$$

$$\frac{N_{++}}{\gamma/2N} = \leftarrow \text{correlaciones de corto rango}$$

y entonces N_+/N está asociado a una visión global del sistema (un cuerpo), mientras que $N_{++}/(\gamma/2N)$ lo está a una visión local del sistema (dos cuerpos).

Si un dado spin es \oplus entonces tiene en promedio $N_{++}/(\gamma/2N)$ vecinos del tipo \oplus .

Definimos unos parámetros de orden L y σ

$$\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2}(L + 1) \quad (\text{todo } \downarrow) - 1 \leq L \leq 1 (\text{todo } \uparrow)$$

$$\frac{N_{++}}{\gamma/2N} = \frac{1}{2}(\sigma + 1) \quad -1 \leq \sigma \leq 1$$

Estamos viendo todo del lado de los spines \oplus .

pero

$$\sum_i s_i = 2N_+ - N = (L+1)N - N = NL,$$

$$\langle M \rangle = \langle \sum_i^N \mu s_i \rangle = \mu \langle \sum_i^N s_i \rangle = \mu N \langle L \rangle$$

$$\frac{\langle M \rangle}{\mu N} \equiv \mathcal{M} = \langle L \rangle$$

que es la magnetización por partícula (adimensional).

$$\sum_{\langle i,j \rangle} = \frac{1}{2} N \gamma (2\sigma - 2L + 1)$$

La energía es

$$E = -H\mu \sum_i^N s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} = -H\mu NL - \frac{J}{2} N \gamma (2\sigma - 2L + 1)$$

y por partícula,

$$\epsilon \equiv \frac{E}{N} = -H\mu L - \frac{J}{2} \gamma (2\sigma - 2L + 1)$$

Hasta aquí el planteo es exacto; Bragg-Williams hace la aproximación

=

=

$$E = -\mu H N L - \frac{J N \gamma}{2} L^2,$$

que es la E en Bragg-Williams.

=

donde $\{s_i\}$ es la configuración de los N spines.

La suma se extiende sobre todos los conjuntos $\{s_i\}$, pero el sumando sólo depende de L . Queremos saber cuántos conjuntos $\{s_i\}$ tienen el mismo L ,

=

=

Significa que no hay correlaciones de orden corto salvo las que surgen del orden largo. Me quedo sólo con el parámetro L .

La suma es ahora en todos los L posibles. Con $N \rightarrow \infty$ el logaritmo de Q es dominado por el término (con \bar{L}) que maximiza el sumando.

La clave es el término que maximiza el sumando en valor absoluto. Será máximo o mínimo.

=

=

y usando Stirling,

=

pero no sabemos quién es \bar{L} . Y si hacemos

=

llegamos a que el valor de \bar{L} sale de

=

Con $H = 0$ es

=

DIBUJO

busco igualar $f = \tanh(\beta\gamma J\bar{L})$ con $f = \bar{L}$.

Entonces, si

=

siendo T_c la temperatura de Curie. Usando (2) en (1) podemos escribir

=

=

pero (3) vale para el \bar{L} que maximiza $\log Q$. Vemos que es independiente de H . Es más, (3) graficado en función de \bar{L} no me dice nada. Lo que es valioso es (1). Desde allí,

=

Considerando $H = 0$ resulta

=

DIBUJOS

=

El efecto del $H \neq 0$ es entonces romper la degeneración. Por otro lado \bar{L} es el valor de magnetización por partícula. Entonces podemos graficar $A(\mu)$

DIBUJO

Las otras funciones termodinámicas resultan (con $H = 0$)

=
=
=
=

donde L_0 debe computarse numéricamente pero podemos aproximar en dos límites $T \approx 0$ y $T \approx T_c$

=
=

DIBUJOS

1.2.2 Aproximación de Bette-Peierls

Tiene en cuenta correlaciones de corto orden. Se piensa en un elemento fundamental de la red de spines y el efecto de toda la red sobre el mismo.

$z \equiv$ parámetro que mide el efecto de la red sobre el elemento

=
=

Para un dado n hay (γn) [combinatorio] posibles ordenamientos. Se propone:

=
=

con q una normalización.

=
=
=
=

Ahora se tendrá

=
=

Estamos usando teorema del binomio, ponerlo en apéndice de cuentas.

y suponemos que estas dos ecuaciones se cumplen en toda la red. Entonces tenemos L, σ en función de z y T . Dado que los centros son indistinguibles de un vecino,

$$=$$

pero

$$=$$

y podemos calcular

$$=$$

considerando $x \equiv \frac{\gamma}{\gamma-1}$

Pero (1) debe hacerse gráficamente

- $z = 1$ es solución siempre
- Si z_0 es solución, entonces $1/z_0$ también lo es
- $z = 1$ hace $L = 0$ y $z \rightarrow \infty$ hace $L = 1$

DIBUJO

Hay que ver la pendiente C de la curva azul en $z = 1$,

$$=$$

$$=$$

$$=$$

La T_c se impone desde

$$=$$

$$=$$

$$\boxed{kT_c = \frac{2J}{\log\left(\frac{\gamma}{\gamma-2}\right)}}$$

$$=$$

$$=$$

y en este último caso hay magnetización espontánea.

DIBUJO

El c_V no se va a cero para $T > T_c$. La solución exacta, Onsager, tiene allí una divergencia logarítmica.

1.2.3 Cosas sin título

dibujillos tipo tablero de ajedrez

dibujo $\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2} \rightarrow L = 0$ $\frac{N_{++}}{\gamma/2N} = \frac{1}{2} \rightarrow \sigma = 0$ $\mathcal{M} = 0$	dibujo $\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2} \rightarrow L = 0$ $\frac{N_{++}}{\gamma/2N} = 0 \rightarrow \sigma = -1$ $\mathcal{M} = 0$	dibujo $\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2} \rightarrow L = 0$ $\frac{N_{++}}{\gamma/2N} = \frac{1}{4} \rightarrow \sigma = -\frac{1}{2}$ $\mathcal{M} = 0$	dibujo $\frac{N_+}{N} = 1 \rightarrow L = 1$ $\frac{N_{++}}{\gamma/2N} = 1 \rightarrow \sigma = 1$ $\mathcal{M} = 1$
---	--	--	---

Ahora las energías son

$$=$$

dibujo $E = -\frac{J\gamma N}{2}$	dibujo	dibujo	dibujo
--------------------------------------	--------	--------	--------

Notemos que $N_{++}/(\gamma/2)N$ significa que todas las líneas $\oplus - \oplus$ dividido sobre todas las líneas posibles ($\oplus - \oplus, \oplus - \ominus, \ominus - \ominus$).

1.2.4 Orden corto y orden largo

dibujo bola spines

N_+/N : no me dice algo preciso en A. Creciendo hacia B va adquiriendo cada vez más sentido, entonces es un parámetro global.

$N_{++}/(\gamma/2)N$: tiene sentido en A. Creciendo hacia B ya en general no lo conservará, entonces es un parámetro local.

En $N_{++}2/(\gamma N)$

note que nos paramos en un \oplus para que tenga el sentido de vecinos con \oplus .

$$A = U - TS$$

Con ST chicos la minimización de A la domina U (min.) pero con U chicas la minimización de A la domina TS (ma)

1.2.5 Comentario magnetización

DIBUJETE

Con $H = 0$ es claro que deberíamos tener $\langle M \rangle = 0$ por simetría entre \oplus y \ominus .

Los dos ramos son equivalentes, pero el sistema cae en una u otra por una “rotura espontánea de simetría” llevada a cabo por un $H \rightarrow 0$ o por impurezas.

Acá hay una cuenta que no paso que tiene que ver con el $\log Q$.

El mínimo de A será

=

dibujo
 dibujo
 dibujo

La presencia de $H \neq 0$ añade un término

$$A \approx -NH\mu I + \dots$$

que hará menor a A en $+L_0$ y mayor en $-L_0$. Rompe degeneración.

=

1.2.6 Metropolis Monte-Carlo

Repaso de teoría de procesos de Markov.

Y es una variable estocástica en un espacio muestral (y_1, y_2, \dots) Sea por simplicidad todo equiprobable, entonces

$$P(y_1) = \frac{1}{4}$$

=

=

Y puede tomar cualquier valor de su espacio muestral.

Asumo que estoy con probabilidad 1 (certeza) en y_1 tengo tres flechas

=

Las normalizaciones vienen de integrar

- $\int P(y_1)dy_1 = 1$
- $\int P(y_1|y_2)dy_2 = 1$

Para procesos de Markov sólo interesará un único paso anterior. El sistema no tiene mucha memoria que digamos.

$$P(y_1|y_2) \equiv \text{Probabilidad de transición}$$

El proceso de Markov lo definimos por

=

$$=$$

$$=$$

$$=$$

Sea ahora un espacio muestral discreto (y_1, y_2, \dots, y_L) con el tiempo discretizado

$$=$$

$$=$$

Cadenas de Markov son en espacios discretos.

La información de las transiciones se introduce en

$$=$$

Para todo el sistema podemos definir un vector de dimensión L

$$=$$

$$=$$

$$=$$

Es regular la matriz estocástica Q si existe $k : [Q^k]_{ij} > 0 \forall i, j$ Si es regular, entonces existe $\$: Q^\$ = Q^{\$+1}$ y entonces $T = QT$ con $T \equiv Q^\$$.

Llegado un momento, $\$$ pasos, el sistema ya no cambia. A partir del paso $\$$ la matriz Q ya no cambia la distribución en \vec{P} .

Hay una hoja con algunas preguntas pegada acá.

$$=$$

$$=$$

$$\vec{P} = \vec{P}Q,$$

lo cual define el equilibrio. Este punto fijo define

$$=$$

1.3 Método de Metropolis Monte Carlo

Tenemos el espacio \mathbb{V} 3DN dimensional para un sistema de N partículas. Un punto es el estado del sistema.

DIBUJETE

Queremos generar una cadena de Markov con probabilidades constantes de transición.

Subdividimos el volumen \mathbb{V} en S celdas; el estado del sistema a un paso n es su ubicación en la celda S_k , $k = 1, 2, \dots, S$. La energía en ese estado es U_k .

DIBUJO

El sistema visita estados en un paso de tiempo (no es el tiempo físico)

$$=$$

que es la probabilidad de ir desde 1 a 2 (transición)

Los estados se ponderan de acuerdo a su energía U_k para que aparezcan en la cadena con frecuencia $\propto \exp(-\beta U_k)$

De esta forma la cuenta converge al canónico.

$$=$$

$$=$$

$$=$$

$$=$$

El tiempo medio de recurrencia es

$$=$$

con la condición

$$=$$

Estamos viendo la suma entre todos los caminos para llegar desde i a j ; debe dar uno. Siempre hay un camino entre dos estados (la red es conexa).

$$=$$

Un estado i es recurrente si

$$=$$

$$=$$

$$=$$

$$=$$

Si los estados pertenecen a la misma clase cumplen UNA de estas condiciones

- Son todos no recurrentes
- Son todos positivos
- Son todos nulos

Todos los estados están conectados en \mathbb{T} (su probabilidad es no nula) y entonces si uno solo de ellos es nulo y son de la misma clase entonces deben ser todos nulos. Lo mismo si uno es positivo, todos deben serlo.

DIBUJO

Cadena ergódica: cadena irreducible finita, con todos sus estados aperiódicos. Se dará que:

=

Con infinitos loops la probabilidad de llegar desde cualquier 'j' no depende del punto inicial 'j'. La probabilidad del estado 'k' tiene un valor asintótico estable

$$\pi_k = \frac{1}{n_k} \quad (\text{razonable})$$

=

=

dibujin

1.3.1 Metropolis

= Promedio en el ensamble

La probabilidad del estado asintótico del sistema será:

=

pero no conozco todos los posibles 's' y no puedo evaluar \sum_s . Pido reversibilidad macroscópica y entonces

=

luego,

=

Entonces, si se da REVERSIBILIDAD + ERGODICIDAD + NORMALIZACIÓN se tiene que la cadena converge.

El método: Se propone una P^* cadena de Markov con

=

$$=$$

$$=$$

$$=$$

Tenemos tres situaciones $\pi_i < \pi_j, \pi_i = \pi_j, \pi_i > \pi_j$

$$=$$

$$=$$

1.3.2 Aplicación a Ising

$$=$$

$$=$$

$$=$$

Las probabilidades de transición serán:

$$=$$

de modo que para un sistema con single spin flip se tendrá:

1	$\Delta E = 8J$	El menos conveniente
4	$\Delta E = 4J$	
6	$\Delta E = 0$	Caso neutro
4	$\Delta E = -4J$	
1	$\Delta E = -8J$	Es más conveniente

Con estas consideraciones tengo todas las probabilidades de MMC
tres dibujetes seguidos

1.4 Fenómenos críticos

Existe analogía entre sistemas magnéticos (H, M) y gases (p, V)

$$=$$

$$=$$

$$=$$

$$=$$

$$=$$
$$=$$

Derivando ambos lados:
dibujos
 L revienta en $T = T_c$
y las derivadas segundas de G discontinuas en T_c
Landau propone una teoría unificada de comportamiento de un sistema cerca del punto crítico. Introduce el parámetro de orden m_0 que vale 0 si $T > T_c$ y $\neq 0$ si $T < T_c$.
La idea es expandir $A = A(m_0)$. Con $H = 0$ el sistema es simétrico y entonces términos pares

$$=$$
$$=$$
$$=$$
$$=$$
$$=$$

Elegimos

$$=$$
$$=$$
$$=$$
$$=$$

dibujo

$$=$$
$$=$$

Si hay campo externo :

$$=$$
$$=$$

Con $f \rightarrow 0$ recordamos

$$=$$
$$=$$

Ambos revienta en T_c
DIBUJO

1.5 Exponentes críticos

- Al cruzar el punto crítico el parámetro de orden crece.
- En la vecindad del punto crítico el sistema sobrelleva procesos de ajuste, entonces hay grandes fluctuaciones.
- Algunas fluctuaciones termodinámicas tienen diferentes comportamientos.

Los exponentes críticos describen la naturaleza de las singularidades en el punto crítico. Son seis: $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu$

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad \text{parámetro}$$

Cerca del punto crítico las funciones termodinámicas pueden escribirse como:

	=	
	=	
	expresión	rango
C_M, C_v	$(-t)^{-\alpha}$	$t < 0$
x	x	x
x	x	x
x	x	x
x	x	x
x	x	x
x	x	x

Se cumplen ciertas desigualdades entre exponentes:

$$=$$

$$=$$

1.5.1 Exponentes críticos Van Der Waals

$$=$$

$$=$$

$$=$$

Para la teoría de Landau es:

$$=$$

$$=$$

$$=$$

1.5.2 Sobre trabajo y relación p, V [mover]

$$dU = dQ - pdV$$

DIBUJO

El sistema entrega trabajo al entorno si $pdV > 0$ y entonces $dV > 0$ (expansión) pues $p > p_{ext}$

El sistema absorbe energía en forma de trabajo si $pdV < 0$ y entonces $dV < 0$ (compresión) pues $p < p_{ext}$

p y V no varían separadamente; si p sube entonces V baja.

=
=
=

Para el sistema magnético si $H > 0$ entonces $dM > 0$

=

Si el sistema se ordena $dM > 0$ y baja su energía y por ende hace trabajo.

Este sistema hace trabajo no mecánico.

1.5.3 Comentarios varios [mover]

Los efectos de la estadística cuántica surgen de la indistinguibilidad de las partículas.

=

Cuando $\lambda^3/v \approx 1$ surgen efectos cuánticos y tiene importancia la estadística de las partículas (BE o FD).

Para un sistema de cuasipartículas es $\mu = 0$. En general,

$$\mu = \mu(T)$$

es un valor único para el sistema y depende de la temperatura.

=
=
=

RESTA UNA HOJA DE EXPRESIONES Y CUENTAS QUE DEJAMOS PARA EL futuro APÉNDICE.