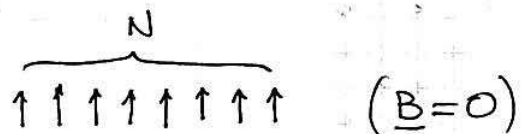


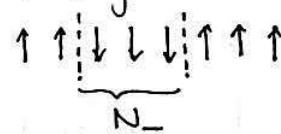
Si podemos calcular  $Q$ , podemos calcular la magnetización y buscar un cambio de fases. Antes vemos que no hay magnetización espontánea en 1D: (para  $T > 0$ )

Tenemos  $F = U - TS$

Si tengo una muestra



y a  $T > 0$  las fluctuaciones térmicas generan un dominio con los spins invertidos



$\Rightarrow \Delta U = +4J$

↖ 2 paredes con  $\uparrow \downarrow$ , c/u contribuye  $\Delta U = +2J$ , y  $B = 0$ .

Por otro lado  $S = k \ln \Sigma$

y la variación de entropía es proporcional a la forma de poner dos paredes en  $N$  sitios

$$\binom{N}{k} = \frac{N!}{2!(N-2)!} = \frac{N(N-1)}{2}$$

$$\Rightarrow S = k \ln N + k \ln(N-1) - k \ln 2 \approx 2k \ln N \quad N \gg 1$$

$$\Rightarrow \Delta F = \Delta U - TS = +4J - 2kT \ln N \approx -2kT \ln N$$

luego la energía libre decrece al crear un dominio  $\Rightarrow$  el sistema evoluciona al mínimo de  $F$  y termina con todos los spines desordenados.  $N \gg 1, T \neq 0$

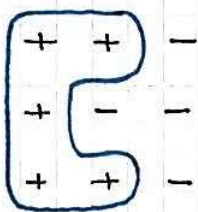
Veamos como calcular  $Q$  en el caso general.

Tenemos

$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta \left( J \sum_{\langle ij \rangle \text{ p.v.}} \sigma_i \sigma_j + \mu B \sum_i \sigma_i \right)}$$

¡Tenemos que contar cuantos spines +, -, ++, +-, y -- hay!

Consideremos un arreglo: Por ejemplo,



$$N_+ = 5$$

$$N_- = 4$$

$$q = 4$$

nro. de 1° vecinos.

Depende de la dimensión y la geometría de la red.

$$N_{++} = 6$$

1° vecinos ++

$$N_{--} = 4$$

1° vecinos --

$$N_{+-} = 8$$

1° vecinos +-  
" N\_-+

Los estados están degenerados y dependen de  $N_+, N_-, N_{++}, N_{--},$  y  $N_{+-}$ . Pero

$$N = N_+ + N_-$$

$$\gamma \quad \left\{ \begin{array}{l} q N_+ = 2N_{++} + N_{+-} \\ q N_- = 2N_{--} + N_{+-} \end{array} \right.$$

Ejemplo: para el arreglo anterior

$$q N_+ = 4 \cdot 5 = 2N_{++} + N_{+-} = 2 \cdot 6 + 8$$

$$q N_- = 4 \cdot 4 = 2N_{--} + N_{+-} = 2 \cdot 4 + 8$$

Podemos eliminar tres números

$$\left\{ \begin{array}{l} N_- = N - N_+ \\ N_{+-} = q N_+ - 2N_{++} \\ N_{--} = -q N_+ + N_{++} + \frac{q}{2} N \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow \sum_i \sigma_i = N_+ - N_- = 2N_+ - N$$

$$\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j = N_{++} + N_{--} - N_{+-} = 4N_{++} - 2q N_+ + \frac{q}{2} N$$

luego podemos reescribir H

$$H = -J \left( 4N_{++} - 2q N_+ + \frac{q}{2} N \right) - \mu B (2N_+ - N)$$

$$\gamma \quad Q = \sum_{N_+} \sum_{N_{++}(N_+)} \rho(N_+, N_{++}) e^{-\beta H(N_+, N_{++})}$$

$\uparrow$  nro. de pares ++ posibles dado  $N_+$   
 $\uparrow$  degeneración

$$\Rightarrow Q = e^{\beta N \left( \frac{q}{2} J - \mu B \right)} \sum_{N_+} e^{-2\beta N_+ (qJ - \mu B)} \sum_{N_{++}(N_+)} \rho(N_+, N_{++}) e^{4\beta N_{++} J}$$

Esto desacopla las sumas, pero el problema es calcular la degeneración  $\rho(N_+, N_{++})$ , que no es trivial.

Aproximación de campo medio:

Veamos el método aproximado de Bragg-Williams. Definamos dos magnitudes para cuantificar el orden "macroscópico" y "microscópico" de nuestra red.

$$L = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i = \frac{N_+ - N_-}{N} = 2 \frac{N_+}{N} - 1 \Rightarrow M = \mu N L$$

y por analogía

$$S = 2 \frac{2N_{++}}{gN} - 1$$

← "corto rango"  
 proporcional al nro. de pares ++  
 (normalizado por el nro. posible)

Con este cambio de variables

$$\begin{cases} \sum \sigma_i = NL \\ \sum \sigma_i \sigma_j = \frac{gN}{2} (2s - 2L + 1) \end{cases} \quad (1)$$

Vamos a aproximar esta segunda doble sumatoria por el campo medio generado por todos los spines

$$\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \approx \frac{g}{2} \langle \sigma \rangle \sum_i \sigma_i = \frac{gNL^2}{2} \quad (2)$$

↑ para no contar dos veces los pares

$$\Rightarrow Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta NL \left( \frac{gLJ}{2} + \mu B \right)} =$$

$$= \sum_{L=-1}^1 \binom{N}{N_+} e^{\beta NL \left( \frac{gLJ}{2} + \mu B \right)}$$

↑ formas de elegir  $N_+$  en  $N$ , con  $N_+ = \frac{N}{2}(L+1)$

Antes de seguir, veamos qué implica la aproximación de campo medio sobre el valor de  $s$ . De (1) y (2)

$$\sum \sigma_i \sigma_j = \frac{gN}{2} (2s - 2L + 1) \approx \frac{gNL^2}{2}$$

$$\Rightarrow s \approx \frac{1}{2} (L+1)^2 - 1 \Rightarrow \boxed{\frac{2N_{++}}{gN} \approx \left( \frac{N_+}{N} \right)^2}$$



y  $N_{++} \sim (N_+)^2 \Rightarrow$  no hay correlación de corto rango excepto por la generada por el largo rango. En otras palabras, no hay fluctuaciones.

Usando 
$$\binom{N}{N_+} = \frac{N!}{N_+!(N-N_+)!}$$

$$\Rightarrow Q = \sum_{L=1}^N \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(L+1)\right]! \left[\frac{N}{2}(1-L)\right]!} e^{\beta N L \left(\frac{g \bar{L} J}{2} + \mu B\right)}$$

Para calcular  $F$  necesito  $\ln Q$ . Para  $N \gg 1$

$$\ln Q \approx \ln \left\{ \max_L \left\{ \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(L+1)\right]! \left[\frac{N}{2}(1-L)\right]!} e^{\beta N L \left(\frac{g \bar{L} J}{2} + \mu B\right)} \right\} \right\}$$

$$\approx \ln N! - \ln \left[\frac{N}{2}(\bar{L}+1)\right]! - \ln \left[\frac{N}{2}(1-\bar{L})\right]! + \beta N \bar{L} \left(\frac{g \bar{L} J}{2} + \mu B\right)$$

$\bar{L}$ : valor que maximiza el término

y usando  $\ln N! \approx N \ln N - N = N(\ln N - 1)$

$$\Rightarrow \ln Q \approx N \left[ \ln N - 1 - \left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) \ln \left[\frac{N(\bar{L}+1)}{2}\right] + \frac{\bar{L}+1}{2} \ln \left[\frac{N(1-\bar{L})}{2}\right] + \beta \bar{L} \left(\frac{g \bar{L} J}{2} + \mu B\right) \right]$$

$$\boxed{\ln Q = N \left[ -\left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) \ln \left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) - \left(\frac{1-\bar{L}}{2}\right) \ln \left(\frac{1-\bar{L}}{2}\right) + \beta \bar{L} \left(\frac{g \bar{L} J}{2} + \mu B\right) \right]}$$

Veamos cuánto vale  $\bar{L}$ . Variando respecto a  $\bar{L}$  obtenemos

$$-\frac{\delta \bar{L}}{2} \ln \left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) - \frac{\bar{L}+1}{2} \cdot \frac{2}{\bar{L}+1} \cdot \frac{\delta \bar{L}}{2} + \frac{\delta \bar{L}}{2} \ln \left(\frac{1-\bar{L}}{2}\right) + \frac{1-\bar{L}}{2} \cdot \frac{2}{1-\bar{L}} \cdot \frac{\delta \bar{L}}{2}$$

$$+ \beta \delta \bar{L} \left(\frac{g \bar{L} J}{2} + \mu B\right) + \beta \bar{L} \frac{g J}{2} \delta \bar{L} = 0 \quad (3)$$

$$\Rightarrow \boxed{\ln \left(\frac{1+\bar{L}}{1-\bar{L}}\right) = 2\beta g \bar{L} J + 2\beta \mu B}$$

$$\text{ó} \quad \boxed{\bar{L} = \tanh \left( \beta \mu B + \beta g \bar{L} J \right)}$$