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

Tenemos $F = U - TS$

$$\overbrace{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{N} \qquad (\underline{B}=0)$$

Si tengo una muestra

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

$$\uparrow\uparrow\,\vdots\underbrace{\downarrow\downarrow\downarrow}_{N_-}\vdots\,\uparrow\uparrow\uparrow$$

$\Rightarrow \Delta U = +4J$

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

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

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

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

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

$$\Rightarrow \Delta F = \Delta U - TS = +4J - 2kT\ln N \underset{N\gg 1,\, T\neq 0}{\approx} -2kT\ln N$$

Luego la energía libre decrece al crear un dominio $\Rightarrow$ el sistema evoluciona al mínimo de F y termina con todos los spines desordenados.

Veamos <u>como calcular Q en el caso general</u>.

Tenemos
$$Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\left(J\sum_{ij/P.V.}\sigma_i\sigma_j + \mu B\sum_i \sigma_i\right)}$$
¡Tenemos que contar cuantos spines +, − ++, +−, y −− hay!

Consideremos un arreglo: Por ejemplo,

$$\begin{array}{ccc} + & + & - \\ + & - & - \\ + & + & - \end{array}$$

$N_+ = 5 \qquad N_{++} = 6$ ← 1° vecinos ++

$N_- = 4 \qquad N_{--} = 4$ ← 1° vecinos −−

$q = 4 \qquad N_{+-} = 8$ ← 1° vecinos +−

$N_{+-} = N_{-+}$

q: nro. de 1° vecinos. Depende de la dimensión y la geometría de la red.

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

$$N = N_+ + N_-$$

y $\begin{cases} qN_+ = 2N_{++} + N_{+-} \\ qN_- = 2N_{--} + N_{+-} \end{cases}$

Ejemplo: para el arreglo anterior $qN_+ = 4\cdot 5 = 2N_{++} + N_{+-} = 2\cdot 6 + 8$

$qN_- = 4.4 = 2N_{--} + N_{+-} = 2\cdot 4 + 8$

Podemos eliminar tres números

$$\begin{cases} N_- = N - N_+ \\ N_{+-} = qN_+ - 2N_{++} \\ N_{--} = -qN_+ + N_{++} + \frac{q}{2}N \end{cases}$$

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

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

Luego podemos reescribir H

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

y $$Q = \sum_{N_+} \sum_{N_{++}(N_+)} g(N_+, N_{++})\, e^{-\beta H(N_+, N_{++})}$$

nro. de pares ++ posibles dado N_+

degeneración

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

Esto desacopla las sumas, pero el problema es calcular la degeneración $g(N_+, N_{++})$, 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.

$$L = \overbrace{\frac{1}{N}\sum_i \sigma_i}^{\langle\sigma\rangle} = \frac{N_+ - N_-}{N} = 2\,\frac{N_+}{N} - 1 \quad \Longrightarrow \quad M = \mu N L$$

proporcional a N_+/N
"largo rango"

y por analogía

$$s = 2\,\frac{2N_{++}}{qN} - 1$$

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

Con este cambio de variables

$$\begin{cases} \sum \sigma_i = NL \\ \sum \sigma_i \sigma_j = \dfrac{qN}{2}\left(2s - 2L + 1\right) \end{cases} \qquad (1)$$

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

$$\sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \approx \frac{q}{2}\langle\sigma\rangle \sum_i \sigma_i = \frac{qNL^2}{2} \qquad (2)$$

para no contar
dos veces los pares

$$\Rightarrow \quad Q = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta N L \left(\frac{qLJ}{2} + \mu B\right)} =$$

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

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)

$$\sum \sigma_i \sigma_j = \frac{\cancel{qN}}{\cancel{2}}\left(2s - 2L + 1\right) \approx \frac{\cancel{qN}L^2}{\cancel{2}}$$

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

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

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

$$\Longrightarrow Q = \sum_{L=-1}^{1} \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(L+1)\right]!\,\left[\frac{N}{2}(1-L)\right]!}\, e^{\beta N L\left(\frac{qLJ}{2}+\mu B\right)}$$

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

$$\ln Q \approx \ln\left\{\max_{L}\left\{\frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(L+1)\right]!\,\left[\frac{N}{2}(1-L)\right]!}\, e^{\beta N L\left(\frac{qLJ}{2}+\mu B\right)}\right\}\right\}$$

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

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

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

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

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

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

$$-\frac{\delta\bar{L}}{2}\ln\left(\frac{\bar{L}+1}{2}\right) - \cancel{\frac{\bar{L}+1}{2}\cdot\frac{2}{\bar{L}+1}\cdot\frac{\delta\bar{L}}{2}} + \frac{\delta\bar{L}}{2}\ln\left(\frac{1-\bar{L}}{2}\right) + \cancel{\frac{1-\bar{L}}{2}\cdot\frac{2}{1-\bar{L}}\cdot\frac{\delta\bar{L}}{2}}$$
$$+\beta\,\delta\bar{L}\left(q\frac{\bar{L}J}{2}+\mu B\right) + \beta\bar{L}\frac{qJ}{2}\,\delta\bar{L} = 0 \qquad (3)$$

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

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