

→ Materiais Paramagnéticos

As moléculas dos materiais aos que se refere na presença de um campo magnético, o momento de dipolo de cada um dos átomos que constitui esse material tende a se alinhar com o campo magnético externo.

Se este campo for suficientemente grande, todos os dipolos elementares ficam alinhados com o campo, gerando um magnetismo do material.

No entanto, ao retirar esse campo externo, tais materiais voltam a apresentar um magnetismo intrínseco nulo.

Os materiais que possuem esta característica, de alinhar as moléculas somente na presença de um campo magnético externo, são chamados de paramagnéticos.

Este efeito produzido pelos materiais é na compreensão da competição de dois tipos de Energia:

i) a energia térmica, que provém da agitação térmica (no caso de moléculas gasosas), que tende a desordenar as orientações magnéticas dos constituintes do material.

Esta energia possui valor médio dado por $E = k_B T$.

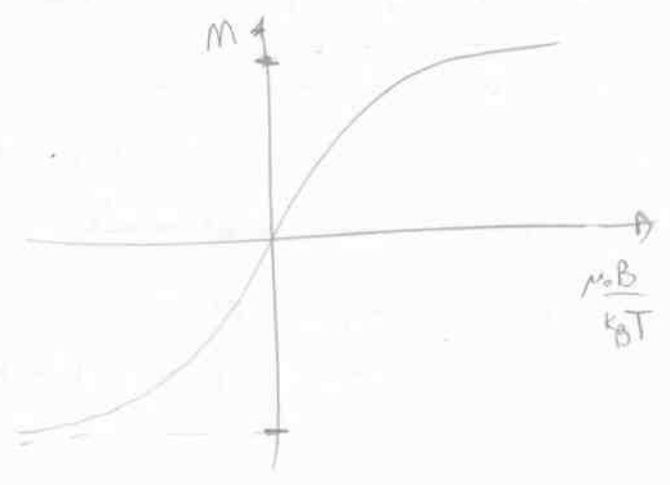
ii) A energia magnética proveniente da interação dos constituintes do material com o campo externo. Quanto maior o campo externo, maior é essa energia $E = \mu B$.

2

Desse jeito, quando
 muito grande a energia negativa
 em comparação a
 a energia térmica, o
 sistema tende a se
 ordenar, adquirindo uma
 negatividade.

No entanto, na ausência
 desse campo externo, a
 energia térmica é capaz
 de levar as moléculas
 a se desordenar, anulando
 o campo intrínseco das
 moléculas.

O gráfico abaixo ilustra
 essas dinâmicas



→ Materiais Ferromagnéticos

Alguns materiais, por exemplo
os Materiais paramagnéticos
por Ferro, Cobalto ou

Níquel apresentam um
tipo especial de
interação entre seus
átomos chamado de
"acoplamento de troca"

Este efeito faz com que
o momento magnético
entre dois átomos vizinhos
tenda a vencer a ^(tendência a desordem)
agitacão térmica e
alinharem-se.

Esses materiais, chamados
de ferromagnéticos,
apresentam, em consequência
microscópica desse efeito
magnético, um
alto grau de alinhamento
dos momentos magnéticos
direcionais levando a
uma magnetização

espontânea (intrínseca)
do material.

No entanto este efeito
só aparece quando a
agitacão térmica, ou
energia térmica é
suficientemente pequena.

Na verdade, a magnetização
espontânea desaparece subitamente
quando a temperatura
ultrapassa um certo valor
crítico, a ^{chamada} temperatura
de Curie.

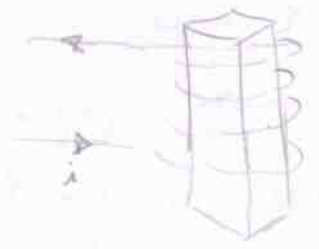
Abaixo desta temperatura,
as interações ~~entre~~ de troca
são anuladas pela
agitacão térmica. Neste
caso o material apresenta
características paramagnéticas

→ A temperatura de Curie é
dada por:

Ferro	:	1043 K	(770 °C)
Cobalto	:		(1075 °C)
Níquel	:		(365 °C)

→ Vamos agora entender experimentalmente o contexto do Ferromagnetismo.

Considere o espiral:



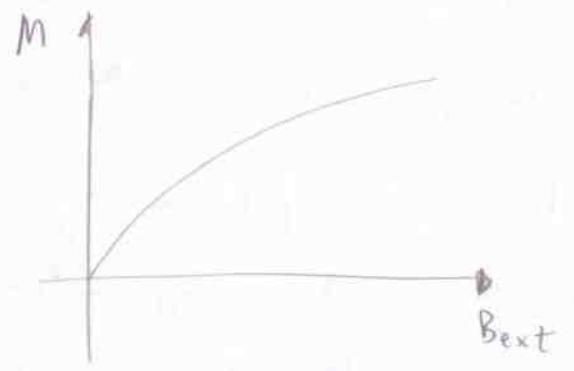
onde temos um material (e.g. Barra de Ferro) envolto por uma espiral com uma corrente i .

Considere M o campo magnetico intrinseco da Barra; B_{ext} o campo magnetico gerado pelas espiras.

Nessa forma o campo magnetico total no interior da espiral sera:

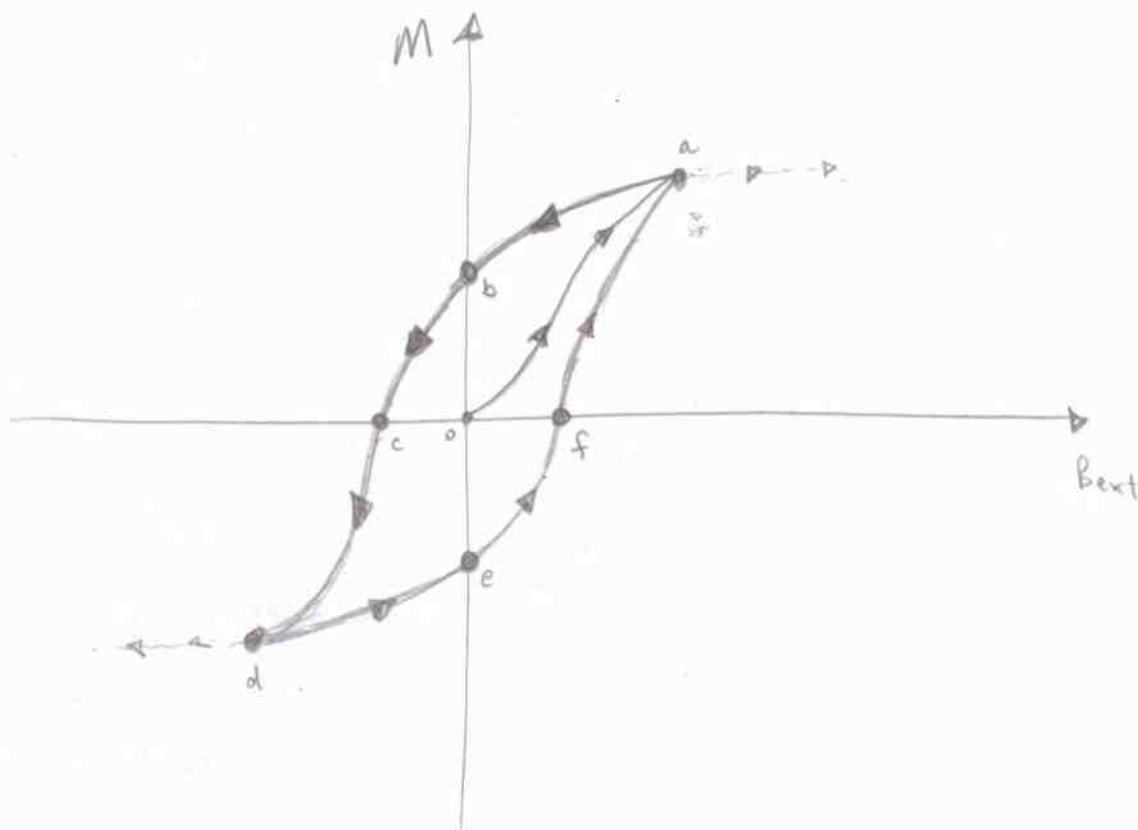
$$B_{tot} = M + B_{ext}$$

Observe - deste experimento que o valor de B_a aumenta com o valor de B_o , o que evidencia a magnetizacao da amostra com o campo externo



A Histerese

Uma propriedade importante dos materiais ferromagneticos e a chamada histerese, fenomeno relacionado com as curvas de magnetizacao do material. Para explicar o que significa histerese, vamos analisar a figura abaixo.



A figura acima representa as seguintes etapas de variação do campo externo B_{ext} e a consequente resposta magnética da barra de ferro.

1) Iniciamos o experimento com um campo externo nulo e com a amostra com magnetização intrínseca nula. Isso é, o ponto "o" da figura.

2) Em seguida introduzimos um campo externo positivo. A amostra, em resposta, adquire uma magnetização positiva após a trajetória

da barra de ferro.

Exatamente em a e a partir dele (linha tracejada) a amostra entra num regime de saturação de magnetização intrínseca. Neste caso todos os momentos magnéticos dos átomos da amostra se constituem o material entre abed, com o campo.

3) Vamos agora diminuir o campo externo até se tornar negativo. A amostra, em resposta, diminui sua magnetização intrínseca (trajetória ab) para esta

negativas e não se
 muda para $B_{ext} = 0$
 (parte b). Diz-se, neste
 caso, que a amostra
 possui uma "Magnetização
 residual". O material continua
 magnetizado, mesmo
 sem a presença
 do campo externo.

4) Uma agulha giratória em
 campo negativo até
 que a amostra volte
 a manter sua magnetização
 espontânea (trajeto BC)

Dessa forma, em c as
 linhas voltam a estar
 completamente desordenadas
 $M \approx 0$, mas agulha

com um campo externo
 não nulo $\nabla \nabla$.

Em ciência dos Materiais
 chama-se de "coercitividade"
 a intensidade necessária
 de um campo magnético
 externo necessário para
 reduzir a magnetização
 intrínseca do material a zero

após esse magnetização
 for alcançado a seta B_{ext} .
 Nas figuras, a coeritividade
 do material é

B_{ext} em "c" e "f"

Um material com alta
 coeritividade significa que
 ele tem mais chances
 resistir bastante a
 mudança de posição,
 exigindo um campo externo
 forte para sua
 desmagnetização.

5) Diminua ainda
 mais o campo externo
 (ainda negativo) ^(trajeto CD) a

magnetização intrínseca
 chega a uma nova
 saturação em d .

Os dois domínios estão
 totalmente alinhados no
 campo, mas agulha em
 direção oposta ao que estava
 em "a"

6) Nos curtos da
via e, f, tem
uma situação análoga
à trajetória da via
c e b.

Note se agora, depois
da equalização da
amostra, este não
volta mais para o
ponto 0 (pois não
há se retorna a
superfície etc).

Este processo, ~~é~~ é
característico dos
materiais ferro-magnéticos
e conhecido por
histerese.

→ O Modelo de Ising

O conteúdo hoje por "Modelo de Ising" foi inventado por Ising e seu estudante E. Ising em 1920. Este modelo foi introduzido para explicar os fenômenos magnéticos em materiais.

(*) Apesar das aproximações em sua formulação, este modelo apresenta resultados bem próximos com o observado experimentalmente.

Este modelo se mostra um dos mais importantes dentro e fora do campo da Mecânica Estatística, sendo citados em mais de 12.000 publicações entre 1969 e 1997. Entre estas

publicações destaca-se o enorme range de diversidade de áreas, sendo não só a da área de ciência dos materiais, a qual o modelo foi originalmente desenvolvido, mas também áreas como Neurociência, ciências biológicas, economia e ciências sociais, entre outras.

(*) O nome "Modelo de Ising" passou a representar o modelo desenvolvido por Ising e Ising depois da publicação de Perrenis de 1936, que tem como título:

"On Ising's Model of Ferromagnetism"

→ Modelo de Ising:

Resolva Exata em 1-D

O modelo de interações entre spins é dado pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

A taxa de desordenação de Ising, sob orientações de spin, é a versão desse modelo em uma dimensão.

O que nos leva a

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

(eq*)

pf $d=1$ e com condições periódicas de contorno:

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1$$

Nessa taxa, foi mostrado que o modelo não apresenta características ferro-magnéticas. Ou seja, o modelo não apresenta magnetização espontânea.

Vamos neste capítulo resolver este modelo para verificarmos se há ou não desordem.

→ A Matriz de Transferência

Vamos nesta seção resolver o modelo (eq*) via a chamada "Matriz de Transferência".

Primeiramente, note que podemos escrever

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1})$$

A Hamiltoniana fica então

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[-J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]$$

2) A função de partição deste sistema fica então como:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\left\{ +\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right\}} \quad \text{(eq. 1)}$$

Como os argumentos no exp. só dependem de σ_i e σ_{i+1} (além de outras grandezas constantes) vamos definir

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp \left\{ \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right\}$$

Note que $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ pode assumir apenas 4 valores:

$$T(1,1) = \exp \{ \beta J + \beta B \}$$

$$T(1,-1) = \exp \{ -\beta J \}$$

$$T(-1,1) = \exp \{ -\beta J \}$$

$$T(-1,-1) = \exp \{ \beta J - \beta B \}$$

Vamos então introduzir a matriz

$$\underline{T} = \begin{pmatrix} T(1,1) & T(1,-1) \\ T(-1,1) & T(-1,-1) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{pmatrix}$$

Esta matriz é a chamada "Matriz de Transporencia"

Comparando essa matriz com a função de partição (eq. 1) pode-se perceber que a função exponencial pode ser escrita como o traço (soma dos termos da diagonal principal) do produto de N matrizes de transporencia. Para mostrar isso vamos considerar o caso particular de $N=3$ partículas

Neste caso a função de partição fica:

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} \prod_{i=1}^3 T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$$

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} T(\sigma_1, \sigma_2) \cdot T(\sigma_2, \sigma_3) \cdot T(\sigma_3, \sigma_1)$$

o que resulta em

$$Z = T^3(-,-) + 3T(-,-)T^2(+,-) + 3T(+,+)T^2(+,-) + T^3(+,+) \quad (19. \nabla)$$

bastamos de mostrar que $Z = \text{tr}[\underline{T}^3]$. Para isso vamos calcular \underline{T}^3 que é

$$\underline{T}^3 = \begin{pmatrix} T^3(+,+) + 2T(+,+)T^2(+,-) + T(-,-)T^2(+,-) & ? \\ ? & T^3(+,+)T^2(+,-) + 2T(-,-)T^2(+,-) + T^3(-,-) \end{pmatrix}$$

Note como fazemos apenas o traço da matriz os termos (?) são termos que não há necessidade de ser calculados.
 O traço desta matriz fica então

$$\text{tr}[\underline{T}^3] = T^3(-,-) + 3T(-,-)T^2(+,-) + 3T(+,+)T^2(+,-) + T^3(+,+)$$

o que é idêntico à expressão (19. \nabla) e $\therefore Z = \text{tr}[\underline{T}^3]$

Para o caso geral temos

$$Z = \text{tr}[\underline{I}^N]$$

Ou seja, a função de partição pode ser interpretada como o traço do produto de N matrizes de transposição idênticas.

→ calculo de Z

Como \underline{I} é uma matriz simétrica, ela pode ser diagonalizada por meio de uma transformação do tipo.

$$\underline{U} \underline{I} \underline{U}^{-1} = \underline{D} \quad (\text{eq. 4})$$

onde $\underline{U}^{-1} = \underline{U}^t$

onde \underline{U}^t é a transposta de \underline{U} e \underline{D} uma matriz diagonal.

A eq. 4 também pode ser escrita como:

$$\underline{U}^{-1} [\underline{U} \underline{I} \underline{U}^{-1}] \underline{U} = \underline{U}^{-1} \underline{D} \underline{U}$$

$$\Leftrightarrow \underline{I} = \underline{U}^{-1} \underline{D} \underline{U}$$

Voltando à função de partição temos:

$$Z = \text{tr}[\underline{I}^N] = \text{tr}[\underline{I} \underline{I} \dots \underline{I}]$$

$$Z = \text{tr}[(\underline{U}^{-1} \underline{D} \underline{U}) (\underline{U}^{-1} \underline{D} \underline{U}) (\underline{U}^{-1} \underline{D} \underline{U}) \dots]$$

o que se simplifica a

$$Z = \text{tr}[\underline{U}^{-1} \underline{D}^N \underline{U}]$$

Mas como $\text{tr}[\underline{AB}] = \text{tr}[\underline{BA}]$

$$Z = \text{tr}[\underline{D}^N \underline{U} \underline{U}^{-1}]$$

$$\Leftrightarrow Z = \text{tr}[\underline{D}^N]$$

A matriz diagonal \underline{D} pode ser escrita em termos dos auto-valores (λ_1, λ_2) de \underline{T} da forma

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

o que implica que a função de partição toma a forma:

$$Z = \text{tr}[\underline{D}^N] = \text{tr} \left[\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N \right]$$

$$\text{LD } Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

Para determinarmos a função de partição basta determinar os auto-valores da matriz transposta.

→ Auto-Valores de \underline{T}

Os auto-valores de \underline{T} são aqueles que fazem

$$\det[\underline{T} - \lambda \underline{I}] = 0$$

onde $\underline{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ é a matriz identidade.

Desse modo precisamos calcular

$$\det \begin{vmatrix} T(1,1) - \lambda & T(-1,1) \\ T(-1,1) & T(-1,-1) - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

o que resulta na eq. de 2º grau:

$$\lambda^2 - \lambda e^{\beta J} (e^{\beta B} + e^{-\beta B}) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} = 0$$

o que resulta em duas raízes:

$$\lambda = e^{\beta J} \cdot \cosh(\beta B) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \cdot \cosh^2(\beta B) - 2 \sinh(2\beta J)}$$

(eq. 2)

6
→ Continuando o cálculo de Z

Agora se determinamos as autovalores de \underline{T} vamos determinar a função de partição

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right]$$

Note se como $N \rightarrow \infty$ é conveniente ignoramos o menor autovalor, digamos λ_2 , de modo que

$$\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \rightarrow 0 \quad \text{p/ } N \rightarrow \infty$$

o que resulta em

$$\lim_{N \rightarrow \infty} Z = \lambda_1^N$$

e dessa forma podemos obter o menor autovalor de \underline{T} .

Dessa forma usando o resultado (eq) temos

$$Z = \left[e^{\beta J} \cdot \cosh(\beta B) + 1 \right]^N$$

$$M = \frac{1}{N \beta J} \log Z$$

→ O Modelo de Ising ^{1-D} foi resolvido por Ising em 1925, e como nos ~~estamos~~ agora, ele percebeu que o modelo não apresentava transições de fase. Sendo assim ele concluiu que mesmo para dimensões maiores o modelo não apresentava transições de fase e consequentemente não poderia explicar o ferromagnetismo observado em alguns materiais.

→ Gube et al a Potts em 1936 percebeu que o modelo poderia sim exibir uma ~~transição~~ transição de fase no caso bidimensional. Em 1944 Lars Onsager resolveu o modelo para duas dimensões e demonstrou a transição de fase.

Teoria de Campo Médio

Resumo
para o Simo

- Fazer capítulo sobre "Modelo de Ising"
- Fazer capítulo: "Modelo de Ising 2-D Simulador Computacional"
- Fazer um capítulo sobre Mecânica Estatística em topics sistemas paramagnéticos
- No capítulo ?? apresentar o modelo de Ising ^{1-D}, dado pela Hamiltoniana
$$Z = -\mu B \sum_{i=1}^N \sigma_i - J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j \quad (*)$$
- o caso particular em que um sistema possui partículas não interagentes significa que a constante de acoplamento "J" é nula

o se resultar, para este caso mais simples, em Hamiltoniana
$$Z = -\mu B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Vimos no cap. ?? que esta simplificação

permite considerar os cálculos na Hamiltoniana mais completa (*) e mesmo assim consegue explicar o paramagnetismo. Isto pois verificamos que nesse caso

$$\langle \sigma \rangle = \tanh(\beta)$$



ou seja, o sistema se magnetiza na presença do campo externo h , bem na ausência de campo ($B=0$) a magnetização desaparece. Este é o caso de sistemas paramagnéticos.

Bem, não há nenhuma transição de fase nesse contexto.

Este caso simples nos diz nada sobre transições de fase.

vimos também no capítulo ??
 que ~~podemos~~ considerar
 interação entre primeiros
 vizinhos e uma rede de
 1-D. também não se
 observa uma transição.
 verificamos que:



→ O que vamos fazer neste
 capítulo é continuar a
 variar as possibilidades deste
 modelo, e tentar verificar
 em quais situações ele
 permite passar uma
 transição de fase, ou
 seja uma mudança
 de regularidade esperada
 do sistema mesmo na
 ausência de um campo
 externo.

→ Primeiramente vamos
 escrever a Hamiltoniana
 (*) de uma rede geral
 em d dimensões:

$$H = - \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} B(\vec{n}) - J \sum_{(\vec{n}, \vec{n}')} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}'} \quad (*)$$

onde \vec{n} pertence a uma
 rede hipercúbica.

A Hamiltoniana (*) é um
 caso particular das equações
 com $d=1$ ($\vec{n} \in \mathbb{R}^d$)

→ Teoria de Campo Médio

A hipótese de campo médio
 consiste em considerar que
 cada spin sente igualmente
 a influência dos ~~seus~~ spins
 vizinhos. De uma forma
 simplificada vamos dizer
 que cada spin vizinho sente
 um mesmo campo $\langle \sigma_{\vec{n}} \rangle \cdot J$
 sobre o spin que se encontra
 em \vec{n}

→ Desta forma o campo
 gerado pelos primeiros vizinhos
 do spin em \vec{n} é que o
 afeta assim:

$$J \cdot \sum_{\vec{n}' \text{ v. } \vec{n}} \sigma_{\vec{n}'}$$

Esta hipótese nos permite a troca

$$\prod_{\langle \vec{n}, \vec{n}' \rangle} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}'} \rightarrow \prod_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} \sum_{\vec{n}' \text{ p.v. } \vec{n}} \sigma_{\vec{n}'}$$

e portanto desacoplar o termo entre os spins.

→ Considerando estas um campo homogêneo $B(\vec{n}) = B$ e ~~termos~~

$$\beta \cdot \mathcal{H} = \underbrace{h \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}}}_{\text{campo externo}} + \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}} \underbrace{\beta J \sum_{\vec{n}' \text{ p.v. } \vec{n}} \sigma_{\vec{n}'}}_{\text{campo local}}$$

onde introduzimos $h \equiv \beta \mu B$
 Partindo o 1º termo à direita relacionado com o campo externo e o 2º termo à direita com o campo local em \vec{n}

Como os termos desacoplados, podemos analisar o sistema por meio do Hamiltoniano de um único spin i cuja Hamiltoniana

$$\beta \mathcal{H}_i = \sigma_{\vec{n}} \left[h + J \beta \sum_{\vec{n}' \text{ p.v. } \vec{n}} \sigma_{\vec{n}'} \right]$$

$$\text{ou } \beta \mathcal{H}_i = h_{\text{eff}} \sigma_{\vec{n}}$$

onde introduzimos o campo efetivo:

$$h_{\text{eff}} = h + K \sum_{\vec{n}' \text{ p.v. } \vec{n}} \sigma_{\vec{n}'}$$

onde introduzimos $K = \beta J$

Assumindo que $\sigma_{\vec{n}}$ tipicamente assume um valor médio

$$\sigma_{\vec{n}} \rightarrow \langle \sigma \rangle$$

temos

$$h_{\text{eff}} = h + K z \langle \sigma \rangle$$

onde z é o número de vizinhos de um dado sítio. Por exemplo, se consideramos apenas os primeiros vizinhos temos

$z = 2$ para $d = 2$ 

$z = 4$ para $d = 2$ 

$z = 6$ para $d = 3$ 

$$\therefore \boxed{z = 2 \cdot d}$$

Na rede hipercúbica

Voltaendo ao campo efetivo

temos,
$$h_{\text{eff}} = h + Kz \langle \sigma \rangle$$

onde o termo $Kz \langle \sigma \rangle$ é constante e representa a soma de muitos termos

desta mesma natureza de termos dos quais ele se origina (da soma $\sum_{i=1}^N \sigma_i$)

menor a flutuação, ou seja, menor a sua imprecisão.

Por exemplo, no caso de baixas dimensões, como $d=2$, temos uma soma sobre dois únicos termos (o spin na esquerda e o da direita). Nesse caso

a média capacitada flutua $\sum_{i=1}^N \sigma_i$, ou seja é muito diferente do valor real, dado por $\sum_{i=1}^N \sigma_i$

→ No limite em que $N \gg 1$ o valor de $\langle \sigma \rangle$ ~~é~~ é computado pela soma de muitos spins e portanto fica mais próximo a substituir das soma pela sua média

∴ A teoria de campo médio vai se tornando mais adequada a medida que $N \gg 1$.

→ Análise com Temperatura

Para a resolução da Hamiltoniana (?) via ensemble canônico, precisamos analisar o termo

$$\beta \mathcal{H}$$

e como termos obtidos com uma Hamiltoniana se se desacoplou (grupos a introdução da hipótese de campo médio) então precisamos do termo

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H}_1 &= \beta h_{\text{eff}} \sigma_i \\ &= [\beta h + \beta J z] \sigma_i \end{aligned}$$

ou $\beta \mathcal{H}_2 =$

→ Definição $K \equiv \beta J = \frac{J}{k_B T}$

$\therefore K Z = \frac{J Z}{k_B T}$

$[J]$: energia

$[k_B]$: energia / temperatura

$[K] = \left[\frac{J}{k_B T} \right] = \frac{\text{energia}}{\frac{\text{energia} \cdot \text{temp}}{\text{temp}}} = 1$

$[K]$: adimensional !!!

$[Z]$: adimensional

$\therefore \left[\frac{J Z}{k_B} \right]$: temperatura

Dessa forma podemos

dizer que

$K Z = \frac{t_c}{T}$ $t_c \equiv \frac{J Z}{k_B}$

onde t_c é uma espécie de temperatura característica do sistema

Mais adiante vai ficar claro que de se relacionar com

a temperatura de Curie, ou temperatura crítica, justificando o uso do termo t_c

→ Dessa forma temos que

$h_{\text{eff}} = h + \langle \sigma \rangle \frac{t_c}{T}$

→ A solução desse modelo nos dá que (calculo analogo ao feito no capítulo ??)

$\langle \sigma_i \rangle = \tanh h_{\text{eff}}$ *

→ Análise da solução *

Para o tratamento da tangente hiperbólica da eq. * vamos considerar que

h e $\langle \sigma \rangle$ são suficientemente pequenos

o que nos permite usar a expansão em

$\tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3} + \frac{2x^5}{15} \dots$

→ Usando apenas a aproximação de 1º ordem

$\langle \sigma \rangle \approx \langle \sigma_i \rangle \approx h_{\text{eff}} = h + \langle \sigma \rangle \frac{t_c}{T}$

$$\langle \sigma \rangle = h + \langle \sigma \rangle \frac{t_c}{T}$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{h}{1 - t_c/T}$$

o que mostra uma singularidade em $T = T_c$

o que mostra que $t_c = \frac{Jz}{k_B}$

é uma temperatura crítica

Note que:

P/ $(T > T_c)$ $\langle \sigma \rangle$ e h

possuem a mesma direção, o que é plausível fisicamente

P/ $(T < T_c)$ $\langle \sigma \rangle$ e h

possuem sinais diferentes, o que é impossível fisicamente !!

→ a outra particularidade interessante de se analisar é a susceptibilidade negativa

$$\chi = \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial h} \Big|_T$$

$$\chi = \frac{1}{1 - t_c/T}$$

para $T < T_c$ a cf. acima também não faz sentido (aumenta-se o campo e o sistema, em resposta, diminui a magnetização)

→ Para se ter ocorrência física, a susceptibilidade negativa deve ser sempre positiva

Para ilustrar isso, vamos considerar a flutuação da magnetização.

→ Esse fato mostra que algumas considerações que fizemos até agora não são muito boas.

Por exemplo, consideramos que $\langle \sigma \rangle$ é muito pequeno e que não deve ser "forçado"

$\langle \sigma \rangle$ nunca será 1 (tal qual a consideramos)

→ Ausência de Campo Externo

Vamos agora nos restringir ao caso em que o campo externo é nulo: $B=0$

$$\Leftrightarrow h = \beta \mu \cdot B = 0$$

Neste caso, o campo efetivo de um particular spin se restringe aos efeitos de sua vizinhança.

Da equação (??) temos

$$\boxed{h_{\text{eff}} = \frac{t_c}{T} \langle \sigma \rangle}$$

para campo externo nulo.

e portanto o sistema apresenta como solução

$$\boxed{\langle \sigma \rangle = \tanh\left(\frac{t_c}{T} \langle \sigma \rangle\right)}$$

eq. 11

Esta equação transcendente pode ser resolvida numericamente graficamente

→ Considere

$$x = \langle \sigma \rangle$$

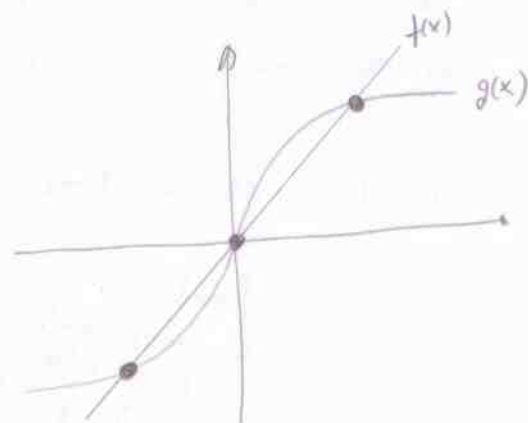
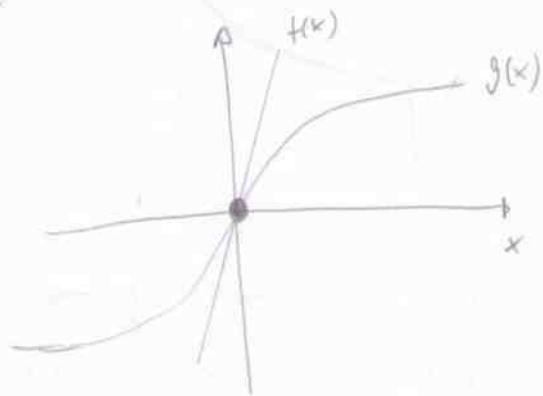
$$\Leftrightarrow x = \tanh\left(\frac{t_c}{T} x\right)$$

Vamos então chamar

$$f(x) = x$$

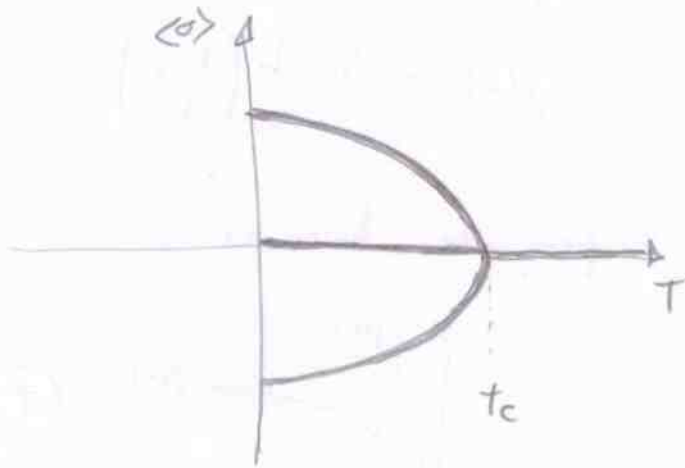
$$g(x) = \tanh\left(\frac{t_c}{T} x\right)$$

Graficamente temos:



→ As soluções da eq. 11 são os pontos de cruzamento entre as funções $f(x)$ e $g(x)$ marcados pelo ponto cheio (•) das figuras acima. Note que p/ $T \geq t_c$ existe apenas uma solução e p/ $T < t_c$ existem duas

Plotando as soluções das
equações teremos:



Para $T \geq T_c$ temos apenas
uma solução: $\langle \sigma \rangle = 0$
(estado desordenado, ausência
de magnetização)

Para $T < T_c$ temos duas soluções

$\langle \sigma \rangle = 0$ (solução
instável
para estas
temperaturas)

$\langle \sigma \rangle \neq 0$ (duas soluções
estáveis)

\therefore O modelo prevê uma
magnetização espontânea
 $\langle \sigma \rangle \neq 0$ para $T < T_c$

→ O Algoritmo de
Metropolis, para
simular o Modelo de
Ising

→ Vamos nesta vez introduzir um dos algoritmos computacionais mais bem sucedidos para simular sistemas físicos.

→ O algoritmo de Metropolis é introduzido por (??) em (??) para o estudo de (??)

Para simular o modelo de Ising 2D vamos considerar uma rede quadrada $L \times L$ formada por $N = L^2$ sítios, cada sítio "i" podendo assumir dois valores $\sigma_i = \pm 1$. Cada sítio representa um spin de Ising, que pode assumir um de dois estados possíveis.

→ A simulação inicia-se gerando aleatoriamente a configuração inicial da rede.

A Hamiltoniana deste sistema pode ser calculada por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{\sigma_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

que é numericamente idêntica à energia do sistema.

→ Vamos então escolher, aleatoriamente, um sítio (spin) candidato a mudar de estado.

Suponha que o sítio escolhido seja o sítio "k", este sítio pode ou não mudar de estado de acordo com a seguinte regra:

$$(\sigma_k \rightarrow -\sigma_k)$$

→ Calcule a Hamiltoniana da configuração candidata:

$$\mathcal{H}(\{\sigma_i\}_{i \neq k}, -\sigma_k) \equiv \mathcal{H}^{\text{candidata}}$$

→ Calcule a diferença

$$\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}^{\text{candidata}} - \mathcal{H}$$

2) ΔH é a variação de energia associada à mudança de sinal do spin

$\Delta H \leq 0$ significa

que a energia decresce caso a mudança de estado de σ_k^0 seja efetuada, o que não poderia acontecer se H_{cand} é um estado energeticamente mais elevado que o estado representado por X

Dessa forma, se $\Delta H \leq 0$ o novo estado de $\sigma_k^{(1)}$ será de fato $-\sigma_k^0$, ou seja

$$\sigma_k^1 = -\sigma_k^0$$

enquanto que os outros spins permanecerão como antes

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{i/k}^{(1)} = \sigma_{i/k}^0 \end{array} \right\};$$

Admitindo, se $\Delta H > 0$, ou seja para H_{cand} energeticamente menos elevado que o original, então não a descartamos de imediato. Neste caso, vamos definir $p = e^{-\beta \Delta H}$ onde $\beta = 1/k_B T$

(Construído baseado na distribuição de Boltzmann, que nos dá a probabilidade de encontrar o sistema numa certa configuração associada a um nível de energia).

e gerar um número aleatório $R \in [0, 1]$

Se $R \leq p$ então

$$\sigma_k^1 = -\sigma_k^0$$

ou seja, aceitamos o estado candidato

Caso contrário ($R > p$)

$$\sigma_k^1 = \sigma_k^0, \text{ ou seja,}$$

o estado não se altera.

Para cada iteração o processo de acordo com o seguinte algoritmo (Metropolis):

for $t = 1, 2, 3, \dots, t_{max}$

Sintetiza um sítio, digamos "K"

faça $\sigma_K^{act} = -\sigma_K^t$

Calcule $ZH(\sigma_K^t)$ e $ZH(\sigma_K^{act})$

Calcule $\Delta ZH = ZH^{act} - ZH$

Se $\Delta ZH \leq 0$

então $\sigma_K^{t+1} = \sigma_K^t$ (muda de estado)

Se $\Delta ZH > 0$

então sintetiza um novo membro $R \in [0, 1]$

e calcule $p = e^{-\beta \Delta ZH}$

Se $(p \geq R)$

então $\sigma_K^{t+1} = \sigma_K^t$ (muda de estado)

Caso contrário ($p < R$)

então $\sigma_K^{t+1} = \sigma_K^{(t)}$

(não muda de estado)

Após "t" ser chamado de passo de atualização.

É claro que os primeiros estados gerados (t pequenos) ainda refletem muito a configuração inicial.

Desse ponto, para se calcular valores médios de grandezas de interesse se faz necessário descartar.

os primeiros estados gerados para calcular estes médios.

Por exemplo, uma partícula de interesse i a seguir por partícula

$$m_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^t$$

Se descartarmos os primeiros t_{min} passos de atualização, podemos usar os restantes para calcular o valor médio \bar{m} por

$$\bar{m} = \frac{1}{t_{max} - t_{min}} \sum_{t=t_{min}}^{t_{max}} m_t$$

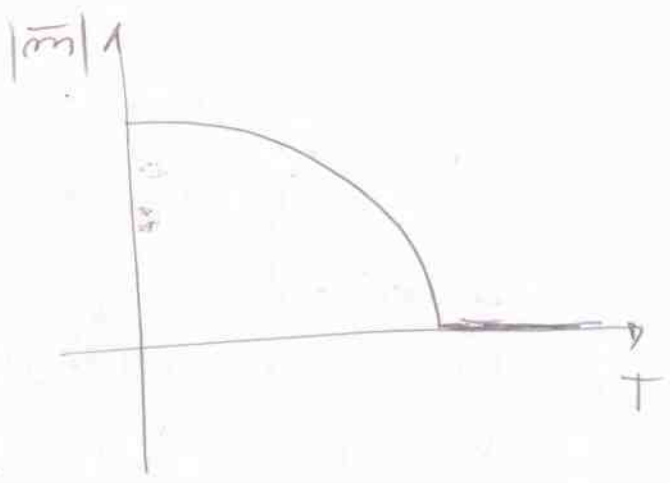
Procedimento análogo pode ser utilizado para calcular outras grandezas de interesse, como a susceptibilidade magnética, calor específico, ...

→ Resultados de Simulação

Nas simulações já discutidas aqui vamos utilizar $J=1$ e $K_B=1$ de modo a termos unidades reduzidas, sem perda de generalidade.

De modo a verificarmos a transição de fase paramagnética $\langle m \rangle = 0$ para ferromagnética $\langle m \rangle \neq 0$ vamos fazer simulação variando com diferentes temperaturas.

O gráfico a seguir apresenta o valor médio de magnetização $\langle m \rangle$ em função da temperatura para $B=0$ para podermos verificar se há realmente uma magnetização espontânea



para obtermos o valor absoluto de $\langle m \rangle$ para nos permitamos distinguir entre magnetização positiva ou negativa, na vez de outros interesses em magnetizações diferentes de zero (magnetização espontânea).

Note que $|\langle m \rangle| = 0$ para altas temperaturas (estado paramagnético) e $|\langle m \rangle| \neq 0$ para baixas temperaturas.

A temperatura na qual acontece esta mudança de comportamento, T_c (temperatura crítica) fica mais e mais evidente para maior N na rede.

for $t = 1, 2, 3, \dots, t_{max}$

sorteia um sítio, digamos "K"

faça $\sigma_K^{ad} = -\sigma_K^t$

calcule $ZH(\sigma_K^t)$ e $ZH(\sigma_K^{ad})$

calcule $\Delta ZH = ZH^{ad} - ZH$

se $\Delta ZH \leq 0$

então $\sigma_K^{t+1} = \sigma_K^t$ (muda de sítio)

se $\Delta ZH > 0$

então sorteia um número aleatório $R \in (0, 1)$

e calcule $p = e^{-\beta \Delta ZH}$

se $(p \geq R)$

então $\sigma_K^{t+1} = \sigma_K^t$ (muda de sítio)

caso contrário ($p < R$)

então $\sigma_K^{t+1} = \sigma_K^{(t)}$

(não muda de sítio)

Após "t" ser chamado de passo de atualização.

É claro que os primeiros estados gerados (t pequenos) ainda refletem muito a configuração inicial.

Desse forma, para se calcular valores médios de grandezas de interesse se faz necessário descartar.

os primeiros estados gerados para calcular estes médios.

Por exemplo, uma partícula de interesse é a seguinte por partícula

$$m_t = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^t$$

Se descartarmos os primeiros t_{min} passos de atualização podemos usar os restantes para calcular o valor médio \bar{m} por

$$\bar{m} = \frac{1}{t_{max} - t_{min}} \sum_{t=t_{min}}^{t_{max}} m_t$$

ou assíntota?

A uma pte oblíqua?
(and dimension) no
limite de $N \rightarrow \infty$.

→ Outras grandezas
físicas presentes nomenclaturas
em $T = T_c$, mas é o
caso de calor específico
ou da susceptibilidade
magnética, que podem
ser determinados por

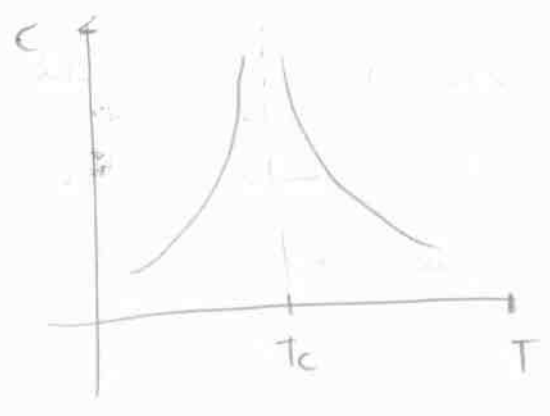
$$C = \frac{1}{N+2} \left[\overline{H^2} - \overline{H}^2 \right]$$

Provar
isso
!!!

$$\chi = \frac{1}{NT} \left[\overline{m^2} - \overline{m}^2 \right]$$

respectivamente.

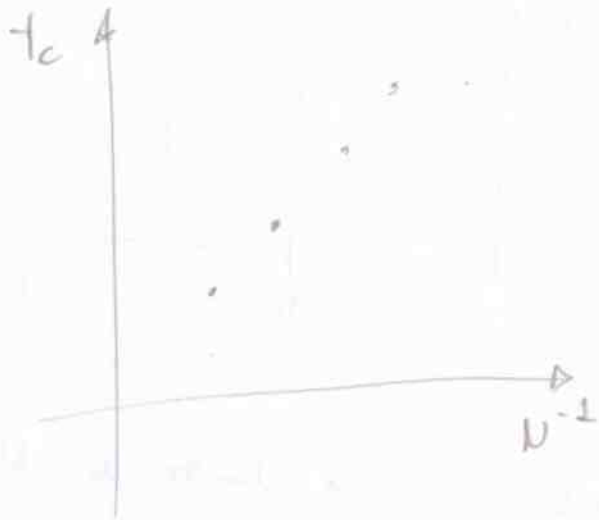
Os gráficos a seguir
mostram os comportamentos
destas grandezas em
função da temperatura



Note que no limite de $N \rightarrow \infty$
estas grandezas divergem
em $T = T_c$. Desta
forma a análise dessas
grandezas nos permite
determinar com uma
certa precisão o valor
da temperatura crítica.

fazendo t_c em função
de N^{-1} como é o
caso da figura ??

podemos determinar a
temperatura crítica



Neste caso o coeficiente
angular da reta nos
dá a temperatura
crítica ^{obtida} por simulação
dade por

$$t_c^{\text{experimental}} = ???$$

o t_c pode ser
comparado com a
temperatura crítica
conhecida na literatura
dade por

$$t_c^{\text{literature}} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2,2692$$