

Modelos de Spin

FREDERICO SOARES BRITO

UFG - Regional de Catalão
fredsobrito@yahoo.com.br

17 de novembro de 2017

Resumo

Abstract

1 Introdução

Em física estatística busca-se descrever o comportamento termodinâmico de diversos sistemas analisando-os como sistemas de incontáveis partículas que obedecem às leis da mecânica. Estes sistemas são chamados de ensemble. O modelo de Ising descreve ensembles formados por células fixas em malhas e que possuem apenas duas opções de estado.

2 Sistema

Na física, assim como em todas as ciências naturais é comum “separar” o objeto de estudo do restante do universo. Quando esse objeto de estudo é formado por um conjunto de elementos que interagem entre si ele é chamado de sistema [1].

Sistema: conjunto de elementos interdependentes.

2.1 Sistema Aberto

O número de elementos em um sistema aberto pode variar, elementos que não faziam parte do sistema podem passar a fazer assim como elementos que fazem parte podem deixar de fazer.

2.2 Sistema Fechado

Os elementos de um sistema fechado não podem variar, não há entrada ou saída de matéria seja ela fluido ou partícula. No entanto seus elementos podem interagir com elementos que não pertencem ao sistema trocando energias.

2.3 Sistema Isolado

Em um sistema isolado só há interação entre os elementos que pertencem ao sistema e, assim como o sistema fechado, não há alteração destes elementos.

3 Estado, Microestado e Macroestado

O estado de um sistema é um conjunto de informações que permitem descrever propriedades deste sistema e possibilita prever sua evolução.

Em mecânica o estado do sistema é formado pela descrição da posição e da quantidade de movimento de cada um de seus elementos. Isto permite prever o comportamento destes elementos em qualquer instante posterior ao descrito. Sistemas mecânicos deste tipo são chamados *determinísticos*.

Na termodinâmica o conjunto de informações capaz de descrever o estado de um gás inclui sua pressão, volume, temperatura e quantidade de matéria. Por se tratar de dados macroscópicos descrevendo um sistema de partes microscópicas podemos chamar este de um macroestado.

Já a mecânica estatística busca relacionar os dados termodinâmicos de sistemas formados por incontáveis células microscópicas com os dados mecânicos deste sistema. Uma descrição completa de cada elemento microscópico do sistema forma um *microestado*. Diversos microestados de um gás representam um mesmo macroestado (pressão, ...). O que nos leva a inferir que:

Um macroestado é formado por um conjunto de microestados

4 Leis da termodinâmica

As leis da física são empíricas, i.e. fundadas em observações. e diversas vezes definem conceitos. As leis da termodinâmica definem equilíbrio térmico, energia e entropia.

4.1 Primeira Lei

A primeira lei da termodinâmica afirma que a energia de um sistema só pode variar se houver interação com sistemas externos. Afirma ainda que, se um sistema isolado puder ser analisado como sendo constituído de dois subsistemas interagentes, a energia recebida por um dos subsistemas é numericamente igual à energia cedida pelo outro subsistema. A energia do sistema todo é a soma das energias dos subsistemas que o constituem, ou seja, é uma grandeza extensiva.

A energia de sistemas isolados se conserva.

4.2 Segunda Lei

Experimentalmente pode se verificar que sistemas tendem a um estado de equilíbrio, exceto quando “forçados” pela interação com outros sistemas.

A *entropia* é uma grandeza física associada à capacidade que um sistema tem de sofrer transformação sem interagir com outros. Diferente da energia é uma grandeza intensiva, isto é, não pode ser calculada a partir da soma da entropia

das partes do sistema e tão pouco se conserva, ao invés disso aumenta enquanto o sistema não atinge o equilíbrio.

A entropia de sistemas isolados aumenta até que se atinja o equilíbrio.

5 Ensemble

Alguns sistemas formados por células (átomos, moléculas, ...) possuem uma quantidade de elementos tão grande que torna sua análise determinística inviável. Cada grama de água, por exemplo, possui $3,3 \times 10^{22}$ moléculas.

Podemos analisar tais sistemas, através de conceitos estatísticos, não como um sistema isolado mas como um conjunto de diversos sistemas semelhantes que interagem entre si, os chamados *ensembles*[2, pg. 52].

Ensemble é um conjunto de sistemas físicos não determinísticos interdependentes analisados estatisticamente.

Os ensembles que serão aqui analisados são formados por sistemas com N partículas, cada partícula i se encontra em um estado σ_i , de forma que o sistema se encontre em um estado $s = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$.

Nos gases e líquidos geralmente o estado de uma partícula é a informação a respeito de sua posição e sua quantidade de movimento ($\sigma_i = \sigma_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i)$). Nos modelos de spin, foco deste trabalho, o estado de cada partícula é seu spin, que pode assumir valor $\sigma_i = \pm 1$.

5.1 Energia e Entropia nos Ensembles

Devido à sua natureza extensiva a energia total de um sistema determinísticos é a soma da energia de cada um de seus elementos.

Porém, como já mencionado, este cálculo é inviável para sistemas de muitas partículas. Neste trabalho vamos esperar que a energia dos sistemas que formam o ensemble seja a energia média dos sistemas dada por:

$$\langle E \rangle = \bar{E} = \sum_n E_n \cdot p_n \quad (1)$$

onde: $\langle E \rangle$ = Energia esperada para o sistema
 \bar{E} = Energia média do sistema
 E_n = Energia do sistema quando no estado n
 p_n = Probabilidade de encontrar o sistema no estado n .

A entropia

5.2 Ensemble Microcanônico

O ensemble microcanônico é formado por sistemas isolados.

Usando os multiplicadores de lagrange vamos definir uma

$$\frac{\partial S}{\partial s_j} = 0 \quad (2)$$

Porém qualquer sistema deve ser encontrado em algum dos seus estados possíveis. Ou seja, se p_j é a probabilidade de encontrar o sistema em um estado s_j tem-se:

$$\sum_j s_j = 1 \quad (3)$$

O ensemble que satisfaz às estas duas condições básicas é o ensemble microcanônico que é estudado para analisar as premissas básicas da mecânica estatística.

A entropia

Referências

- [1] BORGES, E. P. O conceito de entropia e sua generalização. *Ciências na transição dos séculos*, 2014.
- [2] REIF, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*. Waveland Press, 1965.