Modelação e Física Estatística

Modelos de magnetismo

António Luís Ferreira

June 6, 2021

Temas

modelo de spins independentes

interação apenas com campo magnético

- $\mathscr{H}(\{\mathrm{s_i}\}) = -\mathrm{H}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{s_i} = -\mathrm{NHm}$ com $s_i = \pm 1$, $M = \sum_i s_i$ e $m = \frac{M}{N}$ (magnetização por spin)
  - $\ln Z_N = N \ln(2\cosh(\beta H))$; $F(\beta, H) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_N$
  - $E = \langle \mathscr{H} \rangle = -NH \tanh(\beta H)$ com $\lim\limits_{\beta\to\infty} E = -NH$ e $\lim\limits_{\beta\to 0} E = 0$
  - $C_{V,H} = \left(\frac{dE}{dT}\right)_{V,H} = Nk_B \frac{(\beta H)^2}{\cosh^2(\beta H)}$, com $\lim\limits_{\beta\to\infty} C_{V,H} \to Nk_B (\beta H)^2 \exp(-2\beta H) \to 0$ e $\lim\limits_{\beta\to 0} C_{V,H} \to Nk_B (\beta H)^2 \to 0$

modelo de spins independentes

- $\langle m \rangle = -\frac{1}{N}\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_T = \tanh(\beta H)$ com $\lim_{\beta\to\infty}\langle m \rangle = \pm 1$ e $\lim_{\beta\to 0}\langle m \rangle = 0$
- susceptibilidade,
  $\chi_T = \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}\right)_T = \beta\left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2\right) = N\frac{\beta}{\cosh^2(\beta H)}$ e
  $\chi_{T,H=0} = N\frac{1}{k_B T}$, lei de Curie
- entropia,
  $S = -\left(\frac{dF}{dT}\right)_{N,H} = Nk_B\left[\ln(2\cosh(\beta H)) - \beta H \tanh(\beta H)\right]$ com $\lim_{\beta\to\infty} S = 0$ e $\lim_{\beta\to 0} S = Nk_B \ln 2$

modelo de spins independentes

- Arrefecimento adiabático.
  - inicialmente $T = T_1$ e aumenta-se H de H_0 até H_1 mantendo o sistema em contacto térmico com reservatório a temperatura T_1. A entropia diminui de S_0 até S_1
  - diminui-se o campo de H_1 até H_0 com o sistema térmicamente isolado e portanto a entropia constante. A temperatura do sistema diminui até T_2. Como a entropia é função de $\frac{H}{T}$ temos $\frac{H_0}{T_2} = \frac{H_1}{T_1}$ e $T_2 = T_1 \frac{H_0}{H_1}$ é inferior a T_1

teorias de campo médio

- $\mathscr{H} = -J\sum_{(i,j)} s_i s_j - H\sum_i s_i$ com $\sum_{(i,j)} \cdots$ soma sobre pares de vizinhos próximos
- Campo efetivo, $H_{\text{eff}} = Jzm + H$; onde z é o número de vizinhos.
- Hamiltoniano de campo médio, $\mathscr{H}_{\text{cm}} = -H_{\text{eff}}\sum_i s_i$
    - Com $H = 0$ temos $m = \tanh(\beta Jzm)$ usando a expansão $\tanh x \simeq x - \frac{x^3}{3}$ quando $m \to 0$ temos uma solução
        - $m = 0$ para $T > T_c = z\frac{J}{k_B}$
        - e duas soluções $m = \pm\left(\frac{3}{z\beta J}\right)^{1/2}\sqrt{T_c - T}$ para $T < T_c$
        - Temos $m \sim (T_c - T)^{\beta_{\text{cm}}}$ para $T < T_c$ com $\beta_{\text{cm}} = 1/2$

teorias de campo médio

- Em $T = T_C$ o sistema tem uma transição de fase contínua; A magnetização é designada por parâmetro de ordem e varia contínuamente na transição.
- Susceptibilidade magnética, $\chi_T = \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H}\right)_{T,H=0}$
  - Demonstra-se que para $T \gtrsim T_c$ temos $\chi_{T,H=0} = N \frac{1}{k_B} \frac{1}{T - T_C}$, e para $T \lesssim T_c$ $\chi_{T,H=0} = N \frac{1}{2k_B} \frac{1}{T_C - T}$ Lei de Curie-Weiss.
  - A susceptibilidade diverge em $T = T_C$. Numa transição de fase de 2ª ordem há divergências ou descontinuidades nas derivadas de 2ª ordem da energia livre.
  - $\chi_{T,H=0} \sim |T - T_C|^{-\gamma_{\rm cm}}$ com $\gamma_{\rm cm} = 1$

teorias de campo médio

- Isotérmica crítica: Para $T = T_C$ e H pequeno $m = (3\beta H)^{1/3} \sim H^{1/\delta_{\mathrm{cm}}}$ com $\delta_{\mathrm{cm}} = 3$
- Energia interna, em campo nulo: $E = -\frac{N}{2} Jzm^2$ com $E = 0$ para $T > T_c$
- Capacidade térmica em campo nulo, $C_{V,H=0} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,H=0}$
  - Demonstra-se que $C_{V,H=0} = 3Nk_B\left(\frac{1}{2} + \frac{T_C - T}{T_C}\right)$ para $T < T_c$ e $C_{V,H=0} = 0$ para $T > T_c$ sendo descontínua em $T = T_C$

Modelo Ising numa rede totalmente conectada

- $\mathscr{H} = -\frac{J}{N}\sum_{i,j\neq i} s_i s_j + \frac{N-1}{2}J - H\sum_i s_i$ onde se adicionou o termo constante $\frac{N-1}{2}J$ para que $\mathscr{H}$ seja nulo quando todos os spins são iguais em campo nulo. Esta expressão pode ser simplificada para $\mathscr{H} = \frac{NJ}{2} - \frac{NJ}{2}m^2(\underline{s}) - NH\,m(\underline{s})$ com $m = \frac{1}{N}\sum_i s_i$.
    - $Z_N(\beta, H) = \sum_m \begin{pmatrix} N \\ n_+ \end{pmatrix} \exp(-\beta\mathscr{H})$, com $n_+ = N\frac{1+m}{2}$ e $n_- = N\frac{1-m}{2}$. Usando a fórmula de Stirling podemos simplificar $\ln\begin{pmatrix} N \\ n_+ \end{pmatrix} \simeq -N\left[p_+\ln p_+ + (1-p_+)\ln(1-p_+)\right] = NS_B(p_+)$ com $p_+ = \frac{1+m}{2}$.

rede totalmente conectada

- $Z_N(\beta, H) = \sum_m \exp\left(N\left[S_B(\frac{1+m}{2}) - \frac{\beta J}{2}(1-m^2) + \beta H m\right]\right)$,
  $Z_N(\beta, H) = \int_{-1}^{1} dm \exp(N\Phi_{\mathrm{cm}}(m))$, com
  $\Phi_{\mathrm{cm}}(m) = S_B(\frac{1+m}{2}) - \frac{\beta J}{2}(1-m^2) + \beta H m$.
- Método de Laplace: Se $\Phi_{\mathrm{cm}}(m, \beta, H)$ tem um máximo em m_0, no interior do intervalo de integração, então, no limite em que N é muito grande $Z_N(\beta, H) = \sqrt{\frac{2\pi}{N|\Phi''_{\mathrm{cm}}(m_0)|}} \exp(N\Phi_{\mathrm{cm}}(m_0))$.
- $\frac{d}{dm}\Phi_{\mathrm{cm}}(m) = \beta(Jm + H) + \frac{1}{2}\ln\frac{1-m}{1+m}$ e $m_0 = \tanh(\beta(Jm_0 + H))$
- com $H = 0$ temos $\beta_c J = 1$ ou seja $T_c = J/k_B$

Modelo Ising d=1

- $\mathscr{H} = -J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - H\sum_i s_i$
- Condições fronteira livres em campo nulo
  - $Z_N = 2\cosh(\beta J)\, Z_{N-1} = 2\left(2\cosh(\beta J)\right)^{N-1}$
  - $\langle E\rangle = -NJ\tanh(\beta J)$, $S = Nk_B\left[\ln(2\coth(\beta J)) - \beta J\tanh(\beta J)\right]$
  - Capacidade térmica, $C_V = \left(\frac{d}{dT}\langle E\rangle\right)_H = Nk_B\frac{(\beta J)^2}{\cosh^2(\beta J)}$

$$Z_N = \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_N} e^{-\beta \mathcal{H}} \qquad H = 0$$

$$Z_N = \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_N} e^{\beta J (s_1 s_2 + s_2 s_3 + \cdots + s_{N-1} s_N)}$$

$$= \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_{N-1}} e^{\beta J (\cdots)} \left(e^{\beta s_{N-1}} + e^{-\beta s_{N-1}} \right)$$

$$= \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_{N-1}} e^{\beta J (\cdots)} \, 2\cosh(\beta s_{N-1})$$

Como $\cosh x = \cosh(-x)$

$$Z_N = \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_{N-1}} e^{\beta J (s_1 s_2 + s_2 s_3 + \cdots + s_{N-2} s_{N-1})} \, 2\cosh(\beta J)$$

$$= Z_{N-1} \, 2\cosh(\beta J)$$

$$Z_1 = \sum_{s_1} 1 = 2$$

$$Z_2 = 2(2\cosh(\beta J)) \Rightarrow Z_N = 2\left[2\cosh(\beta J)\right]^{N-1}$$

Modelo Ising d=1

- Condições fronteira livres em campo nulo
  - Função de correlação de spins
  - $\langle s_k s_{k+r} \rangle = [\tanh(\beta J)]^r = \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right)$
  - $\xi = -1/\ln\tanh(\beta J)$
- Condições fronteira periódicas
  Método da matriz de transferência.
  $\mathscr{H} = -J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - \frac{H}{2}\sum_i (s_i + s_{i+1})$
  $T_{s,s'} = \exp\left(\beta\left(Jss' + \frac{H}{2}(s+s')\right)\right)$

$$\langle s_k s_{k+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_k} \cdots \sum_{s_{k+r}} \cdots \sum_{s_N} \prod_{i=1}^{N-1} e^{\beta J_i s_i s_{i+1}} \, s_k s_{k+r}$$

$$\frac{1}{Z_N} \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_k} \cdots \sum_{s_{k+r}} \cdots \sum_{s_N} \cdots$$

$$\prod_{i=1}^{k-1} e^{\beta J_i s_i s_{i+1}} \prod_{l=k}^{k+r-1} s_l s_{l+1} e^{\beta J_l s_l s_{l+1}} \prod_{m=k+r}^{N} e^{\beta J_m s_m s_{m+1}}$$

$$\langle s_k s_{k+r} \rangle = \frac{1}{\beta^r Z_N} \frac{\partial}{\partial J_k} \cdots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_k} \cdots \sum_{s_{k+r}} \cdots \sum_{s_N} \cdots$$

$$\prod_{i=1}^{k-1} e^{\beta (J_i s_i s_{i+1})} \prod_{l=k}^{k+r-1} e^{\beta J_l s_l s_{l+1}} \prod_{m=k+r}^{N} e^{\beta J_m s_m s_{m+1}}$$

$$\langle s_k s_{k+r} \rangle = \frac{1}{\beta^r Z_N} \frac{\partial}{\partial J_k} \cdots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} Z_N$$

$$Z_N = 2\cosh(\beta J_{N-1})\, Z_{N-1} \qquad Z_N = 2^2 \cosh\beta J_{N-1} \cosh\beta J_{N-2}\, Z_{N-2}$$

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh\beta J_i$$

$$\langle s_k s_{k+r} \rangle = \frac{1}{\beta^r Z_N} 2^N \prod_{i=1}^{k-1} \cosh\beta J_i \prod_{l=k}^{k+r-1} \beta \sinh\beta J_l \prod_{m=k+r}^{N-1} \cosh\beta J_m$$

$$= \prod_{l=k}^{k+r-1} \frac{\sinh\beta J_l}{\cosh\beta J_l} = \prod_{l=k}^{k+r-1} \tanh(\beta J_l)$$

Caso $J_1 = J_2 = \cdots = J_{N-1}$ $\qquad \langle s_k s_{k+r} \rangle = [\tanh \beta J]^r$