Origem da interação:

dipolo-dipolo $\quad U \sim \frac{\vec{\mu}\cdot\vec{\mu}}{r^3} - \frac{3(\vec{\mu}\cdot\hat{r})^2}{r^5}$

apresentaria $T_c \sim 1K$ e tende a alinhá-los apenas $\uparrow\downarrow$ $\Rightarrow$ interação dipolar é uma perturbação a qualquer que seja o mecanismo.

Exchange: mecanismo quântico.

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\chi_{12}$ $\rightarrow$ totalmente antissimétrica

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} \varphi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\chi_{00} \\ \varphi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\chi_{1M} \end{cases}$$

a b

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$\chi_{1M} = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle & ; \quad M = 1 \\ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle / \sqrt{2} & \quad M = 0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle & \quad M = -1 \end{cases}$$

$$\varphi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) + \varphi_b(\vec{r}_1)\varphi_a(\vec{r}_2)\right)$$

$$\varphi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_a(\vec{r}_1)\varphi_b(\vec{r}_2) - \varphi_a(\vec{r}_2)\varphi_b(\vec{r}_1)\right)$$

No cálculo de $\langle H \rangle$ aparecem

$$\langle V \rangle_{SA} = \frac{1}{2}\iint d^3r_1\, d^3r_2\; \varphi^*_{SA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\, \varphi_{SA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} |\varphi^*_i(\vec{r}_1)|^2\, V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\, |\varphi_j(\vec{r}_2)| \approx \text{const}$$

$$- \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} \varphi^*_i(\vec{r}_1)\,\varphi^*_j(\vec{r}_1)\, V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\, \varphi_i(\vec{r}_2)\,\varphi_j(\vec{r}_2)$$

$\Rightarrow H = \tilde{J}\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ $\qquad$ $J \rightarrow$ integral de troca.

$\Rightarrow H_{ij} = -J_{ij}\, \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \qquad \tilde{J}\hbar^2 \propto J \qquad \vec{S}_i = \frac{\hbar \vec{\sigma}_i}{2}$.

$\Rightarrow H = -\mu \sum_{i=1}^{N} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{B} - J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$ → ordenamento

Hamiltoniana de Heisenberg em campo externo.
Exatamente solúvel apenas em 1-D. ($B=0$) → $\vec{\sigma} \times \vec{\sigma} = 2i\hbar \vec{\sigma}$.
Aproximação → Hamiltoniana de Ising.

$$H = -\mu \sum_{i=1}^{N} S_i B - J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$$

Exatamente solúvel em 1 e 2-D (com $B=0$)

$$Z = \sum_{S_1 = \pm 1} \cdots \sum_{S_N = \pm 1} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \beta \mu B \sum_i S_i}$$

$M = \mu \langle \sum_i S_i \rangle = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \right|_\beta$; note a similaridade

$a_i = \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_i} \quad \Rightarrow \quad H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$ sujeito

ao vínculo $M = \langle \hat{M} \rangle \Rightarrow Z = \mathrm{Tr}\, e^{\lambda_1 \hat{H} + \lambda_2 \hat{M}}$

Solução: $Z = \sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} \prod_{i=1}^{N} e^{K S_i S_{i+1} + \frac{K'}{2}(S_i + S_{i+1})}$

$= \sum_{S_1} \cdots \sum_{S_N} \prod_{i=1}^{N} T(S_i, S_{i+1})$; $T(S_i, S_j) = e^{K S_i S_j + \frac{K'}{2}(S_i + S_j)}$

$K = \beta J$ e $K' = \beta \mu B$; $T_{S_i S_j} = T(S_i, S_j)$ → p/

cada (S_i, S_j) T toma 4 valores $++$, $+-$, $-+$, $--$

$$T = \begin{pmatrix} T(1,1) & T(1,-1) \\ T(-1,1) & T(-1,-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+K'} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-K'} \end{pmatrix}$$

56

$$\Rightarrow \sum_{S_j=\pm 1} T(S_i, S_j)\, T(S_j, S_k) = (T^2)_{S_i S_k}$$

$$\Rightarrow Z = \sum_{S_1} \left[\sum_{S_2} T(S_1, S_2) \sum_{S_3} T(S_3, S_4) \cdots \sum_{S_N} T(S_{N-1}, S_N) T(S_N, S_1) \right]$$

$$= \sum_{S_1} (T^N)_{S_1 S_1} = \mathrm{tr}\, T^N = \lambda_{(+)}^N + \lambda_{(-)}^N$$

onde $\lambda_{(+)}$ e $\lambda_{(-)}$ são auto valores de T.

$$\Rightarrow \lambda_{(\pm)} = e^K \left[\cosh K' \pm \sqrt{\sinh^2 K' + e^{-4K}} \right]$$

$$\lambda_{(+)} > \lambda_{(-)} \quad \Rightarrow \quad Z = \lambda_{(+)}^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_{(-)}}{\lambda_{(+)}} \right)^N \right]$$

$$Z = \lambda_{(+)}^N \left(\frac{a-b}{a+b} \right)^N = \lambda_{(+)}^N x^N \qquad x < 1$$

$$N \gg 1 \Rightarrow Z = \lambda_{(+)}^N$$

Se $J = 0 \Rightarrow K = 0 \quad \Rightarrow \quad Z = (2\cosh K')^N$

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln \lambda_{(+)}$$

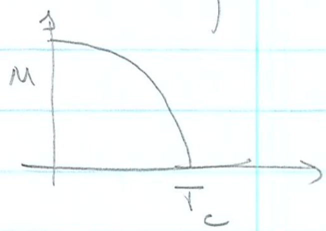
Se $B = 0$, $\lambda_{(+)} = e^K \left[1 + e^{-2K} \right] = 2\cosh K$.

$$\Rightarrow F = -NkT \ln \left(2\cosh \frac{J}{kT} \right)$$

Magnetização espontânea: energia x entropia

$kT > J \Rightarrow$ entropia vence

$kT < J \Rightarrow$ energia vence



$\Rightarrow$ Termo de Heisenberg favorece $\uparrow\uparrow\uparrow$ ou $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$

vamos tratar o ferromagnetismo: $\uparrow\uparrow\uparrow$

Hamiltoniana de Heisenberg $-J\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j$ é invariante

segundo $S_i \to -S_i$ $\Rightarrow$ configuração de mais baixa energia teria $M = n\langle\mu\rangle = 0$. Mas, se quebrarmos a simetria explicitamente B finito mas $B \to 0$.

$$\Rightarrow M = \lim_{B\to 0^+} \lim_{\substack{V\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{\mathcal{M}(B)}{V} = \lim_{B\to 0^+} n\langle\mu\rangle_B = n\langle\mu\rangle$$

limite termodinâmico: $N\to\infty$, $V\to\infty$ mas $n = \frac{N}{V} = \text{cnst.}$

ordem dos limites é fundamental pois

$$\lim_{\substack{V\to\infty \\ N\to\infty}} \lim_{B\to 0^+} \frac{\mathcal{M}}{V} = 0 \ !$$

Qdo $\lim_{B\to 0} n\langle\mu\rangle_B = n\langle\mu\rangle \neq 0$ diz-se que há uma quebra espontânea de simetria "SSB" no sistema.

$\Rightarrow$ configuração de equilíbrio quebra a simetria de H! $M\neq 0$ é o parâmetro de ordem do sistema.

Ising em 1-D $\quad M = \lim_{B\to 0} nkT \left.\frac{\partial \ln \lambda_{(+)}}{\partial B}\right|_{\beta} = 0$!

$\Rightarrow$ não há SSB em 1-D no modelo de Ising.

Flutuações destroem a ordem a $T\neq 0$

$F = E - TS \qquad \forall\ T\neq 0 \ \exists$ um # muito grande de paredes tq. $\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\ldots$

Limite Termodinâmico: (LT)

$$\lim_{\substack{N,V\to\infty \\ n\text{-finito}}} \frac{1}{V} A(T,V,N) = a(n,T)$$

LT existe se $a(n,T) \neq 0$.

Gás ideal $E = \frac{3}{2} NkT \Rightarrow \epsilon = \frac{E}{V} = \frac{3}{2} nkT$ é

finita no L.T.

Introduzindo gravidade:

$$E_G \propto -G\frac{(\rho V)^2}{V^{1/3}} \sim -\rho^2 V^{5/3}$$

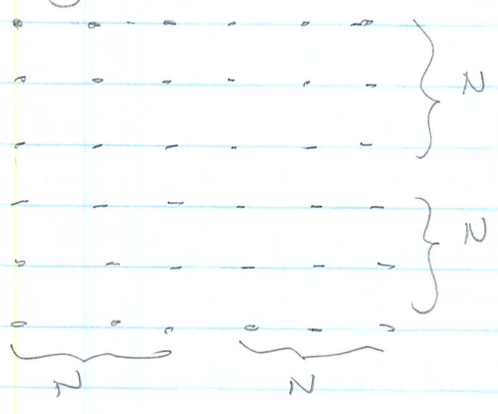
$$\rho = mn \Rightarrow \frac{E_G}{V} \sim -V^{2/3} \xrightarrow[V\to\infty]{} -\infty .$$

$\Rightarrow \nexists$ L.T. : manifestação da força gravitacional ser de longo alcance.

$\Rightarrow$ L.T $\leftrightarrow$ interações de curto alcance

blindagem no caso coulombiano.

Ising em 2-D.



$2N \times 2N = 4N^2$ sítios (spins)

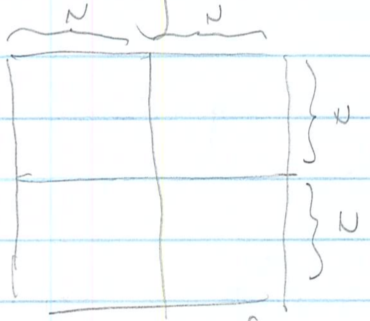
i) Se todos interagem entre si:

$$H = -J \sum_{i \neq j} S_i S_j$$

$$\Rightarrow c = \frac{(2N)^2!}{2!\left[(2N)^2 - 2\right]!} \underset{N \gg 1}{\Rightarrow} c \sim N^4 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lim_{N\to\infty} \frac{E}{N^2} \sim N^2 \to \infty$$ a menos que $J \to \frac{J}{N^2}$

ii) Ising curto alcance: $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$



regiões independentes $\Rightarrow$

$-4NJ < \text{erro} < +4NJ$

\# de configurações dos $4N^2$ spins independe da partição.

$$(*) \quad (Z_N)^4 e^{-4\beta J N} \le Z_{2N} \le (Z_N)^4 e^{4\beta J N}$$

$\Rightarrow f_N = -\frac{1}{\beta} \frac{\ln Z_N}{N^2}$ energia livre p/ spin em $N \times N$

$f_{2N} = -\frac{1}{\beta} \frac{\ln Z_{2N}}{4N^2}$ " " " em $2N \times 2N$

$$\Rightarrow \frac{\ln(*)}{4N^2} = \frac{4 \ln Z_N}{4N^2} - \frac{4\beta J N}{4N^2} \le \frac{\ln Z_{2N}}{4N^2} \le \frac{4 \ln Z_N}{4N^2} + \frac{4\beta J N}{4N^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\ln Z_N}{N^2} - \frac{\beta J}{N} \le \frac{\ln Z_{2N}}{4N^2} \le \frac{\ln Z_N}{N^2} + \frac{\beta J}{N}$$

$$-\frac{1}{\beta} \frac{\ln Z_N}{N^2} + \frac{J}{N} \ge -\frac{1}{\beta} \frac{\ln Z_{2N}}{4N^2} \ge -\frac{1}{\beta} \frac{\ln Z_N}{N^2} - \frac{J}{N}$$

$$\Rightarrow f_N - \frac{J}{N} \le f_{2N} \le f_N + \frac{J}{N}$$

$$-\frac{J}{N} \le f_{2N} - f_N \le \frac{J}{N} \Rightarrow |f_{2N} - f_N| \le \text{const} \frac{N}{N^2} \sim \frac{L}{\Sigma}$$

$L = N$ - perímetro
$\Sigma = N^2$ - área

$\Rightarrow$ propriedades do todo - propriedades do subsistema $\propto$ fronteira

$\Rightarrow$ efeitos desaparecem qdo $N \to \infty$

$\Rightarrow$ energias livres específicas formam sequência de Cauchy.