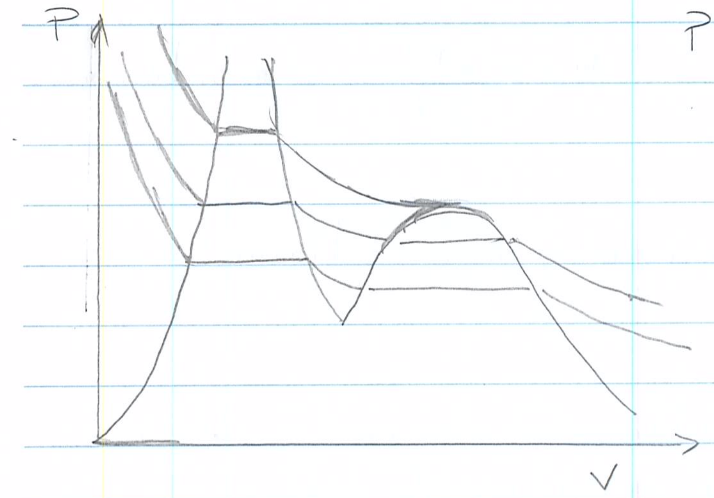
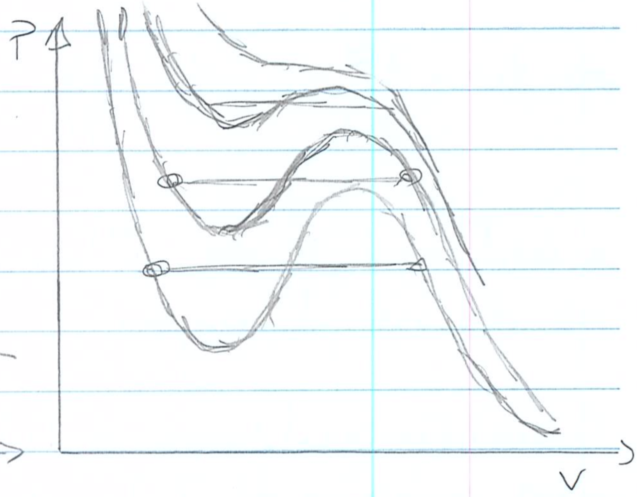
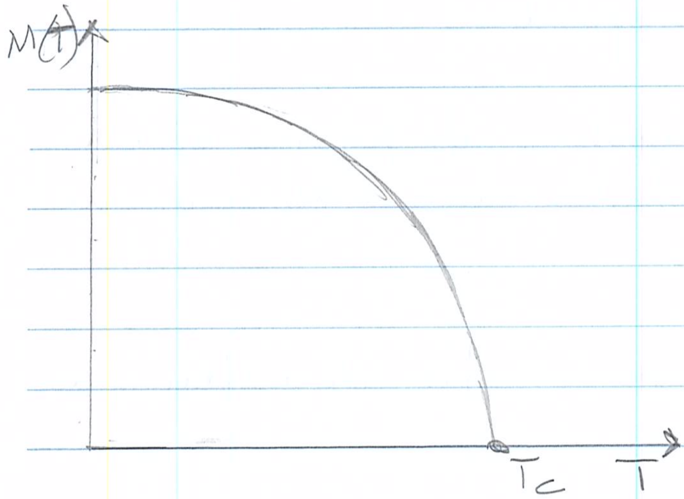
/ /

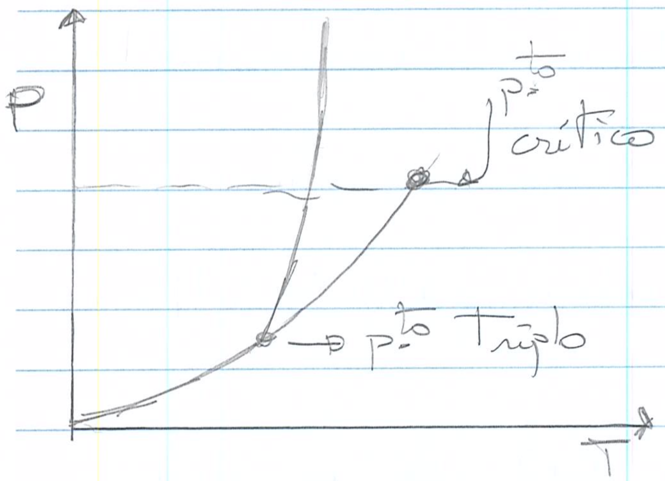
Fenômenos críticos







→ Transição contínua



→ (P_c, T_c)

P_c - fixo

$T > T_c$ até $T < T_c$

→ Transição contínua -

/ /

Transição de 1ª ordem (descontínua) $\Rightarrow$

$\Rightarrow S = -\dfrac{\partial F}{\partial T}$, $V = \dfrac{\partial G}{\partial P}$ $M = -\dfrac{\partial F}{\partial H}$ descontínuas

x contínua onde 1ᵃˢ derivadas são contínuas mas as demais divergem.

Transições contínuas → interação de curto alcance, mas, próximo de $T = T_c$, o comprimento de correlação $\xi(T) \to \infty \Rightarrow$ fenômenos cooperativos

Diferentes sistemas se comportam de forma similar $\Rightarrow$ universalidade ⇝ diferentes classes de universalidade.

Dois conceitos importantes: parâmetro de ordem e quebra de simetria.

$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ é invariante por rotação mas

se $T < T_c$ → $\exists \vec{M}$ sistema invariante em torno de $\vec{M}$ $\Rightarrow$ alta simetria → baixa simetria

$\vec{M}$ é o parâmetro de ordem e $|\vec{M}(T \to T_c)| \to 0$ continuamente.

Comportamento quando $T \to T_c$ foi um desafio teórico por muitos anos até o advento do Grupo de renormalização.

Mais Ising

Em $D=1$ pode-se calcular a magnetização como:

$$M(T) \propto \frac{\partial \ln \lambda^{(+)}}{\partial B} \propto \frac{\sinh \beta\mu B}{\sqrt{\sinh^2(\beta\mu B) + e^{-4J\beta}}} \to 0 \quad \text{se } B \to 0$$

$\Rightarrow$ não há magnetização espontânea em 1-D.

Argumento de Peierls:

Seja $f = \lim_{N\to\infty} \frac{F_N}{N} = \lim_{N\to\infty} -\frac{kT}{N}\ln Z_N$

$\Rightarrow M = \sum_{i=1}^{N} \frac{\langle S_i \rangle}{N} = 0$ em campo $B=0$.

D=1

em $T=0$ $+1$ spins

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \to$ 1º estado excitado $\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\ldots$

$E_0 = -NJ$ $\quad E_1 = -(N-2)J + 2J = -NJ + 4J$

$\Rightarrow$ 2 kinks $\Rightarrow E = 4J$ independente dos spins down

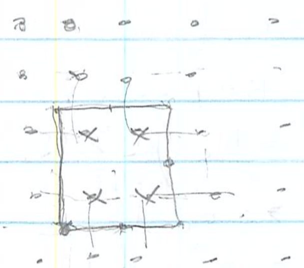
entropia $= 2k \ln N = k \ln \Omega$ onde $\Omega = N(N-1)/2$

$\Rightarrow F = 4J - 2kT \ln N$

$\Rightarrow$ p/ N grande o suficiente: $F(2 \text{ kinks}) < F_0$

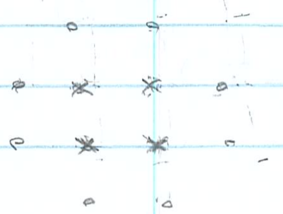
$\Rightarrow \langle M \rangle = 0$!

D=2



perímetro $b \Rightarrow 2bJ$ é o custo energético

$-(N-b)J + bJ = 2bJ$



$\nu(b) \leq N\, 3^{b-1}$

$F \approx 2bJ - kT\left[\ln N + b\ln 3\right]$

Se $F \approx -kT\ln N + (2J - kT\ln 3)\,b < 0$

$\Rightarrow \quad b < \dfrac{kT\ln N}{2J - kT\ln 3}$

Para $T < 2J/k\ln 3$ domínios com spin <0 terão probabilidade desprezível se $b > b_{máx} \sim \ln N$

% de spins down: $\dfrac{(\ln N)^2}{N} \to 0$

Argumento mais rigoroso: Peierls

se $T < T_c$ finito $\Rightarrow \langle S_z \rangle_{(-)} < 1/2$

Solução de Onsager: (cap XV - Huang)

$$f = kT\,\frac{1-x^3}{2} - \frac{kT}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} dp_x\, dp_y \ln\left[(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2)(\cos p_x + \cos p_y)\right]$$

com $x = \tanh\dfrac{J}{kT}$

argumento do ln se anula quando

$\cos p_x = \cos p_y = 1$ e $(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2) =$

$= (x^2 - 2x - 1)^2 = 0 \Rightarrow$

$x = \sqrt{2} - 1$

$\Rightarrow \sinh\dfrac{2J}{kT_c} = 1 \Rightarrow kT_c = \dfrac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.27\,J$

Calor específico: $C \propto \ln|T - T_c|$

$$M(T) = \left(1 - \left[\sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]^{-4}\right)^{1/8}$$

$\Rightarrow M(T) \propto (T_c - T)^{1/8}$

$H \to H' = -J\sum S_iS_j - \mu B\sum_i (S_i - 1)$

$= H_0 - \mu B\sum(S_i - 1)$

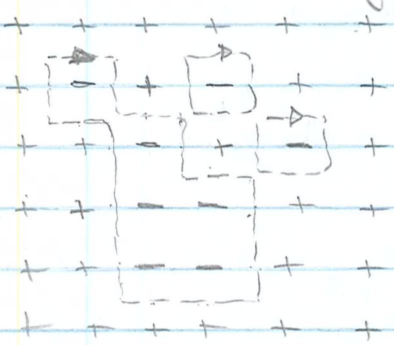
$z = e^{-2\beta\mu B}$

$Z_N = \sum_{n=0}^{N} z^n Q_n$

$z \equiv (Z_N)^{1/N}$ só se anula $(f \to \infty)$ se $|z| = 1 \Rightarrow B = 0$

Função de correlação

Modelo de Ising:



$\longleftrightarrow \quad \mathcal{C} = \{ P_{b_1}^{(j_1)} \dots P_{b_n}^{(j_n)} \dots \}$

perímetro b e índice j.

$\nu(b) \le N\, 3^{b-1}$

Peierls: $\hat{M}_N(0)$

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

$\hat{M}_N(0) \ge \alpha > 0$

se $T < T_c$

finito!

$$\sum_{\mathcal{C}} = \sum_{s_1=\pm1} \sum_{s_2=\pm1} \dots \sum_{s_N=\pm1}$$

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{\mathcal{C}} s_i s_j e^{-\beta H}$$

$\Rightarrow \quad B = 0$ e $D = 1$ $\qquad N$ spins e $K = \beta J$

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1=\pm1} \dots \sum_{s_N=\pm1} e^{K(s_{i-1} s_i)} [s_i] e^{K(s_i s_{i+1})} \dots e^{K(s_{j-1} s_j)} [s_j] e^{K(s_j s_{j+1})} \dots$$

Mas $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ e $\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{K} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K} \end{pmatrix}$

(Lembre-se que se $B \neq 0$ $\quad T(s_i, s_j) = \begin{pmatrix} e^{K+K'} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K+K'} \end{pmatrix}$

$K' = B\mu\beta$ e $Z = \sum_{s_1} \dots \sum_{s_N} \prod_{i=1}^{N} T(s_i, s_{i+1})$)

$$(\sigma_z \mathcal{T})_{s_k s_l} = s_k \mathcal{T}_{s_k s_l}$$

Se $R \mathcal{T} R^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_{(+)} & 0 \\ 0 & \lambda_{(-)} \end{pmatrix} = \mathcal{D} \Rightarrow R = R^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

$$\mathrm{Tr}\, \mathcal{T}^N = \mathrm{Tr}\left(R^{-1} \mathcal{D} R R^{-1} \mathcal{D} \dots \mathcal{D} R \right) = \mathrm{Tr}\, \mathcal{D}^N = \lambda_{(+)}^N + \lambda_{(-)}^N$$

882

$j > i$

$\mathrm{Tr}\left[\mathcal{T}^{i}\, \sigma_z\, \mathcal{T}^{j-i}\, \sigma_z\, \mathcal{T}^{N-j} \right]$

$= \mathrm{Tr}\left[\dots \mathcal{D} R \sigma_z R^{-1} \mathcal{D} \dots \mathcal{D} R \sigma_z R^{-1} \mathcal{D} \dots \right]$

Como $R\sigma_z R^{-1} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ teremos

$$\sigma_x \mathcal{D}^{(j-i)} \sigma_x = \sigma_x \begin{pmatrix} \lambda_{(+)}^{j-i} & 0 \\ 0 & \lambda_{(-)}^{j-i} \end{pmatrix} \sigma_x = \begin{pmatrix} \lambda_{(-)}^{j-i} & 0 \\ 0 & \lambda_{(+)}^{j-i} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \langle S_i S_j \rangle = \lim_{N\to\infty} \frac{\lambda_{(+)}^{N-j+i}\lambda_{(-)}^{j-i} + \lambda_{(-)}^{N-j+i}\lambda_{(+)}^{j-i}}{\lambda_{(+)}^{N} + \lambda_{(-)}^{N}}$$

$$= \lambda_{(+)}^{-N}\left[\lambda_{(+)}^{N-j+i}\lambda_{(-)}^{j-i} + \lambda_{(-)}^{N-j+i}\lambda_{(+)}^{j-i}\right] = \left[\frac{\lambda_{(-)}}{\lambda_{(+)}}\right]^{j-i} + \left[\frac{\lambda_{(-)}}{\lambda_{(+)}}\right]^{N-j+i} \xrightarrow[N\to\infty]{} \left[\frac{\lambda_{(-)}}{\lambda_{(+)}}\right]^{j-i}$$

se $i > j$ $\left(\frac{\lambda_{(-)}}{\lambda_{(+)}}\right)^{i-j}$

$$\Rightarrow \langle S_i S_j \rangle = (\tanh K)^{|i-j|} = \left(\coth \frac{J}{kT}\right)^{-|i-j|} = e^{-|i-j| \ln \coth \frac{J}{kT}}$$

ou $\langle S_i S_j \rangle = e^{-r_{ij}/\xi}$ onde $\xi = \dfrac{a}{\left|\ln \coth \frac{J}{kT}\right|}$

a = parâmetro de rede

$$\xi(T) \to \begin{cases} 0 & \text{se } T \to \infty \\ \infty & \text{se } T \to 0 \end{cases}$$ energia x entropia

Agora $D > 1 \Rightarrow H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \mu \sum_i B_i S_i$

$M_i = \langle S_i \rangle \Rightarrow M_i = \dfrac{1}{\beta\mu Z}\dfrac{\partial Z}{\partial B_i} = \dfrac{1}{\beta\mu}\dfrac{\partial \ln Z}{\partial B_i}$

e $\langle S_i S_j \rangle = \dfrac{1}{(\beta\mu)^2 Z}\dfrac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j}$

Função de correlação conexa: $G_{ij} \equiv \langle S_i S_j \rangle_c =$
$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \frac{1}{(\beta\mu)^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B_i \partial B_j}$

$\Rightarrow \begin{cases} Z \text{ é o gerador das correlações} \\ \ln Z \text{ é o gerador das correlações conexas.} \end{cases}$

Se $B = 0$; $G_{ij}\big|_{B=0} = \frac{1}{(\beta\mu)^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B_i \partial B_j}\Big|_{B=0}$

$$\frac{\partial M_i}{\partial B_j} = \frac{1}{\beta\mu} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B_i \partial B_j} = \beta\mu \, G_{ij}$$

Se $B_i = B$

$$\frac{\partial M_i}{\partial B} = \sum_j \frac{\partial M_i}{\partial B_j} \frac{\partial B_j}{\partial B} = \mu\beta \sum_j G_{ij}$$

Se $M = \langle S_i \rangle$ independente de i

$$\frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\mu\beta}{N} \sum_{ij} G_{ij} \Rightarrow \sum_j G_{ij} \text{ independente de } i$$

$$\sum_{ij} G_{ij} = \sum_{ij} \langle (S_i - M)(S_j - M) \rangle = \langle (S_{TOT} - NM)^2 \rangle \geq 0$$

$S_{TOT} = \sum_i S_i$ e $\chi \geq 0$

Análise de $D=1$ sugere que

$$r \to \infty \; ; \quad G(\vec{r}) = C(r)\, e^{-r/\xi}$$

onde $C(r)$ varia lentamente com r

Quebra de simetria:

se $D > 1$ e $T < T_c$ ⇒ estado tem simetria menor que H.
⇒ B finito → 0 e limite termodinâmico

Podemos fixar o spin na fronteira, p.ex.

$$\begin{matrix} + & + & + & + \\ + & & & + \\ + & & & + \\ + & + & + & + \end{matrix}$$

⇒ $\frac{1}{\sqrt{N}}$ do # total é afetado

e $\frac{1}{\sqrt{N}} \to 0$.

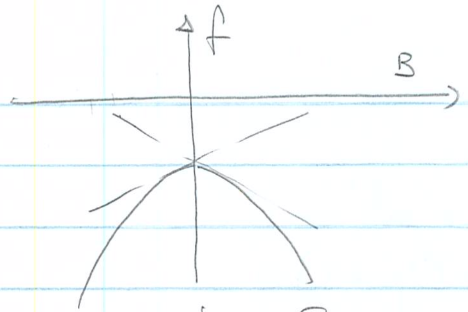
M que quebra a simetria é o parâmetro de ordem.
$M_i = \langle S_i \rangle$
função de correlação conexa ⇔ resposta.
resposta do spin em j se anula q. do $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \to \infty$
⇒ fisicamente $G_{ij} \to 0$ se $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \to \infty$
propriedade de aglomeramento.
Se $T < T_c$, estado depende do spin na fronteira ⇒ $M = \pm M_0$ (por spin)

Energia livre por spin: $f(B)$
i) $M = \frac{-1}{\mu} \frac{\partial f}{\partial B}$ e $\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \geq 0 \Rightarrow -\frac{\partial^2 f}{\partial B^2} \geq 0$

ii) ⇒ f é uma função côncava de B: $\frac{\partial^2 f}{\partial B^2} \leq 0$

e além disso é simétrica: $S_i \to -S_i$; $B \to -B$

iii) Yang e Lee: f só pode ser singular quando $B = 0$.



Duas hipóteses:

i) f é diferenciável em $B=0 \Rightarrow M_0 = 0$

ii) f não é diferenciável em $B=0 \Rightarrow$

$$M_0 = \lim_{B\to 0^+} -\frac{1}{\mu}\frac{\partial f}{\partial B} \quad e \quad -M_0 = \lim_{B\to 0^-} -\frac{1}{\mu}\frac{\partial f}{\partial B}$$

Se $T < T_c$, argumento de Peierls descarta (i)
$f_N(B)$ energia livre p/ spin se $B>0$ e $\hat{M}_N(B)$ a magnetização. ((1) condição de contorno de Peierls). Para todo N $\exists$ α tal que $\hat{M}_N(0) \geq \alpha > 0$. Como $\hat{f}_N$ é côncava

$$\hat{f}_N(B) \leq \hat{f}_N(0) - \alpha\mu B$$

$N \to \infty$, $f_N(B) \leq f(0) - \alpha \mu B$

$$\Rightarrow \lim_{B\to 0^+} \frac{\partial f}{\partial B} \leq -\alpha\mu.$$

$$\Rightarrow M_0 = \lim_{B\to 0^+} \lim_{N\to\infty} M_N(B) = \lim_{B\to 0^+} \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{\mu}\frac{\partial f_N}{\partial B}$$

M_0 e $\hat{M}_N(0)$ $(N\to\infty)$ são idênticas.
Diferença de energia entre $\pm M_0 = 2\mu N M_0 B \to \infty$
$\Rightarrow$ uma delas domina.

$$\langle A \rangle_{\pm} = \lim_{B\to 0^\pm} \lim_{V\to\infty} \frac{1}{Z}\sum_{\mathcal{C}} A e^{-\beta H} \quad \Big\} \text{ estados puros } (+) \text{ e } (-)$$

Se o sistema é invariante de translação mistura não leva a propriedade de aglomeramento.

$p \langle A \rangle_+ + (1-p) \langle A \rangle_-$

$\langle S_i S_j \rangle_p = p M^2 + (1-p) M^2 = M^2$

$\langle S_i \rangle_p = p M - (1-p) M = (2p-1) M$

$\langle S_i S_j \rangle_{cp} = 4 p (1-p) M^2$

Se $p \neq 0, 1$ $\langle S_i S_j \rangle_{cp} \not\to 0$ se $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \to \infty$

$\Rightarrow$ aglomeramento p/ $T < T_c$ $\Leftrightarrow$ $p = 0$ ou 1.

Expoentes críticos:

Vamos estudar os sistemas quando $T \approx T_c$!
χ e C_V divergem em T_c e a divergência é caracterizada por poucos parâmetros: os expoentes críticos.

Comprimento de correlação

$$\tilde{G}(\vec{q}) = \int d^D r \, e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} \, G(\vec{r}) \qquad (T.F.)$$

se $T \to T_c$, experimentalmente, constata-se que $G(r)$ onde $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ para $r \gg a$ parâmetro de rede. Para $\tilde{G}$, se $qa \ll 1$

$$\tilde{G}(\vec{q}) = \frac{1}{q^{2-\eta}} f(q\xi) \qquad \text{e} \quad \xi = K |T_c - T|^{-\nu}$$

$f(x) \to K'$ (finito) se $x \to \infty$

$\Rightarrow$ se $T = T_c$; $\tilde{G}(\vec{q}) = \dfrac{K'}{q^{2-\eta}}$.

Usando a TF-inversa

$$G(\vec{r}) = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} e^{-i \vec{q} \cdot \vec{r}} \frac{1}{q^{2-\eta}} f(q\xi)$$