Modelo de Ising

Quase todos os experimentos indicam que os expoentes críticos são universais, mas assumem valores distintos dos previstos pela teoria de Landau.

O fato de os expoentes serem universais e não depender de modelos, indica que a analise de modelos simples podem levar a comportamentos críticos. Um destes modelos é o de Ising

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \rightarrow$$ proposto por Lenz e resolvido em 1D por Ising em 1925

O primeiro termo de interação entre primeiros vizinhos tenta ordenar o sistema. O segundo termo é de caráter paramagnético. Lembrando que o acoplamento $\sigma_i \sigma_j$ tem origem na interação Coulomb e anti-simetria de ψ e não na interação dipolar

Já resolvemos este modelo na aprox. de campo médio. Obtemos comportamento crítico mas com os expoentes de campo médio.

No entanto ele pode ser resolvido exatamente em 1D. Mas como veremos não há transição; só trivialmente em $T=0$ e $H=0$

Em 2 e 3D muitas técnicas de aprox. foram desenvolvidos. Mas deve-se ter cuidado com aprox. perturbativas já que queremos uma energia livre não-analítica no ponto crítico

Somente em 1944 Lars Onsager obteve uma solução analítica em 2D (numa rede quadrada sem campo externo) Ele mostrou que

$$C \sim \ln (T - T_c)$$

com $T_c = \frac{2J}{k_B} \left(\ln 1 + \sqrt{2} \right)^{-1}$

Assim pela primeira vez obteve-se um modelo microscópico com uma energia livre não analítica; portanto não pode ser escrita como uma expansão de Landau

Origem da não analiticidade foi explicada de forma geral por Yang e Lee

A solução em 3D continua um problema em aberto

Peierls tem um argumento para mostrar a existência de transição a uma T suf. baixa

Modelo de Ising tb descreve outros sistemas

1) ligas com dois tipos de átomos : ±1 indica a presença do átomo A ou B num sítio da rede

2) gás numa rede : ±1 indica a presença ou ausência de átomo (ou molec) no sítio

Solução Exata em 1-D

Queremos a função de partição

$$Z_N(T, H, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H}$$

$\{\sigma_i\}$ → soma sobre todas as conf. de spin

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} + L/2 \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1})}$$

com $K = \beta J$ e $L = \beta H$ e reescrevemos o termo $H \sum \sigma_i$ para torná-lo mais simétrico.

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^{N} e^{K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{L}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})}$$

$$= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} e^{K\sigma_1\sigma_2 + \frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} \; e^{K(\sigma_2\sigma_3) + \frac{1}{2}(\sigma_2+\sigma_3)} \dots$$

Cada termo pode assumir 4 "configurações" possíveis. Não temos um produto direto pq os termos não são independentes (1 e 2 dependem de σ_2 por exemplo)

Analisando vemos que temos um produto de matrizes. Definimos uma matriz

$$T_{\sigma_i \sigma_{i+1}} = e^{K\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})}$$

→ os elementos de matriz são rotulados pelos possíveis valores dos spins

$$T = \begin{pmatrix} e^{K+L} & e^{-K} \\ e^{K} & e^{K-L} \end{pmatrix}$$

$$Z = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} T_{\sigma_3\sigma_4} \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} =$$

A matriz T é chamada de matriz de transferência: "transfere" o efeito de um sítio ao próximo. Ela tem grande importância em diversos contextos de Física Est.

Para cond. de contorno periódicas o último termo é $T_{\sigma_N\sigma_1}$ e temos um traço do produto do produto de matrizes. Assim temos

$$Z_N = \mathrm{Tr}\left[T^N\right]$$

Como T é simétrica pode ser diagonalizada por uma transf. unitária

$$D = U T U^{-1}$$

Sendo λ_1 e λ_2 os autovalores de T e lembrando que Tr não depende da base temos

$$Z_N = Tr[\mathcal{D}^N] = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

Diagonalizando a matriz T (um problema simples) obtemos

$$\lambda_{1,2} = e^K \cosh L \pm [e^{2K} \cosh^2 L - 2 \sinh(2K)]^{1/2}$$

Pode-se mostrar que $\lambda_{1,2} \geq 0$ e $\lambda_1 > \lambda_2$.
Para campo nulo $H=0$ $(L=0)$

$$\lambda_{1,2} = e^K \pm \sqrt{e^{2K} - 2 \sinh 2K}$$
$$= e^K \pm \sqrt{e^{2K} - (e^{2K} - e^{-2K})}$$
$$= e^K \pm e^{-K}$$

$$\left.\begin{array}{l} \lambda_1 = 2 \cosh K \\ \lambda_2 = 2 \sinh K \end{array}\right\} \quad \lambda_1 \geq \lambda_2$$

Note que no limite $K \to \infty$ $(T \to 0)$ há uma degenerescência: $\lambda_1 = \lambda_2$

No limite termodinâmico temos

$$Z_N = \lambda_1^N \left[1 + \underbrace{\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N}_{<1} \right]$$

Assim

$$\lim_{N\to\infty} Z_N = \lambda_1^N$$

e

$$f = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_1$$

$$f = -k_BT \ln \left\{ e^{\beta J} \cosh \beta H + \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2 \beta H - 2 \sinh 2\beta J} \right\}$$

E vemos que f é uma função analítica de β e H

Com f pode-se obter todas as grandezas termodinâmicas.

A magnetização

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H} = \frac{\cancel{k_B T}}{e^{\beta J}\cosh\beta J + \sqrt{}}\left[e^{\beta J}\beta \sinh\beta H + \frac{1}{\cancel{2}}\frac{1}{\sqrt{}} e^{2\beta J}\cancel{2}\cosh\beta H \sinh\beta H (\cancel{\beta}) \right]$$

$$= \frac{e^{\beta J}\sinh\beta H}{e^{\beta J}\cosh\beta J + \sqrt{}}\left[\frac{\sqrt{} + e^{\beta J}\cosh\beta H}{\sqrt{}} \right]$$

$$= \frac{e^{\beta J}\sinh\beta H}{\left(e^{2\beta J}\cosh^2\beta H - 2\sinh 2\beta J\right)^{1/2}} = \frac{\sinh\beta H}{\left(\cosh^2\beta H - 1 + e^{-4\beta J}\right)^{1/2}}$$

$$m = \frac{\sinh\beta H}{\left(\sinh^2\beta H + e^{-4\beta J}\right)^{1/2}}$$

Para $H=0$ temos $m=0$ e não há ferromagnetismo. Mas note que

$$m(T\to 0, H) = \frac{\sinh\beta H}{|\sinh\beta H|} = \text{sgn}(H)$$

Ou seja, há magnetização (saturada) em $T=0$. Pode-se dizer que $T_c = 0$ no Ising 1D. Note que aparece uma não analiticidade na magnetização em $H=0$ (devido ao limite termodinâmico)

O susceptibilidade fica (em $H=0$)

$$\chi_0 = \frac{e^{2J/T}}{T}$$

Ou seja, diverge em $T=0$. Assim no suposto ponto crítico $T_c=0$ há uma divergência mas ela é exponencial

Para obter o calor específico, primeiro obtemos a entropia por spin $s = -\partial f/\partial T$

Para simplificar vamos estudar o caso $H=0$ onde

$$f = -k_B T \ln \left\{ e^{\beta J} + \sqrt{e^{2\beta J} - 2\sinh 2\beta J} \right\}$$

$$f = -k_B T \ln \left\{ e^{\beta J} \left(1 + \sqrt{1 - 1 + e^{-4\beta J}} \right) \right\}$$

$$f = -J - k_B T \ln \left\{ 1 + e^{-2\beta J} \right\}$$

logo

$$s = k_B \ln \left\{ 1 + e^{-2\beta J} \right\} + \cancel{k_B T} \frac{\left(2J/k_B T^2\right) e^{-2\beta J}}{1 + e^{-2\beta J}}$$

O calor específico $c = T\,\partial s/\partial T$ fica

$$C = k_B T \frac{2J}{k_B T^2} \frac{e^{-2\beta J}}{1+e^{-2\beta J}} + T \left[-\frac{2J}{T^2} \frac{e^{-2\beta J}}{1+e^{-2\beta J}} + \frac{2J}{T} \frac{-1}{\left(e^{2\beta J}+1\right)^2} \frac{2J}{k_B T^2} e^{2\beta J} \right]$$

$$C = 2k_B \frac{J}{k_B T} \frac{1}{e^{2\beta J}+1} - T \frac{2J}{T} \frac{1}{e^{2\beta J}+1} \left[\frac{1}{T} + \frac{2J}{k_B T^2} \frac{e^{2\beta J}}{e^{2\beta J}+1} \right]$$

$$C = 4k_B \left(\frac{J}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{2\beta J}}{\left(e^{2\beta J}+1\right)^2} = 4k_B \left(\frac{J}{k_B T}\right)^2 \frac{1}{\left(e^{\beta J} + e^{-\beta J}\right)^2}$$

$$C = k_B \left(\frac{J}{k_B T}\right)^2 \operatorname{sech}^2 \beta J$$

C é bem comportado

Vamos obter as correlações.
Primeiro obtemos

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \cdots T_{\sigma_{i-1}\sigma_i} \sigma_i T_{\sigma_i\sigma_{i+1}} \cdots T_{\sigma_N\sigma_1}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \cdots T_{\sigma_{i-1}\sigma_i} \left(\sum_{\sigma_i'} \delta_{\sigma_i\sigma_i'} \sigma_i \right) T_{\sigma_i'\sigma_{i+1}} \cdots$$

Note que $\delta_{\sigma_i\sigma_i'} \sigma_i \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma^z$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left[T^{i-1} \sigma^z T^{N-(i-1)} \right]$$

$$= \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left[\sigma^z T^N \right]$$

$\mathrm{Tr}[AB] = \mathrm{Tr}[BA]$

Do mesmo modo posso mostrar que

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left[T^{i-1} \sigma^z T^r \sigma^z T^{N-(i+r-1)} \right]$$

$$= \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left[\sigma^z T^r \sigma^z T^{N-r} \right]$$

É mais fácil fazer o cálculo na base onde T é diagonal.
Mas então σ^z não é mais diagonal. Temos

$$U \sigma^z U^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

E assim

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} \right]$$

$$= \frac{a\lambda_1^N + d\lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N}$$

No limite termodinâmico $N \to \infty$

$$\langle \sigma_i \rangle \to \frac{a\,\lambda_1^N}{\lambda_1^N} = a$$

Do mesmo modo pode-se mostrar que

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{a^2 \lambda_1^N + bc\left(\lambda_2^r \lambda_1^{N-r} + \lambda_1^r \lambda_2^{N-r}\right) + d^2 \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N}$$

Que no limite $N \to \infty$ fica

$$\lim_{N\to\infty} \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = a^2 + bc\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^r$$

A função de correlação conectada fica

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+r} \rangle = bc\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^r$$

$$= bc \exp\left[\ln(\lambda_2/\lambda_1)^r\right]$$

$$= bc\, e^{-r/\xi}$$

com $\xi = \dfrac{1}{\ln(\lambda_2/\lambda_1)}$

Para $H = 0$ temos

$$\xi = \frac{1}{\ln[\coth \beta J]}$$

E no limite $T \to 0$

$$\xi = \frac{e^{2J/T}}{2} \to \infty$$

Vemos que tal como χ, ξ diverge em $T=T_c=0$ mas de forma exponencial. Essas divergencias exponenciais são uma característica de sistemas que tem uma dimensão menor que a necessária para haver transição a $T \neq 0$. No caso do Ising (parâmetro de ordem é escalar) essa dimensão (chamada de crítica inferior) é igual a 1

Há um argumento geral (atribuido a Landau) de que não pode haver estado ordenado, e logo não pode haver transição, em uma dimensão com interações de curto alcance. Considere o estado fund. para $H=0$: todos os spin para cima e $U=-NJ$. O primeiro estado excitado é quando todos os spin a direita de 1 dado sitio são flipados aumentando a energia em $2J$: assim temos dois dominios no cadeia. um com spins up e outro com spins down. E tb temos o que é chamado de uma "parede de dominio" que é onde ocorre a mudança entre os dominios

$$\uparrow \uparrow \ldots \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \ldots \downarrow \downarrow$$

↳ parede de dominio

Essa excitação tb cria uma entropia $K_B \ln N$ já que existem N possiveis posições para a parede (pode-se flipar qualquer um dos N spins; há N microestados com energia $-NJ+2J$)

Assim a $T>0$ a mudança de energia livre devido a excitação de parede de dominio é

$$\Delta F = \Delta U - T\Delta S = 2J - K_B T \ln N$$

ΔF se torna <0 para um N suf. grande e a criação de paredes se torna favorável ($\Delta F<0$) impedindo um ordenamento do sistema. Pode-se checar que este argumento não funciona em 2D já que ΔU e ΔS são bem mais complicados. Uma analise mais complicada, devido a Peierls, mostra que há magnetização a $T \neq 0$ em 2D (Veja 14.3

do Huang). A existência de $m \neq 0$ em 2D é uma característica especial do modelo de Ising onde o parametro de ordem tem simetria discreta e só pode assumir 2 valores. Para parametros de ordem com simetria continua, Mermin e Wagner em 1966, provaram que não pode haver magnetização a $T \neq 0$ para dimensões $D \leq 2$ (para interações de curto alcance.

O caso especial de um parâmetro de ordem de 2 dimensões (acoplamento na direção x e y) e em $D=2$ exibe uma transição curiosa descoberta por Kosterlitz e Thouless em 1972: apesar de não haver correlação de longo alcance (função de correlação decai c/ lei de potência p/ $T<T_c$), vários grandezas, como χ, ξ, C_v, se tornam singulares em $T=T_c$. Além disso apesar de C_v ser singular (ñ analítico) todas as suas derivadas são finitas em $T=T_c$

Tb deve-se notar que podemos fazer o termo $\Delta U \propto N$ quando todos os spin interagem entre si ou a dimensão vai ao infinito; limites onde a teoria de campo médio é válido.

Ising com alcance infinito

Um caso interessante é quando a interação tem alcance infinito: cada spin interage com todos os outros. Veremos que neste caso obtemos rigorosamente a teoria de campo médio de Weiss. Uma outra situação onde isso tb ocorre é quando a dimensão tende a infinito. A aprox. de campo médio se torna exata nestas situações pq cada spin interage com um número infinito de outros spins. E pelo teorema do limite central as flutuações em torno do médio de uma soma de N termos aleatórios cresce com $\sqrt{N}$ e portanto a flutuação relativa cai com $1/\sqrt{N}$ e se torna desprezível quando $N \to \infty$.

A Hamiltoniana fica

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$

$\hookrightarrow$ temos que dividir J por N para que H seja extensivo ($\sum_i \sum_j$ tem N^2 termos) e o limite termodinâmico exista.

$$H = -\frac{J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - H \left(\sum_i \sigma_i \right)$$

A função de partição fica

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta J/2N \left(\sum_i \sigma_i\right)^2 + \beta H \left(\sum_i \sigma_i\right)}$$

$\to$ soma não fatora pq há termos de interação

$$\sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} e^{\beta J/2N \sum_i \sigma_i} e^{\beta J/2N \sum_j \sigma_j} e^{\beta H \sum_i \sigma_i}$$

$$\sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} \underbrace{\left(e^{\beta J/2N \sigma_1} e^{\beta J/2N \sigma_2} \ldots e^{\beta J/2N \sigma_N}\right)\left(e^{\beta J/2N \sigma_1} \ldots e^{\beta J/2N \sigma_N}\right)} e^{\beta H \sigma_1} \ldots e^{\beta H \sigma_N}$$

$$\neq \left(\sum_\sigma e^{\beta J/2N \sigma_1^2}\right)^N \Rightarrow \sum_{ij} \neq \left(\sum_i\right)^2$$

Para obter Z devemos usar a identidade gaussiana

$$e^{a x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{1}{4\pi a}}\, e^{-y^2/4a + xy}$$

Usando $x = \sum_i \sigma_i$

$$e^{(\beta J/2N)(\sum_i \sigma_i)^2} e^{\beta H \sum_i \sigma_i} = \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{2N}{\beta J}}\, e^{-\frac{N}{2\beta J} y^2 + (\sum_i \sigma_i) y} e^{\beta H \sum_i \sigma_i}$$

$$= \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy'\, e^{-N\beta J y'^2/2} e^{\beta(H + J y')\sum_i \sigma_i}$$

Fizemos a transf $y = \beta J y'$ (e voltamos a usar y como variável de integração)

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-N\beta J y^2/2} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta(H+Jy)\sum_i \sigma_i}$$

$$\sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} e^{\beta(H+Jy)\sigma_1} \ldots e^{\beta(H+Jy)\sigma_N}$$

$$\left(\sum_\sigma e^{\beta(H+Jy)\sigma}\right)^N$$

$$\left[2\cosh \beta(H+Jy)\right]^N$$

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-N\beta L(y)}$$

com $L(y) = \frac{J}{2} y^2 - \frac{1}{\beta} \ln\left[2\cosh \beta(H + Jy)\right]$

No limite $N \to \infty$ podemos calcular a integral usando o método do ponto de sela. Para isso devemos obter o ponto y_0 onde a derivada de $L(y)$ é nula

$$\frac{\partial L}{\partial y} = \bar{J} y - \frac{1}{\beta} \frac{2 \sinh \beta(\bar{J} y + H)}{2 \cosh \beta(\bar{J} y + H)} \beta \bar{J}$$

$$= \bar{J} \left[y - \tanh \beta(\bar{J} y + H) \right]$$

Que é nula em

$$y_0 = \tanh\left[\beta(\bar{J} y_0 + H)\right]$$

Essa é a eq. de campo médio de Weiss com $m \to y_0$.
Veja que

$$Z \approx e^{-N\beta L(y_0)}$$

e

$$f = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{\beta} \ln Z = L(y_0) \equiv \min_y L(y)$$

Assim $L(y_0)$ é um tipo de energia livre cujo mínimo dá o valor de eq. de m.
Assim obtemos a teoria de campo médio exatamente