



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
Programa de Pós-Graduação em Física

Dissertação de Mestrado

**O Modelo de Ising na Cadeia Linear com Interações  
Competitivas de Longo Alcance**

Edgar Marcelino de Carvalho Neto

Março - 2009

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**O Modelo de Ising na Cadeia Linear com Interações  
Competitivas de Longo Alcance**

Edgar Marcelino de Carvalho Neto

Orientador: Professor Roberto Fernandes Silva Andrade

Dissertação apresentada ao Instituto  
de Física  
da Universidade Federal da Bahia  
para a  
obtenção do título de Mestre em  
Física.

Salvador – Março de 2009

O Modelo de Ising na Cadeia Linear com Interações  
Competitivas de Longo Alcance

Copyright 2009

By

Edgar Marcelino de Carvalho Neto

# Abstract

This work applies a transfer matrix method to study long-range Ising chains that have both ferromagnetic and antiferromagnetic interactions, the kind of interaction depends periodically on the range, and its intensity decreases as a power law.

This way it was possible to obtain thermodynamic properties of the chain like free energy, entropy and specific heat. Some interesting results were obtained by the calculation of thermodynamic properties like residual entropy.

However, the main subject of investigation is to test the validity of a conjecture proposed by Tsallis, which states that long-range systems scale in a way he proposed and that is explained along this work. These systems generally don't scale as usual, with respect to the number of constituents for all value of the exponent of the power-law interaction. This gives rise to divergences in the usual intensive thermodynamic functions.

The work also starts the study of phase transition of one of the chains presented here. The results are not conclusive, but indicate how it is possible to proceed in future works. This study involves analysis of the correlation function which is obtained with the transfer matrix method presented here. There were obtained some series of critical temperatures for finite chains of one of the cases presented here. With such values, it is possible to estimate the critical temperature for the infinite chain with techniques like Padé approximants.

# Resumo

Este trabalho emprega um método de matriz de transferência para estudar a cadeia linear de Ising com interações de longo alcance, podendo estas interações serem do tipo ferromagnéticas ou antiferromagnéticas; o tipo de interação varia periodicamente de acordo com a distância e sua intensidade decai com a distância como uma lei de potência.

Deste modo foi possível obter propriedades termodinâmicas do sistema como a energia livre, a entropia e o calor específico. Alguns resultados interessantes foram obtidos com o cálculo destas propriedades como a ocorrência de entropia residual.

Contudo o objeto de investigação principal desta dissertação é a validade de uma conjectura proposta por Tsallis que estabelece que sistemas com interações de longo alcance, como os deste trabalho, obedecem a um escalamento proposto por ele, a ser explicado ao longo deste trabalho. Estes tipos de sistema geralmente não obedecem ao escalamento usual, para todo valor do expoente de decaimento das interações, ocasionando divergências nas funções termodinâmicas intensivas usuais.

Também se iniciou um estudo da transição de fase para uma das cadeias apresentadas. Este estudo não é muito conclusivo, mas indica como se proceder em trabalhos futuros. Este estudo envolve análise da função de correlação, que é obtida com o método da matriz de transferência apresentado nesta dissertação. Foi obtida uma série de temperaturas críticas para cadeia finitas em uma das situações mostradas, e, com esses valores pode-se estimar a temperatura crítica da cadeia infinita com técnicas como a dos aproximantes do Padé.

# Índice

<b>Introdução.....</b>	<b>1</b>
<b>1. Exposição do problema.....</b>	<b>4</b>
1.1. O modelo de Ising .....	4
1.2. Tratamento do modelo de Ising.....	6
1.3. Definição do problema.....	8
<b>2. O escalamento de Tsallis .....</b>	<b>11</b>
2.1. Definição e discussão.....	11
2.2. Resultados preliminares sobre o escalamento de Tsallis.....	14
2.2.1. Resultado analítico .....	14
2.2.2. Resultados numéricos .....	17
<b>3. O método de matriz de transferência .....</b>	<b>19</b>
3.1. Digressões sobre o método .....	19
3.2. Versão preliminar .....	20
3.3. Versão adaptada do método.....	25
3.4. A introdução do campo magnético.....	30
3.5. A função de correlação e o critério de transição de fase.....	32
3.5.1. A função de correlação.....	33
3.5.2. O critério de transição de fase.....	37
3.6. Implementação computacional .....	38
<b>4. Resultados.....</b>	<b>40</b>
4.1. Quanto ao Escalamento de Tsallis.....	41
4.1.1. Caso I – $A(1,0)$ .....	41
4.1.2. Caso II – $F(5,1)$ .....	46
4.1.3. Caso III – $F(4,1)$ .....	50
4.1.4. Caso IV – $F(2,1)$ .....	53
4.1.5. Caso V - $(F(1,1)$ .....	57
4.1.6. Caso VI – $A(1,1)$ .....	60
4.2. Outras propriedades termodinâmicas .....	61
4.3. Transição de fase .....	65
<b>5. Conclusões e perspectivas.....</b>	<b>72</b>
<b>Referências.....</b>	<b>74</b>

# Lista de Figuras

Figura 1 – Energia livre em função da temperatura com escalamento normal e inset com o de Tsallis (caso A(1,0)). $\alpha=0$ , $c=0$ e $g=10, 14, 20$ .....	43
Figura 2 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento de Tsallis (caso A(1,0)). $\alpha=0,5$ (linhas cheias) e $\alpha=1,2$ (linhas tracejadas), $c=0$ e $g=17, 18, \dots, 21$ .....	43
Figura 3 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento de Tsallis (caso A(1,0)). $\alpha=0,5$ , $c=0$ e $g=17, 18, \dots, 21$ com $c=0$ . .....	44
Figura 4 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento normal (caso A(1,0)). $\alpha=0,5$ , $g=21$ e $c=0, 10, 20, \dots, 90$ .....	44
Figura 5 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(5,1)). $\alpha=0$ , $c=95$ e $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura.....	46
Figura 6 – Energia livre em função da temperatura no escalamento usual (caso F(5,1)). $\alpha=0,6$ , $c=99$ e $g=5, 10, 15, 20$ .....	47
Figura 7 – Energia livre em função da temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(5,1)). $\alpha=0,6$ , $c=99$ e $g=5, 10, 15, 20$ .....	47
Figura 8 – Energia livre em função da temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(5,1)). $\alpha=0,6$ , $g=20$ e $c=50, 55, 60, \dots, 95$ .....	48
Figura 9 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(4,1)). $\alpha=0$ , $c=95$ e $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura.....	50
Figura 10 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(4,1)). $\alpha=0,6$ , $c=95$ e $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura.....	51
Figura 11 – Energia livre em função da temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(4,1)). $\alpha=0$ , $g=24$ e $c=50, 55, 60, \dots, 95$ .....	51
Figura 12 – Energia livre em função da temperatura no escalamento normal (caso F(4,1)). $\alpha=0$ , $c=99$ e $g=5, 10, 15, 20$ .....	52
Figura 13 – Energia livre em função da temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(2,1)). $\alpha=0$ , $c=95$ e $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura. ....	54
Figura 14 – Energia livre contra a temperatura no escalamento normal (caso F(2,1)). $\alpha=0$ , $c=99$ e $g=5, 10, 15, 20$ . ....	54
Figura 15 – Energia livre em função da temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(2,1)). $\alpha=0,6$ , $g=21$ e $c=50, 55, 60, \dots, 95$ .....	55
Figura 16 - Energia livre em função da temperatura no escalamento normal (caso F(2,1)). $\alpha=0,6$ , $g=20$ e $c=55, 60, \dots, 95$ .....	55
Figura 17 – Energia livre em função da temperatura no escalamento normal (caso F(1,1)). $\alpha=0,1$ , $c=0$ e $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura.....	57
Figura 18 - Energia livre em função da temperatura no escalamento normal (caso F(1,1)). $\alpha=0$ , $c=0$ e $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada	



com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura.....	58
Figura 19 - Energia livre em função da temperatura com escalamento de Tsallis (caso $F(1,1)$ ). $\alpha=0$ , $c=0$ e $g=17, 18, \dots, 21$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores $g$ e $g+1$ para um valor fixo de temperatura.....	58
Figura 20 - Energia livre em função da temperatura no escalamento normal (caso $F(1,1)$ ). $\alpha=0,3$ , $g=24$ e $c=10, 20, \dots, 90$ .....	59
Figura 21 - Entropia em função da temperatura: caso $A(1,0)$ , $g=10$ , $c=90$ ou $c=95$ e $\alpha=20$ .....	61
Figura 22 - Entropia em função da temperatura: caso $A(1,0)$ , $g=20$ , $c=0$ e $\alpha=0, \dots, \dots$ .....	61
Figura 23 - Calor específico em função da temperatura com escalamento de Tsallis: caso $F(5,1)$ , $g=20$ , $\alpha=0,6$ e $c=50, 55, \dots, 95$ .....	62
Figura 24 - Calor específico em função da temperatura com escalamento de Tsallis: caso $F(2,1)$ , $g=20$ , $\alpha=0$ e $c=50, 55, \dots, 95$ .....	62
Figura 25 - Entropia em função da temperatura: caso $F(1,1)$ , $g=24$ , $c=0$ e $\alpha=0$ .....	63
Figura 26 - Função de correlação em função da distância entre spins: caso ferromagnético, $g=20$ , $T=1,5$ e $\alpha=1,2$ .....	67
Figura 27 - Função de correlação em função da distância entre spins: caso ferromagnético, $g=20$ , $T=6,5$ e $\alpha=1,2$ .....	67
Figura 28 - Função de correlação em função da distância entre spins: caso ferromagnético, $g=20$ , $T=4,5$ e $\alpha=1,2$ .....	68
Figura 29 - Função de correlação em função da distância entre spins: caso $F(5,1)$ , $g=20$ , $T=2$ e $\alpha=1,3$ .....	68
Figura 30 - Função de correlação em função da distância entre spins: caso $F(5,1)$ , $g=20$ , $T=30$ e $\alpha=1,3$ .....	69
Figura 31 - Função de correlação em função da distância entre spins: caso $F(5,1)$ , $g=20$ , $T=3,2$ e $\alpha=1,3$ .....	69

# Introdução

Durante muito tempo a Mecânica Estatística se concentrou em problemas nos quais as interações são de curto alcance ou não existem. Os dois exemplos mais famosos são: o modelo do gás ideal, constituído de partículas que não interagem umas com as outras e o modelo de Ising com a aproximação de interações entre os spins apenas para os primeiros vizinhos.

O gás ideal é de grande importância científica e tecnológica, pois corrobora os resultados previstos pela Teoria Cinética dos Gases e também pela ampla aplicação dos fluidos em máquinas térmicas.

O modelo de Ising é uma abordagem consolidada ao problema de transição de fase em materiais ferromagnéticos, sendo de fundamental importância para a Física da Matéria Condensada. O modelo de Ising é muito versátil, sendo aplicado a diversos problemas da Física em que dois estados são presentes, como a liga binária e o gás de rede.

De acordo com [1] durante um bom tempo a Mecânica Estatística se concentrou em problemas que via de regra possuíam hamiltonianos com interações não lineares e de curto alcance caracterizados por um espectro de Lyapunov positivo, mesmo no limite termodinâmico, caracterizando uma dinâmica microscópica caótica, em que o espaço de fase é quase todo ocupado rapidamente (ergodicidade).

Contudo com o passar do tempo surgiram muitos trabalhos que estudavam sistemas com interações de longo alcance, a exemplo de [2-10]. Uma característica que estes sistemas costumam apresentar é que muitas vezes não se consegue definir as grandezas intensivas com o escalamento usual, que consiste na razão entre a grandeza e o número de constituintes do sistema, pois a grandeza intensiva usual pode divergir no limite termodinâmico.

A cadeia de Ising com interação de longo alcance (sem aproximação de primeiros vizinhos) é um bom exemplo de sistema do tipo descrito no parágrafo anterior. Em particular existem muitos trabalhos feitos sobre a cadeia ferromagnética, a exemplo de [11-20].

Nesta dissertação apresentar-se-ão resultados sobre a cadeia de Ising com interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas de longo alcance e para a cadeia antiferromagnética com interações de longo alcance.

Para isto usar-se-á um método de matriz de transferência utilizado em [21,22] para estudar a cadeia ferromagnética. Este é um método computacional que trabalha com matrizes quadradas de ordem dois, mais detalhes sobre ele serão fornecidos ao longo desta dissertação.

Para contornar o problema da divergência das grandezas intensivas com o escalamento normal, Tsallis propôs em [1] um novo escalamento para definir as grandezas intensivas. Este escalamento tem sido testado e aplicado em diversos trabalhos [23-28].

Nesta dissertação pretende-se aplicar o método usado em [21,22] para obter resultados, para o sistema apresentado no parágrafo anterior ao penúltimo, que abarcam os seguintes aspectos: cálculo das propriedades termodinâmicas, investigação da validade do escalamento de Tsallis (conforme proposto em [1]) e resultados preliminares sobre o estudo da transição de fase.

Esta dissertação possui cinco capítulos. O primeiro capítulo tem três seções: as duas primeiras seções têm um caráter mais didático no qual se fala um pouco sobre o modelo de Ising de forma genérica: sua origem, relevância, aplicações e as técnicas usadas para tratá-lo; enfatiza-se especialmente a técnica da matriz de transferência, que é a usada neste trabalho; e a técnica do grupo de renormalização pela sua importância histórica, pois ela teve papel fundamental para a teoria de fenômenos críticos. Destacam-se os trabalhos de Ising [29], Onsager [30] e Wilson [31] pela sua importância histórica. Na última seção define-se precisamente o sistema em estudo nesta dissertação e os aspectos de interesse a serem investigados.

No segundo capítulo se fala de forma mais profunda sobre o escalamento de Tsallis, sendo o mesmo dividido em duas seções. Na primeira seção define-se o escalamento de Tsallis, mostra-se o limite da expressão proposta por Tsallis para as diferentes situações possíveis e apresentam-se argumentos para que ele seja aceito e empregado pela comunidade. Na segunda seção apresentam-se alguns resultados já obtidos sobre o escalamento de Tsallis. Mais particularmente esta seção apresenta os

resultados analíticos de [32] para a aceitação do escalamento e os resultados numéricos de [21] para a cadeia ferromagnética no qual foi usado o mesmo método de matriz de transferência deste trabalho.

No terceiro capítulo expõe-se o método de matriz de transferência utilizado com detalhes, enfatizando suas vantagens e mostrando suas limitações. As subseções deste capítulo são construídas de forma didática e gradativa partindo de uma versão simples do método e generalizando-a até sua versão mais geral e poderosa, permitindo ao leitor a compreensão do raciocínio por trás do método e do seu funcionamento. Mostra-se como obter a função de partição, as propriedades termodinâmicas e a função de correlação com este método, no final do capítulo fala-se sobre como ele foi implementado computacionalmente.

No quarto capítulo são discutidos os resultados obtidos. São mostrados essencialmente três tipos de resultados: o primeiro refere-se à validade do escalamento de Tsallis e do escalamento usual para os diferentes sistemas apresentados na última seção do primeiro capítulo; o segundo consiste em resultados acerca das propriedades termodinâmicas; o último refere-se ao estudo da transição de fase e à validade do critério de ocorrência de transição de fase proposto em [21] para os sistemas desta dissertação.

No quinto e último capítulo são apresentadas as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

# 1. Exposição do problema

## 1.1. O modelo de Ising

O modelo de Ising é um modelo de spins interagentes entre si e com um campo magnético externo, quando este está presente. Na sua versão mais geral ele é dado pelo hamiltoniano abaixo:

$$H = -\sum_{(i,j)}^N J_{ij} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i \quad (s_i = \pm 1) , \quad (1)$$

no qual o primeiro termo reflete a interação entre os spins, e o segundo a interação com um campo magnético externo.  $h$  está associado à intensidade do campo, enquanto as chamadas constantes de acoplamento  $J_{ij}$  estão associadas às interações entre os spins. As variáveis  $s_i$  assumem os valores mostrados e refletem os estados dos spins interagentes, costuma-se interpretar como o sinal da componente do spin na direção do campo.

Este modelo foi proposto originalmente por Lenz em 1920 e resolvido por Ernest Ising [29] em 1925 para o caso unidimensional com interações apenas entre os primeiros vizinhos ( $J_{ij}=0$ , para  $|i-j|>1$ ). Ele é muito usado para descrever fenômenos ferromagnéticos em Física do Estado Sólido, pois consegue simplificar a realidade física de forma a torná-la solúvel analítica ou numericamente, ao mesmo tempo que consegue reter boa parte da informação contida na realidade dos fenômenos.

Este último aspecto merece ser enfatizado, pois estudar o ferromagnetismo em cristais, por exemplo, significaria modelar o comportamento dos núcleos e dos elétrons distribuídos no espaço, os quais interagem entre si e eventualmente com um campo externo. É escusado dizer que simular todos estes detalhes de maneira absolutamente fiel à realidade e obter resultados profundos é um objetivo altamente otimista, para não dizer utópico; contudo, um modelo simples como o de Ising substitui toda a complexidade dos núcleos se movendo na rede, dos elétrons se

movimentando e de todas as interações coulombianas presentes, por um conjunto de spins interagentes.

Esta alternativa embora pareça demasiadamente reducionista (e é reducionista!) vem permitindo ao longo da História a obtenção de muitos resultados tanto qualitativos quanto quantitativos, especialmente no que tange às teorias para a transição de fase ferromagnética.

Vale a pena ressaltar que com todo o reducionismo presente, o modelo em questão não é trivial, de modo que a maioria das aplicações (como a deste trabalho) não dispõe de resultados puramente analíticos.

As poucas soluções analíticas para as versões mais simples do modelo de Ising são muito reducionistas permitindo apenas uma abordagem qualitativa do fenômeno, ou então de uma sofisticação matemática que as torna bastante difíceis; o exemplo mais conhecido é o trabalho de Onsager [30] que apresenta uma solução para o modelo de Ising bidimensional com interações apenas entre primeiros vizinhos. Recentemente surgiu um trabalho com conjecturas acerca de uma solução para o caso tridimensional [33].

O modelo de Ising é uma alternativa amplamente empregada (possivelmente a mais empregada) para estudar transições de fase em sistemas magnéticos. Além disto, ele também é utilizado para simular situações em que cada microestado possui duas possibilidades distintas, como no caso do gás de rede e da liga binária.

O gás de rede consiste num problema em que cada constituinte (átomo ou molécula) pode ocupar posições discretas no espaço (sítios); logo, os dois possíveis valores de  $s_i$  representam sítio ocupado ou vazio. A liga binária representa uma rede com dois tipos de átomo possíveis, em cada ponto da rede pode haver um tipo de átomo, resultando nos dois valores de  $s_i$  para cada sítio.

Vale a pena enfatizar que as aplicações do modelo de Ising vão além das citadas, tanto do ponto de vista da Física como em âmbitos mais gerais, sendo este utilizado em redes neurais, membranas biológicas e até redes sociais (artigos publicados em [34]).

## 1.2. Tratamento do modelo de Ising

O conjunto de técnicas existentes na literatura para se tratar o modelo de Ising é muito grande. Em particular merecem destaque duas grandes famílias de métodos: uma delas é a dos grupos de renormalização, que foi proposto por Wilson em 1971 [31] sendo uma das ferramentas atuais mais poderosas no estudo dos fenômenos críticos; a outra família é a dos métodos de matrizes de transferência, método mais antigo e que foi utilizado por Onsager [30] na solução pioneira do caso bidimensional e é o que será usado neste trabalho.

Cada uma destas famílias possui várias técnicas dentro delas que podem ser tanto analíticas quanto numéricas e consideravelmente distintas umas das outras. Estas técnicas vão sendo desenvolvidas para estudar cada versão particular do modelo; basta ver que o método usado no presente trabalho é bastante diferente do de Onsager.

Para resolver o modelo de Ising utiliza-se o formalismo de Gibbs da Mecânica Estatística, mais especificamente o ensemble canônico. Portanto, para resolver este modelo deve-se calcular a função de partição canônica:

$$Z = \sum_{conf} e^{-\beta H} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (2)$$

onde o somatório se dá sobre todas as configurações possíveis do sistema, H é o hamiltoniano dado por (1), T a temperatura e  $k_B$  a constante de Boltzmann. Daí pode-se obter as funções termodinâmicas conhecidas: energia livre (F), energia interna (U), entropia (S), calor específico (c), entre outras,

$$\begin{aligned} F &= \frac{-1}{\beta} \cdot \ln(Z) = N \cdot f & U &= -\frac{\partial[\ln(Z)]}{\partial\beta} = N \cdot u \\ S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = N \cdot s & c &= \frac{T}{N} \cdot \frac{\partial S}{\partial T} \end{aligned} \quad (3)$$

Pode-se também achar a magnetização M, a susceptibilidade magnética  $\chi$ , e a função de correlação C:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial h} = m.N, \quad \chi = \frac{\partial m}{\partial h}, \quad C = \langle s_i \cdot s_j \rangle = \frac{\sum_{conf} s_i \cdot s_j \cdot e^{-\beta H}}{Z}. \quad (4)$$

Como se pode ver, a fatoração da função de partição do modelo de Ising não é trivial, especialmente devido aos termos de acoplamento. Os métodos de matrizes de transferência consistem em escrever a função de partição como operações sobre elementos de matrizes, muitas vezes como sendo a potência do traço de uma matriz; essa matriz é chamada matriz de transferência.

Este procedimento é conveniente porque permite usar os resultados da Álgebra em favor do processo. Por exemplo, frequentemente aparecem nos métodos o traço da potência de uma matriz e como o traço é invariante por transformação de similaridade, pode-se construir a matriz de transferência de modo que ela seja diagonalizável; aí então, vê-se claramente que o traço da potência da matriz é a soma de potências de seus autovalores.

Os modos como se constroem as matrizes de transferência são os mais variados e dependem da criatividade do autor de cada método. Eventualmente pessoas diferentes desenvolvem métodos distintos para tratar um mesmo sistema; é o que acontece no problema desta dissertação [18, 19, 21, 22].

Os métodos de matrizes de transferência também permitem achar a função de correlação. Na verdade, pode-se obter as propriedades termodinâmicas a partir da função de correlação sem usar a função de partição, mas isso costuma ser um processo mais complicado; por isso mesmo, quando a função de correlação é calculada com matrizes de transferência, costuma-se calcular também a função de partição para a partir da mesma obter-se os outros parâmetros termodinâmicos, especialmente nos métodos analíticos.

O método do grupo de renormalização é uma abordagem bastante distinta do de matriz de transferência. No segundo, calcula-se a função de partição e determinam-se as propriedades termodinâmicas do sistema, tendo-se resolvido completamente o problema (dentro da precisão possível no caso



dos métodos numéricos). No primeiro, a função de partição nem é calculada, as funções termodinâmicas também não são achadas, contudo obtém-se a temperatura crítica e os expoentes críticos associados à transição de fase. Ou seja, estuda-se o comportamento do sistema na transição de fase sem precisar “resolvê-lo”.

Existem outros métodos importantes como os métodos de campo médio onde se despreza as flutuações do spin, e a aproximação gaussiana onde se considera a flutuação até uma certa ordem. Também pode-se, em casos mais simples, tentar usar análise combinatória para calcular a função de partição e há também a desigualdade de Bogoliubov que é um método bastante utilizado em várias aplicações da Mecânica Estatística.

Muitos dos resultados obtidos com estes métodos (em especial os de campo médio e a aproximação gaussiana) serviram como base para levantar hipóteses básicas para consolidação do método de grupo de renormalização [35].

### 1.3. Definição do problema

O sistema em questão nesta dissertação consiste numa cadeia linear de spins em que todos eles interagem entre si e com um campo magnético externo. O sistema está submetido a uma condição de contorno periódica em que o primeiro e o último spin da cadeia são vizinhos de primeira ordem:

$$H = - \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^N J_{ij} \cdot s_i \cdot s_j - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (s_i = \pm 1). \quad (5)$$

A intensidade das interações entre os spins é maior entre os primeiros vizinhos e decai com a distância de acordo com uma lei de potência:

$$|J_{ij}| = \frac{J_0}{|i-j|^\alpha}. \quad (6)$$

As constantes de acoplamento podem ser positivas ou negativas. No caso em que são positivas, diz-se que as interações mediadas por elas são ferromagnéticas; no caso negativo, diz-se que a interação é antiferromagnética.

Pela equação (5) vê-se que, em baixas temperaturas, as interações ferromagnéticas tendem a deixar os spins paralelos e as antiferromagnéticas tendem a deixar os spins opostos. O caso em que todas as interações são ferromagnéticas já foi estudado anteriormente [21]; neste trabalho, se pretende investigar a situação em que todas as interações são antiferromagnéticas e alguns casos em que existem ambos os tipos de interação distribuídos de maneira periódica de acordo com a distância entre os sítios; isto será explicado a seguir.

Para facilitar a explicação escrevamos as constantes de acoplamento como sendo:

$$J_{ij} = \frac{\text{sig}(r)J_0}{r^\alpha}, \quad r = |i - j|, \quad (7)$$

onde a função sig(r) definirá cada caso particular. Neste trabalho, apresentar-se-ão resultados sobre os seguintes casos:

$$\text{Caso I: } \text{sig}(r) = -1, \forall r \quad (8)$$

$$\text{Caso II: } \text{sig}(r) = \begin{cases} -1, & \text{para } r = 6,12,18,24, \dots \\ +1, & \text{demais casos} \end{cases}$$

$$\text{Caso III: } \text{sig}(r) = \begin{cases} -1, & \text{para } r = 5,10,15,20,25, \dots \\ +1, & \text{demais casos} \end{cases}$$

$$\text{Caso IV: } \text{sig}(r) = \begin{cases} -1, & \text{para } r = 3,6,9,12,15, \dots \\ +1, & \text{demais casos} \end{cases}$$

$$\text{Caso V: } \text{sig}(r) = \begin{cases} -1, & \text{para } r = 2,4,6,8,10, \dots \\ +1, & \text{para } r = 1,3,5,7,9, \dots \end{cases}$$

$$\text{Caso VI: } \text{sig}(r) = \begin{cases} -1, & \text{para } r = 1,3,5,7,9, \dots \\ +1, & \text{para } r = 2,4,6,8,10, \dots \end{cases}$$

Definem-se assim os seis sistemas em questão nesta dissertação. Sabe-se que sistemas deste tipo, com interação de longo alcance, costumam ser não-extensivos de modo que, no limite termodinâmico, as grandezas intensivas usuais costumam divergir para certos valores do expoente de decaimento em alguns dos casos. Tsallis propôs então um escalamento diferente do usual para definir as grandezas intensivas que vem sendo bem sucedido numa grande gama de aplicações [1]. Maiores informações sobre o escalamento de Tsallis serão dadas na próxima seção.

Para tornar a notação mais compacta identificar-se-á cada caso da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
 F(m,n): & \begin{cases} sig(r) = 1, & \text{se } 1 \leq R \leq m \\ sig(r) = -1, & \text{se } m+1 \leq R \leq m+n \end{cases} \\
 A(m,n): & \begin{cases} sig(r) = -1, & \text{se } 1 \leq R \leq m \\ sig(r) = 1, & \text{se } m+1 \leq R \leq m+n \end{cases}
 \end{aligned} \tag{9}$$

onde

$$R = r \bmod(m+n+1) \tag{10}$$

deste modo os casos I a VI correspondem respectivamente a A(1,0), F(5,1), F(4,1), F(2,1), F(1,1) e A(1,1). O caso ferromagnético amplamente estudado na literatura corresponde a F(1,0).

Este trabalho visa investigar a validade do escalamento proposto por Tsallis para os sistemas em questão e as propriedades termodinâmicas (entropia, calor específico e energia livre) destes sistemas. Fez-se também um estudo sobre a transição de fase em um dos casos (II).

## 2. O escalamento de Tsallis

### 2.1. Definição e discussão

Na Termodinâmica e na Mecânica Estatística é comum caracterizar o estado do sistema por grandezas intensivas que usualmente ficam bem definidas no limite termodinâmico como sendo a razão entre uma grandeza extensiva (energia interna, energia livre de Gibbs ou de Helmholtz, entropia, ...) e o número de constituintes do sistema. É conveniente expressar o estado por meio de grandezas intensivas pois isso caracteriza bem o sistema independente do “quanto grande ele seja”; em outras palavras, do número de constituintes que possui.

Contudo em alguns sistemas físicos, especialmente nos que apresentam interações de longo alcance como o tratado neste trabalho, o limite termodinâmico não fica bem definido, de modo que as grandezas intensivas usuais podem divergir, carecendo de significado físico.

Para contornar este problema, Tsallis propôs uma maneira alternativa de definir as grandezas intensivas, mostrada a seguir.

Seja :

$$F = F(T, H, N) , \quad f(T, H) = \frac{F}{N}, \quad (11)$$

onde  $F$  uma grandeza extensiva (como a energia livre por exemplo),  $T$  e  $H$  são grandezas intensivas (como a temperatura e o campo magnético externo aplicado no modelo de Ising ou pressão, potencial químico, ...) e  $N$  é o número de partículas; a grandeza  $f$  seria intensiva e bem definida na maioria das situações, mas não neste caso. Define-se então:

$$\begin{aligned}\tilde{N} &= \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}} - \frac{\alpha}{d}}{1 - \frac{\alpha}{d}} \\ \tilde{T} &= \frac{T}{\tilde{N}} \\ \tilde{H} &= \frac{H}{\tilde{N}},\end{aligned}\tag{12}$$

esperando-se que a grandeza

$$\tilde{f}(\tilde{T}, \tilde{H}) = \frac{f(T, H)}{\tilde{N}}\tag{13}$$

fique bem definida no limite termodinâmico, resolvendo o problema das divergências.

Para justificar esta proposta uma possível abordagem é a da referência [1] na qual se estuda um hamiltoniano da forma

$$H = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^N L_i^2 + \frac{1}{2} \cdot \sum_{i \neq j} \frac{1 - \cos(\theta_i - \theta_j)}{r_{ij}^\alpha}\tag{14}$$

que pode ser pensado como um hamiltoniano de rotores interagentes onde o primeiro somatório com N termos representa a energia cinética e o segundo com  $N(N-1)/2$  termos distintos representa a energia potencial de interação entre os rotores.

O segundo termo (o da energia potencial) em (14) dividido por N (número de rotores) é limitado no espaço d-dimensional por algo proporcional a:

$$N^* = d \cdot \int_1^{N^{\frac{1}{d}}} \frac{r^{d-1}}{r^\alpha} dr = \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}} - 1}{1 - \frac{\alpha}{d}},\tag{15}$$

o qual difere do resultado apresentado anteriormente em (12) por uma constante.

Tomando o limite no escalamento anterior em que  $N$  tende a infinito tem-se o resultado a seguir:

$$\tilde{N} = \begin{cases} \frac{\alpha}{d}, & \text{se } \frac{\alpha}{d} > 1 \\ \frac{\alpha}{d} - 1 \\ \ln N, & \text{se } \frac{\alpha}{d} = 1 \\ \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}}}{1-\frac{\alpha}{d}}, & \text{se } 0 \leq \frac{\alpha}{d} < 1 \end{cases} \quad (16)$$

Analogamente, para  $N^*$  tem-se, no limite de  $N$  muito grande:

$$N^* = \begin{cases} \frac{1}{\frac{\alpha}{d} - 1}, & \text{se } \frac{\alpha}{d} > 1 \\ \ln N, & \text{se } \frac{\alpha}{d} = 1 \\ \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}}}{1-\frac{\alpha}{d}}, & \text{se } 0 \leq \frac{\alpha}{d} < 1 \end{cases} \quad (17)$$

Vale a pena enfatizar que a integral  $N^*$  serve para limitar não apenas este hamiltoniano mas para situações diferentes onde apareçam interações de longo alcance; o escalamento apresentado já foi utilizado em muitos trabalhos diferentes com sucesso para outros tipos de hamiltonianos.

Dessa maneira, justifica-se o porquê deste escalamento para o sistema em questão e análogos. Analisando os resultados obtidos vê-se que, para  $\alpha/d > 1$ , o escalamento proposto difere do normalmente usado por uma constante, no limite termodinâmico, o que sugere que o sistema se encontra

na região extensiva; enquanto que, para os outros casos, o sistema está numa região não-extensiva.

Os argumentos apresentados mostram-se razoáveis para uma crença no fato de que o escalamento proposto por Tsallis deve ser válido para uma gama de situações variadas, mas está longe de ser uma demonstração formal e inquestionável de que o escalamento é sempre válido. Mais especificamente, estes argumentos não provam que este escalamento seja válido para a cadeia de Ising com interações de longo alcance, que é um dos objetivos de investigação do presente trabalho.

Esta investigação foi feita num trabalho anterior por Andrade e Pinho [21] para o caso em que as interações são todas ferromagnéticas e neste trabalho para o caso antiferromagnético e com interações competitivas ferromagnéticas e antiferromagnéticas.

## 2.2. Resultados preliminares sobre o escalamento de Tsallis

### 2.2.1. Resultado analítico

Um resultado interessante sobre o escalamento de Tsallis é o apresentado em [32] no qual se parte da hipótese de que a energia livre de Gibbs  $G$  em sistemas não extensivos possui a seguinte propriedade:

$$\frac{G}{NN^*} = \frac{U}{NN^*} - \frac{T}{N^*} \cdot \frac{S}{N} + \frac{P}{N^*} \cdot \frac{V}{N} + \frac{H}{N^*} \cdot \frac{M}{N} \quad (18)$$

onde  $N$  é o número de spins,  $N^*$  é como definido anteriormente,  $U$  é a energia interna,  $T$  é a temperatura,  $S$  é a entropia,  $P$  é a pressão,  $V$  é o volume,  $H$  é o campo magnético e  $M$  é a magnetização. As grandezas  $S$ ,  $V$  e  $M$  são admitidas como extensivas e as grandezas intensivas usuais  $T$ ,  $P$  e  $H$  obedecem ao escalamento  $N^*$ .

O exemplo citado no artigo [32] é o da cadeia de Ising ferromagnética dada pelo hamiltoniano

$$H = -J \sum_{i \neq j} \frac{S_i S_j}{r_{ij}^\alpha} \quad J > 0. \quad (19)$$

Então, do fato de que  $U(S, V, M) = u(s, v, m) \cdot N \cdot N^*$ , obtém-se que:

$$U(\lambda S, \lambda V, \lambda M, \lambda N) = \lambda^{2-\frac{\alpha}{d}} U(S, V, M), \quad (20)$$

e derivando-se em relação a  $\lambda$ , obtém-se:

$$\frac{\partial U}{\partial(\lambda S)} S + \frac{\partial U}{\partial(\lambda V)} V + \frac{\partial U}{\partial(\lambda M)} M + \frac{\partial U}{\partial(\lambda N)} N = \left[ 2 - \frac{\alpha}{d} \right] \lambda^{1-\frac{\alpha}{d}} U \quad (21)$$

Logo, para

$$\lambda = \left( \frac{1}{2 - \alpha/d} \right)^{\frac{1}{(1-\alpha/d)}} \quad (22)$$

chega-se a relação de Euler:

$$U = TS - PV + HM + \mu N, \text{ onde :} \quad (23)$$

$$T = \frac{\partial U}{\partial S} \quad P = -\frac{\partial U}{\partial V}$$

$$H = \frac{\partial U}{\partial M} \quad \mu = \frac{\partial U}{\partial N}$$

a partir da qual se pode obter a relação de Gibbs-Duhem correspondente, ou seja:



$$SdT - VdP + MdH + Nd\mu = 0 \quad (24)$$

Da relação de Euler (23) correspondente obtém-se que:

$$G = \mu N. \quad (25)$$

Como G é proporcional a  $N \cdot N^*$ , tem-se que o potencial químico deve ser proporcional a  $N^*$ ; o mesmo acontece para T, P e H, obtendo-se as relações:

$$\begin{aligned} T(S, V, M, N) &= \frac{1}{N^*} \cdot T\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}, \frac{M}{N}\right) \\ P(S, V, M, N) &= \frac{1}{N^*} \cdot P\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}, \frac{M}{N}\right) \\ H(S, V, M, N) &= \frac{1}{N^*} \cdot H\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}, \frac{M}{N}\right) \\ \mu(S, V, M, N) &= \frac{1}{N^*} \cdot \mu\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}, \frac{M}{N}\right), \end{aligned} \quad (26)$$

justificando-se assim a equação do início desta seção e o escalamento de Tsallis com base em conceitos termodinâmicos. Este resultado é interessante porque mostra que as relações de Euler e de Gibbs-Duhem são compatíveis com o escalamento de Tsallis na região extensiva.

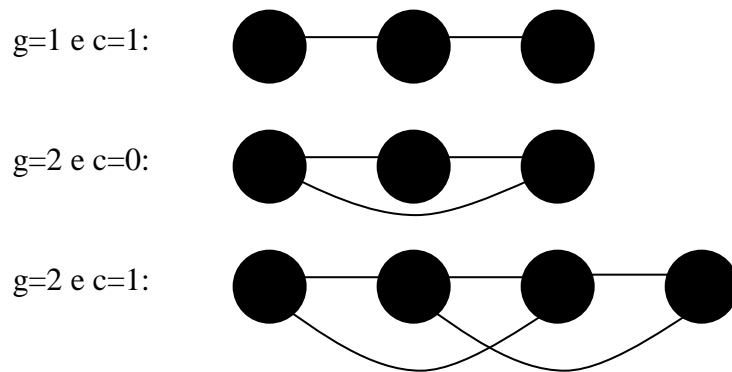
É relevante notar que o caso extensivo, que pode ser visto como o limite em que  $\alpha$  tende a infinito (as interações caem muito rapidamente), resulta em  $\lambda=1$  que é o valor utilizado normalmente para obtenção da relação de Euler [36-37]:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \lambda = \lim_{x \rightarrow \infty} e^{\ln \left[ \left( \frac{1}{2-x} \right)^{\frac{1}{1-x}} \right]} = e^{\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\ln \left( \frac{1}{2-x} \right)}{1-x}} = e^{\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x-2}} = e^0 = 1. \quad (27)$$

## 2.2.2. Resultados numéricos

O método de matriz de transferência utilizado neste trabalho foi utilizado anteriormente em [21] para o estudo da cadeia de Ising ferromagnética com interações de longo alcance.

Como o método é numérico, calculou-se as energias livres para cadeias finitas com interações de ordem menor ou igual que um certo valor  $g$ , numa cadeia com  $N=g+c+1$  spins, deste modo  $c$  corresponde ao acréscimo de spins numa cadeia com  $g+1$  spins todos interagindo uns com os outros, sem que se aumente a ordem máxima das interações. A figura a seguir ilustra o significado de  $g$  e  $c$ , cada círculo corresponde a um spin e as linhas as interações entre os spins.



Fazendo-se  $g$  variar com valores menores ou iguais a 24 (com  $c$  mantido fixo), a partir da análise das diferenças entre as curvas obtidas, observou-se que estas decaem com o aumento de  $g$ , colapsando, sempre que o escalamento de Tsallis é usado. Em contrapartida, no escalamento usual (dividir por  $N$ ) as curvas só colapsam na região extensiva ( $\alpha > 1$ ) como previsto. Isto evidencia a validade da conjectura de Tsallis para o caso ferromagnético, em concordância com os resultados da seção anterior.

Acréscimos unitários em  $g$  geram uma variação de menos de 0,002% nas curvas da energia livre com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0,5$ . Mantendo-se  $g$  fixo e variando  $c$  observa-se que a diferença entre os valores da energia livre com o escalamento de Tsallis decai com o aumento da temperatura (com o mesmo escalamento), de modo que a diferença entre as curvas é inferior a 0,0008%.

É importante enfatizar que neste método numérico o escalamento de Tsallis funciona quando se troca  $N$  por  $g$  na equação:

$$\tilde{N} = \frac{N^{1-\frac{\alpha}{d}} - \frac{\alpha}{d}}{1 - \frac{\alpha}{d}}, \quad (28)$$

evidenciando que o escalamento está associado não com o número de constituintes apenas, mas principalmente com o alcance das interações.

Conclui-se que a conjectura de Tsallis vale para todo valor de  $\alpha$ , em concordância com os resultados da seção anterior, o que sugere a validade do método empregado no presente trabalho, que é uma simples adaptação do método para o caso mais geral em que as constantes de acoplamento entre os spins podem assumir valores negativos.

## 3. O método de matriz de transferência

### 3.1. Digressões sobre o método

Conforme já foi mencionado usar-se-á neste trabalho um método de matriz de transferência. Este método é o mesmo que foi usado anteriormente para estudar a cadeia de Ising no caso em que todas as interações são ferromagnéticas em [21,22], obtendo resultados compatíveis com outros trabalhos da literatura [11, 12, 13, 14, 18, 19], evidenciando a confiabilidade do método.

O método empregado permite estudar uma cadeia de  $N=g+c+1$  spins em que só interagem os vizinhos até ordem  $g$ . Na próxima seção será vista a versão preliminar do método a campo nulo em que  $N=g+1$  ( $c=0$ ), na seção posterior mostrar-se-á como o formalismo apresentado pode ser generalizado para o caso em que o número de spins excede a ordem das interações, ou seja, a ordem máxima das interações  $g$  é menor que  $N-1$  ( $N=g+c+1$ ); depois, será exposto o método na presença de um campo magnético externo e, por último, como achar a função de correlação do sistema e como este resultado pode ser utilizado para determinar quando ocorre transição de fase e a temperatura crítica correspondente.

Este capítulo visa expor o método utilizado neste trabalho, mostrando qual a idéia matemática por trás do processo. O método foi implementado em linguagem Fortran num computador de mesa simples, contudo não serão mostrados aqui os programas utilizados e suas nuances, uma vez que o objetivo desta dissertação é acerca da Física e não da arte da programação.

Espera-se que as deduções aqui feitas possam esclarecer o leitor quanto à eficiência do método e quanto ao raciocínio por trás dele, bem como das suas vantagens computacionais intrínsecas, permitindo àquele que for hábil programador implementá-lo na linguagem que achar mais conveniente.

## 3.2. Versão preliminar

Considerando um sistema com dois spins (hamiltoniano  $H = -J_1 \cdot s_1 \cdot s_2$ ), define-se a matriz  $M_1$  em função das configurações possíveis dos spins, associando o índice  $i$  a  $s_1$  e o índice  $j$  a  $s_2$ , segundo a convenção abaixo:

$$\begin{aligned} (M_1)_{ij} &= (M_1)_{s_i s_j} = e^{\beta J_1 s_i s_j} & (29) \\ i = 1 &\Rightarrow s_1 = +1 \\ i = 2 &\Rightarrow s_1 = -1 \\ j = 1 &\Rightarrow s_2 = +1 \\ j = 2 &\Rightarrow s_2 = -1. \end{aligned}$$

Obtém-se, então:

$$M_1 = \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} \\ e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \end{pmatrix} \quad (30)$$

Vê-se que a função de partição para este sistema de dois spins é exatamente o dobro do maior autovalor desta matriz, ou seja:

$$Z = 2\lambda_+ = 2e^{\beta J_1} + 2e^{-\beta J_1} \quad (31)$$

Pode-se escrever os elementos da matriz  $M_1$  como sendo:

$$\langle i | M_1 | j \rangle = \sum_{l,k} \langle i | P_1 | lk \rangle \langle lk | L_1 | j \rangle \quad (32)$$

onde se define:

$$\begin{aligned} \langle i|P_1|jk\rangle &= e^{\beta J_1 s_1 s_k} \delta_{i,j} \Rightarrow \\ \Rightarrow P_1 &= \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \end{pmatrix} \\ L_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (33)$$

de modo que os valores de  $s_1$  e  $s_2$  estão relacionados com os índices  $i$  e  $k$  dos elementos de matriz pela convenção mostrada anteriormente e os rótulos das colunas dos elementos de matriz são dados pela ordem lexicográfica de  $j$  e  $k$ .

Uma maneira de ver a ordem lexicográfica é a seguinte: a linha está associada de imediato com  $i$ ; para relacionar a coluna com os valores de  $j$  e  $k$ , vê-se que o índice da coluna varia de 1 até 4, escrevendo-se os quatro valores em binário com dois algarismos obtém-se os valores de  $j$  e  $k$  como os algarismos correspondentes a cada casa; por exemplo, os elementos com índice de coluna 3 correspondem a 10 em binário o que quer dizer que  $j=2$  e  $k=1$  (e portanto  $s_1=0$  e  $s_2=1$ ), analogamente o índice de coluna 4 corresponde a 11 em binário o que corresponde a  $j=k=2$ , logo :

$$\begin{aligned} M_1 &= P_1 L_1 \Rightarrow \\ \Rightarrow M_1 &= \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} \\ e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (34)$$

Considerando agora um sistema com três spins e portanto interações até segunda ordem, obtém-se:

$$\langle i|M_2|j\rangle = \sum_{s_2} e^{\beta[J_1(s_1s_2+s_2s_3)+J_2s_1s_3]} \quad (35)$$

$$i = 1 \Rightarrow s_1 = +1$$

$$i = 2 \Rightarrow s_1 = -1$$

$$j = 1 \Rightarrow s_3 = +1$$

$$j = 2 \Rightarrow s_3 = -1$$

Define-se então os elementos da matriz  $P_2$  de modo que:

$$\langle i|M_2|j\rangle = \sum_{l,k} \langle i|P_1|lk\rangle \langle lk|P_2|t_1t_2t_3\rangle \langle t_1t_2t_3|L_2|j\rangle \quad (36)$$

onde  $P_1$  é como era definida anteriormente, e assim:

$$\langle jk|P_2|t_1t_2t_3\rangle = e^{\beta(J_1s_2s_3+J_2s_1s_3)} \cdot \delta_{j,t_1} \cdot \delta_{k,t_2} \Rightarrow \quad (37)$$

$$P_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2)} & e^{-\beta(J_1+J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1-J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2)} & e^{\beta(-J_1+J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1+J_2)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} t_i = 1 \Rightarrow s_i = 1 \\ t_i = 2 \Rightarrow s_i = -1 \end{cases}, \quad i=1,2,3$$

Desta vez usou-se a ordem lexicográfica tanto nas linhas quanto nas colunas, só que nas colunas agora tem-se três índices. A generalização é trivial: basta escrever os índices em binário mais uma vez só que nas colunas desta vez escrever-se-ão os números com três algarismos dando os três valores de  $t_1, t_2, t_3$ ; por exemplo, o elemento com índice de linha 2 e coluna 3

corresponde a  $j=2$  e  $k=1$  pois 2 em binário é 10 e  $t_1=1, t_2=2, t_3=2$ , pois 3 em binário é 011.

Obtém-se então a matriz  $M_2$ :

$$M_2 = P_1 P_2 L_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} & 2e^{-\beta J_2} \\ 2e^{-\beta J_2} & e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} \end{pmatrix} \quad (38)$$

Procedendo de maneira análoga obtém-se os seguintes resultados para uma cadeia de 4 spins e portanto interações até terceira ordem:

$$\langle i | M_3 | j \rangle = \sum_{l,k,t_1,t_2,t_3,t_4} \langle i | P_1 | lk \rangle \langle lk | P_2 | mno \rangle \langle mno | P_3 | t_1 t_2 t_3 t_4 \rangle \langle t_1 t_2 t_3 t_4 | L_3 | j \rangle. \quad (39)$$

A matriz  $P_3$  terá agora ordem  $8 \times 16$  e  $L_3$  terá ordem  $16 \times 2$  de modo que como  $P_1$  é  $2 \times 4$  e  $P_2$  é  $4 \times 8$ , a matriz  $M_3 = P_1 P_2 P_3 L_3$  será  $2 \times 2$  como sempre. A matriz  $P_3$  possui quatro blocos  $B_1, B_2, B_3, B_4$ , como mostrado a seguir:

$$P_3 = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \\ B_3 & B_4 \end{pmatrix} \quad (40)$$

$$B_1 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2+J_3)} & e^{-\beta(J_1+J_2+J_3)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2+J_3)} & e^{\beta(J_1-J_2-J_3)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2+J_3)} & e^{\beta(-J_1+J_2-J_3)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(-J_1-J_2+J_3)} & e^{\beta(J_1+J_2-J_3)} \end{pmatrix} \quad (41)$$

$$B_2 = B_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B_4 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2-J_3)} & e^{\beta(-J_1-J_2+J_3)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2-J_3)} & e^{\beta(J_1-J_2+J_3)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2-J_3)} & e^{\beta(-J_1+J_2+J_3)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(J_1+J_2+J_3)} & e^{\beta(J_1+J_2+J_3)} \end{pmatrix}$$



Analogamente, obtém-se:

$$M_3 = P_1 P_2 P_3 L_3 \quad (42)$$

Olhando-se para as matrizes  $P_1$ ,  $P_2$  e  $P_3$  obtidas, vê-se que cada matriz  $P_k$  é dividida em blocos que ou são nulos ou têm os elementos da matriz  $P_{k-1}$  multiplicados por exponenciais  $\exp(\beta J_k)$  ou  $\exp(-\beta J_k)$ . Então observando-se as matrizes obtidas bem como o processo de construção, pode-se ver claramente as relações de recorrência a seguir que permitem construir as matrizes  $P_k$  de forma recursiva e assim determinar os  $M_k$ .

$$(P_k)_{i,j} = \begin{cases} (P_{k-1})_{i,j} \cdot e^{(-1)^{j-1} \cdot \beta \cdot J_k} & \text{para } i \leq 2^{k-1} \text{ e } j \geq 2^k \\ (P_{k-1})_{2^k - i + 1, 2^{k+1} - j + 1} \cdot e^{(-1)^{j-1} \cdot \beta \cdot J_k} & \text{para } 2^{k-1} \leq i \leq 2^k \text{ e } 2^k \leq j \leq 2^{k+1} \\ 0 & \text{demais casos} \end{cases} \quad (43)$$

Com  $M_k$  pode-se achar a função de partição como sendo o dobro do maior autovalor desta matriz e então as outras funções termodinâmicas. Note que como a matriz final é  $2 \times 2$  e simétrica seus autovalores são dados de maneira trivial pela expressão (44) dispensando algoritmos complicados para o cálculo dos autovalores:

$$\lambda_{\pm} = M_{11} \pm M_{12} \quad (44)$$

A partir daí pode-se achar a função de partição e as propriedades termodinâmicas. Os cálculos da função de partição  $Z$  são feitos para diferentes temperaturas e as derivadas podem ser obtidas por métodos de diferenças finitas. Sintetizando, tem-se as expressões (45):

$$\begin{aligned}
 Z &= 2\lambda_+ & (45) \\
 F &= \frac{-1}{N\beta} \cdot \ln(Z) \\
 S &= -\frac{\partial F}{\partial T} \\
 c &= \frac{T}{N} \cdot \frac{\partial S}{\partial T}
 \end{aligned}$$

### 3.3. Versão adaptada do método

Com o método mostrado na seção anterior pode-se calcular as propriedades de uma cadeia com  $N$  spins considerando-se todas as interações até ordem  $N-1$ , contudo isto deixa o número de spins da cadeia muito limitado devido à ordem máxima de interações que o computador consegue processar num tempo hábil.

Nesta seção mostrar-se-á como adaptar o método anterior a uma cadeia com  $N$  spins e interações até ordem  $g$  só que de modo que  $N$  possa ser maior que  $g+1$ . Para estabelecer a notação será considerada uma cadeia com  $N=g+c+1$  spins [21-22].

Para ilustrar o novo método pode-se considerar uma cadeia com quatro spins e interações até segundos vizinhos. Se as interações fossem até o terceiro vizinho, a situação seria similar à seção anterior; uma solução razoável então é utilizar o método da seção anterior para quatro spins, só que considerando  $J_3=0$ . Procedendo-se desta maneira, a matriz  $P_3$  fica:

$$P_3 = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \\ B_3 & B_4 \end{pmatrix} \quad (46)$$

onde os blocos da matriz ficam:

$$B_1 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2)} & e^{-\beta(J_1+J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1-J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2)} & e^{\beta(-J_1+J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(-J_1-J_2)} & e^{\beta(J_1+J_2)} \end{pmatrix} \quad (47)$$

$$B_2 = B_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B_4 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2)} & e^{-\beta(J_1+J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1-J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2)} & e^{\beta(-J_1+J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1+J_2)} \end{pmatrix}$$

Note que os blocos não nulos da matriz  $P_3$  são idênticos à matriz  $P_2$ . Pode-se então calcular o produto das matrizes  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$  e  $L_3$  como agora obtida e achar a matriz 2x2 correspondente que descreve o sistema:

$$M_{2,1} = (P_1 P_2 P_3) L_3 \Rightarrow \quad (48)$$

$$\Rightarrow M_{2,1} = \begin{pmatrix} e^{\beta(3J_1+2J_2)} + 2e^{-\beta J_2} + e^{\beta(-J_1-2J_2)} & 2e^{\beta J_1} + e^{\beta(J_1-J_2)} + e^{\beta(-3J_1+2J_2)} \\ 2e^{\beta J_1} + e^{\beta(J_1-J_2)} + e^{\beta(-3J_1+2J_2)} & e^{\beta(3J_1+2J_2)} + 2e^{-\beta J_2} + e^{\beta(-J_1-2J_2)} \end{pmatrix}$$

Agora, definamos os elementos da matriz  $P_3'$  como sendo:

$$\langle ijk | P_3' | mno \rangle = \sum_l \langle ijk | P_3 | lmn \rangle, \quad (49)$$

Logo, obter-se-á:

$$P_3' = \begin{pmatrix} e^{\beta J_1 + J_2} & e^{-\beta J_1 + J_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1 + J_2)} & e^{\beta J_1 - J_2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta J_1 - J_2} & e^{\beta(-J_1 + J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta J_1 + J_2} & e^{\beta J_1 + J_2} \\ e^{\beta J_1 + J_2} & e^{-\beta J_1 + J_2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1 + J_2)} & e^{\beta J_1 - J_2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta J_1 - J_2} & e^{\beta(-J_1 + J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta J_1 + J_2} & e^{\beta J_1 + J_2} \end{pmatrix} \quad (50)$$

Pode-se notar então a agradável coincidência:

$$M_{2,1} = (P_1 P_2 P_3') L_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta(3J_1 + 2J_2)} + 2e^{-\beta J_2} + e^{\beta(-J_1 - 2J_2)} & 2e^{\beta J_1} + e^{\beta(J_1 - J_2)} + e^{\beta(-3J_1 + 2J_2)} \\ 2e^{\beta J_1} + e^{\beta(J_1 - J_2)} + e^{\beta(-3J_1 + 2J_2)} & e^{\beta(3J_1 + 2J_2)} + 2e^{-\beta J_2} + e^{\beta(-J_1 - 2J_2)} \end{pmatrix} \quad (51)$$

Suponha agora que se queira estudar a cadeia de 4 spins com interações até primeiros vizinhos, então analogamente ao que foi feito anteriormente, pode-se fazer  $J_2 = J_3 = 0$  no procedimento usual e obter-se-á:

$$P_3 = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \\ B_3 & B_4 \end{pmatrix}, \quad (51)$$

onde os blocos  $B_i$  ( $i=1,2,3,4$ ) são:

$$\begin{aligned}
 B_1 = B_4 &= \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \end{pmatrix} e \\
 B_2 = B_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{52}$$

e também obtém-se  $P_2$  como sendo:

$$P_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} \end{pmatrix} \tag{53}$$

Note que as matrizes  $P_2$  e  $P_3$  são formadas por pequenos blocos que ou são nulos ou idênticos a  $P_1$ ,

Define-se agora os elementos da matriz  $P_2'$ .

$$\begin{aligned}
 \langle ij | P_2' | kj \rangle &= \sum_n \langle ij | P_2 | nkj \rangle \\
 P_2' &= \begin{pmatrix} e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \\ e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{54}$$

Finalmente vê-se que a matriz 2x2 que descreve a cadeia com quatro spins e interações até primeiros vizinhos é dada por:

$$M_{1,2} = (P_1 P_2 P_3) L_3 = P_1 (P_2')^2 \cdot (L_2) \Rightarrow \quad (55)$$

$$\Rightarrow M_{1,2} = \begin{pmatrix} e^{\beta(3J_1+2J_2)} + 2e^{-\beta J_2} + e^{\beta(-J_1-2J_2)} & 2e^{\beta J_1} + e^{\beta(J_1-J_2)} + e^{\beta(-3J_1+2J_2)} \\ 2e^{\beta J_1} + e^{\beta(J_1-J_2)} + e^{\beta(-3J_1+2J_2)} & e^{\beta(3J_1+2J_2)} + 2e^{-\beta J_2} + e^{\beta(-J_1-2J_2)} \end{pmatrix}$$

Diante dos exemplos fornecidos vê-se que a matriz  $M_{g,c}$ , que descreve uma cadeia de  $N=g+c+1$  spins com ordem de interação até  $g$ , pode ser dada por:

$$M_{g,c} = \left( \prod_{i=1}^g P_i \right) \cdot (P_g')^c \cdot L_g, \quad (56)$$

onde os  $P_i$  são determinados de maneira recursiva como determinado e os  $P_i'$  como já mostrado anteriormente.

Embora pareça artificial a construção dos  $P'$ , ela é bastante natural, pois fazer os  $J_i=0$  com  $i>g$  é uma alternativa natural para descrever uma cadeia com  $(g+c+1)$  spins e interações até  $g$ . Além disso, vê-se que nesta situação as matrizes  $P_i$ , com  $i>g$ , são formadas por blocos das matrizes  $P_g$  de modo que a definição dos  $P'$  fica natural.

Por último, ressalta-se que, olhando para a matriz  $P_g'$  (de ordem  $2^g \times 2^g$ ) vê-se que ela pode ser obtida da matriz  $P_g$  (de ordem  $2^{g+1} \times 2^g$ ) a partir da definição de uma matriz  $Q_g$  (de ordem  $2^{g+1} \times 2^g$ ) como mostrada a seguir.

$$P_g' = Q_g \cdot P_g \quad (57)$$

$$(Q_g)_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \text{ ou } i = j + 2^g \\ 0, & \text{demais casos} \end{cases}$$

As expressões (44) e (45) continuam válidas obviamente para as matrizes  $M_{g,c}$  de modo que termina-se então esta seção com um método prático para ser implementado computacionalmente, de se estudar uma cadeia com  $N=g+c+1$  spins e interações até ordem  $g$  na ausência de campo magnético.

### 3.4. A introdução do campo magnético

Embora os resultados apresentados neste trabalho sejam correspondentes ao caso em que o campo externo é nulo, por razões que serão discutidas mais adiante, mostrar-se-á nesta seção que o método apresentado nesta dissertação pode ser adaptado para o caso em que o campo não é nulo, o que permite, por exemplo, o cálculo da magnetização.

Para introduzir o campo magnético na versão preliminar do método mostrado anteriormente, pode-se inicialmente considerar o efeito do campo magnético no spin  $i+1$  em cada matriz  $P_i$ . Para isso multiplica-se cada elemento de matriz  $P_i$  por  $e^{\beta h s_i}$ , definindo-se assim a matriz  $P_i^*$ :

$$\begin{aligned} \langle i | P_1^* | jk \rangle &= e^{\beta J_1 s_1 s_k} \cdot e^{\beta h s_2} \delta_{i,j} \Rightarrow \\ \Rightarrow P_1^* &= \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+h)} & e^{-\beta(J_1+h)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta(J_1-h)} & e^{\beta(J_1-h)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (58)$$

Analogamente, define-se a matriz  $P_2^*$ :

$$\langle jk | P_2^* | t_1 t_2 t_3 \rangle = e^{\beta(J_1 s_2 s_3 + J_2 s_1 s_3)} \cdot e^{\beta h s_3} \cdot \delta_{j, t_1} \cdot \delta_{k, t_2} \quad (59)$$

$$P_2^* = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1 + J_2 + h)} & e^{-\beta(J_1 + J_2 + h)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1 + J_2 + h)} & e^{\beta(J_1 - J_2 - h)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1 - J_2 + h)} & e^{\beta(-J_1 + J_2 - h)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(J_1 + J_2 - h)} & e^{\beta(J_1 + J_2 - h)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} t_1 = 1 \Rightarrow s_1 = +1 \\ t_1 = 2 \Rightarrow s_1 = -1 \\ t_2 = 1 \Rightarrow s_2 = +1 \\ t_2 = 2 \Rightarrow s_2 = -1 \\ t_3 = 1 \Rightarrow s_3 = +1 \\ t_3 = 2 \Rightarrow s_3 = -1 \end{cases}$$

E obtém-se então a matriz 2x2 correspondente:

$$M_2^* = (P_1^* P_2^*) L_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta(2J_1 + J_2 + 2h)} + e^{\beta(-2J_1 + J_2)} & e^{-\beta J_2} + e^{-\beta(J_2 + 2h)} \\ e^{-\beta J_2} + e^{-\beta(J_2 - 2h)} & e^{\beta(2J_1 + J_2 - 2h)} + e^{\beta(-2J_1 + J_2)} \end{pmatrix} \quad (60)$$

Agora se pode considerar também o efeito do campo no spin 1 e define-se assim a matriz  $P_1^{**}$ :

$$\langle i | P_1^{**} | jk \rangle = e^{J_1 s_1 s_k} \cdot e^{\beta h s_2} \cdot e^{\beta h s_1} \delta_{i, j} \quad (61)$$

$$P_1^{**} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1 + 2h)} & e^{-\beta \cdot J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta \cdot J_1} & e^{\beta(J_1 - 2h)} \end{pmatrix}.$$

Acha-se então a matriz  $M_2^{**}$ .



$$M_2^{**} = (P_1^{**} P_2^*) L_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta(2J_1+J_2+3h)} + e^{\beta(-2J_1+J_2+h)} & e^{-\beta(J_2-h)} + e^{-\beta(J_2+h)} \\ e^{-\beta(J_2+h)} + e^{-\beta(J_2-h)} & e^{\beta(2J_1+J_2-3h)} + e^{\beta(-2J_1+J_2-h)} \end{pmatrix} \quad (62)$$

Pode-se também calcular  $M_1^*$  e  $M_1^{**}$ :

$$M_1^* = P_1^* \cdot L_1 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+h)} & e^{-\beta(J_1+h)} \\ e^{-\beta(J_1-h)} & e^{\beta(J_1-h)} \end{pmatrix} \quad (63)$$

$$M_1^{**} = P_1^{**} \cdot L_1 = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+2h)} & e^{-\beta \cdot J_1} \\ e^{-\beta \cdot J_1} & e^{\beta(J_1-2h)} \end{pmatrix} \quad (64)$$

Note que as matrizes  $M_1^*$  e  $M_1^{**}$  diferem por uma regra simples: a última é igual à primeira, com a primeira linha multiplicada por  $e^{\beta h}$  e a segunda dividida por este mesmo valor; o mesmo acontece entre  $M_2^*$  e  $M_2^{**}$  e de fato, isto é uma regra geral.

Conhecendo-se as matrizes  $M_n^{**}$ , pode-se determinar a função de partição e as propriedades termodinâmicas com as equações (44) e (45).

Para adaptar o formalismo ao caso em que  $c > 0$ , basta usar as expressões (56) e (57) trocando-se  $P_n$  por  $P_n^{**}$ , pois a construção é análoga.

### 3.5. A função de correlação e o critério de transição de fase

Uma propriedade importante cujo cálculo ainda não foi mostrado até agora é a função de correlação, que consiste no valor esperado do produto de dois spins numa certa distância  $r$ :

$$\langle s_1 \cdot s_{1+r} \rangle_g = \frac{\sum_{conf} s_1 \cdot s_{1+r} \cdot e^{-\beta H}}{\sum_{conf} e^{-\beta H}} = \frac{\sum_{conf} s_1 \cdot s_{1+r} \cdot e^{-\beta H}}{Z}, \quad (65)$$

onde  $H$  é dado pelas expressões (5) e (6).

Esta seção pretende mostrar como se dá o cálculo da função de correlação e como esta pode ser usada para a obtenção de um critério de transição de fase do sistema, bem como para calcular as temperaturas críticas associadas à cadeia finita, permitindo extrapolar o resultado para a cadeia infinita com a técnica dos aproximantes de Padé.

### 3.5.1. A função de correlação

Define-se a matriz  $P_1'$  como sendo:

$$P_1' = \begin{pmatrix} e^{\beta \cdot J_1} & e^{-\beta \cdot J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e^{-\beta \cdot J_1} & -e^{\beta \cdot J_1} \end{pmatrix} \quad (66)$$

e as matrizes  $P_2, P_3, \dots$ , como eram antes; define-se agora a função  $[ ]$  ("maior inteiro contido em") da seguinte maneira:

$$[x] = \sup \{ z \in \mathbf{Z}; z \leq x \} \quad (67)$$

e, por último, define-se a matriz  $L_{g,r}$  de ordem  $2^g \times 2^g$ , como sendo:

$$(L_{g,r})_{i,j} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } i + j \text{ for ímpar} \\ (-1)^{\lfloor \frac{i-1}{2^{g-r}} \rfloor} & , \text{ se } i + j \text{ for par.} \end{cases} \quad (68)$$

Deste modo a função de correlação será dada por:

$$\langle s_1 \cdot s_{1+r} \rangle_g = \frac{\sum_{i,j} (R_{g,r})_{i,j}}{Z_g} , \quad (69)$$

onde  $Z_g$  é a função de partição da cadeia com  $(g+1)$  spins interagentes e  $R_{g,r}$  é a matriz definida por:

$$(R_{g,r}) = P_1' \cdot \left( \prod_{i=2}^g P_i \right) \cdot L_{g,r} . \quad (70)$$

Para ilustrar o processo pode-se fazer o cálculo da função de correlação entre os spins 1 e 2, e entre os spins 1 e 3, numa cadeia com 3 spins.

No primeiro caso  $r=1$  e  $g=2$ , logo:

$$(L_{2,1})_{i,j} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } i + j \text{ for ímpar} \\ (-1)^{\lfloor \frac{i-1}{2^{2-1}} \rfloor} = (-1)^{\frac{i-1}{2}} & , \text{ se } i + j \text{ for par.} \end{cases} \quad (71)$$

Obtém-se então:

$$L_{2,1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (72)$$

Como  $P_1'$  é dado por (66) e  $P_2$  é definido como originalmente, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 R_{2,1} &= P_1' \cdot P_2 \cdot L_{2,1} = \begin{pmatrix} e^{\beta \cdot J_1} & e^{-\beta \cdot J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e^{-\beta \cdot J_1} & -e^{\beta \cdot J_1} \end{pmatrix} \quad (73) \\
 &\cdot \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2)} & e^{-\beta(J_1+J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1-J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2)} & e^{\beta(-J_1+J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1+J_2)} \end{pmatrix} \\
 L_{2,1} &= \begin{pmatrix} e^{\beta(2J_1+J_2)} & -e^{\beta(-2J_1+J_2)} & 0 \\ 0 & e^{\beta(2J_1+J_2)} & -e^{\beta(-2J_1+J_2)} \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

$Z_2$  é dada pelo dobro do maior autovalor da expressão (38) tanto neste caso como no outro; logo, a função de correlação entre os spins 1 e 2 é:

$$\begin{aligned}
 \langle s_1 \cdot s_2 \rangle_{g=2} &= \frac{\sum_{i,j} (R_{2,1})_{i,j}}{Z_2} = \frac{(e^{\beta(2J_1+J_2)} - e^{\beta(-2J_1+J_2)}) + 0 + 0 + e^{\beta(2J_1+J_2)} - e^{\beta(-2J_1+J_2)}}{2[e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} + 2e^{-\beta \cdot J_2}]} \Rightarrow \quad (74) \\
 \Rightarrow \langle s_1 \cdot s_2 \rangle_{g=2} &= \frac{e^{\beta(2J_1+J_2)} - e^{\beta(-2J_1+J_2)}}{e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} + 2e^{-\beta \cdot J_2}}.
 \end{aligned}$$

Analogamente para os spins 1 e 3, obtém-se

$$(L_{2,2})_{i,j} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } i + j \text{ for ímpar} \\ (-1)^{\left[ \frac{i-1}{2^{2-2}} \right]} = (-1)^{i-1} & , \text{ se } i + j \text{ for par} \end{cases} \quad (75)$$

$$L_{2,2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (76)$$

$$R_{2,2} = P_1' \cdot P_2 \cdot L_{2,2} = \begin{pmatrix} e^{\beta \cdot J_1} & e^{-\beta \cdot J_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e^{-\beta \cdot J_1} & -e^{\beta \cdot J_1} \end{pmatrix} \quad (77)$$

$$\cdot \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2)} & e^{-\beta(J_1+J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(-J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1-J_2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{\beta(J_1-J_2)} & e^{\beta(-J_1+J_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-\beta(J_1+J_2)} & e^{\beta(J_1+J_2)} \end{pmatrix}$$

$$\cdot L_{2,2} = \begin{pmatrix} e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} & -2e^{-\beta \cdot J_2} \\ -2e^{-\beta \cdot J_2} & e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} \end{pmatrix}$$

Analogamente ao feito na expressão (74), obtém-se:

$$\langle s_1 \cdot s_3 \rangle_{g=2} = \frac{\sum_{i,j} (R_{2,2})_{i,j}}{Z_2} = \frac{e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} - 2e^{-\beta \cdot J_2}}{e^{\beta(2J_1+J_2)} + e^{\beta(-2J_1+J_2)} + 2e^{-\beta \cdot J_2}} \quad (78)$$

Note que neste caso não há generalização feita para o caso  $c>0$ . Na verdade, o objetivo é modelar a cadeia infinita; portanto, todas as interações devem ser consideradas sempre. A cadeia infinita tem um tipo de simetria de forma que a correlação entre dois spins só depende da distância entre eles, portanto a correlação entre  $s_1$  e  $s_{1+r}$  é a mesma que existe entre  $s_i$  e  $s_{i+r}$  para um  $i$  qualquer.

Deste modo, pode-se então escrever:

$$C_{g,r} = \langle s_i \cdot s_{i+r} \rangle_g = \frac{\sum_{i,j} (R_{g,r})_{i,j}}{Z_g}, \quad (79)$$

onde  $R_{g,r}$  é dado pela expressão (70).

### 3.5.2. O critério de transição de fase

Utilizando a expressão (79) pode-se achar a função de correlação  $C_{g,r}(T)$  em função de  $g$  (ordem máxima das interações) e  $r$  (distância entre os spins), para uma certa temperatura  $T$ .

Pode-se então traçar os gráficos de  $C_{g,r}(T)$  contra  $g$  para diferentes valores de  $T$  e observar para quais valores de  $T$ ,  $C_{g,r}(T)$  tende a aumentar ou diminuir para cada valor de  $g$ . Note que neste caso aumentar  $g$  equivale a aumentar o número de spins pelo formalismo mostrado na subseção anterior, portanto tem-se a temperatura crítica a partir da qual o  $g$ -ésimo spin tenderá a se correlacionar ou não com os anteriores, a ser denominada  $T_{g,r}$ , para cadeias finitas. Com uma série destas temperaturas pode-se estimar a temperatura crítica da cadeia infinita com a técnica dos aproximantes de Padé [18,19].

É lógico que para se achar a temperatura crítica é necessário que exista transição de fase; em trabalhos anteriores [21,22] esta técnica já foi usada para estimar a temperatura crítica para o caso ferromagnético. O caso ferromagnético é um caso bastante seguro para se aplicar a técnica, pois resultados analíticos [11-14] garantem que só ocorre transição de fase para  $1 < \alpha \leq 2$ , no entanto não existem resultados analíticos para os casos desta dissertação.

Para se determinar se ocorrerá transição de fase nos presentes casos pode-se tentar achar a temperatura acima da qual  $C_{g,r}(T)$  tende a crescer com  $g$  para valores altos de  $g$  (o que indicaria a ferromagnética) e a decrescer para valores de  $T$  menores (o que indicaria a fase paramagnética).

Se  $C_{g,r}(T)$  for sempre crescente (respectivamente decrescente) para valores altos de  $g$ , isto indica que o sistema está sempre na fase ferromagnética (respectivamente paramagnética) de modo que não há ocorrência de transição de fase. Contudo, é muito complicado determinar a faixa de valores de  $\alpha$  para o qual existe transição de fase com base neste critério pois, o máximo valor de  $g$  que se conseguiu usar até o presente momento foi 25, com a capacidade das máquinas utilizadas; os gráficos do caso ferromagnético já indicam que este número é muito pequeno para se determinar a ocorrência da transição.

Contudo existem alguns casos em que a evidência da ocorrência ou da ausência de transição de fase é mais explícito. Neste trabalho apresentar-se-ão alguns resultados para o caso II, pois é o mais próximo do caso ferromagnético e portanto o mais provável para se identificar a ocorrência da transição de fase.

### **3.6. Implementação computacional**

Para implementar o método apresentado ao longo deste capítulo foram feitos um conjunto de programas em linguagem Fortran. Existe um programa inicial que gera saídas em formato binário com as energias de configuração do sistema e os outros programas secundários que a partir dos resultados do programa inicial acham as propriedades termodinâmicas para diferentes temperaturas com o escalamento desejado, permitindo traçar as curvas destas propriedades com o software Origin.

O primeiro programa recebe como entrada o expoente de decaimento e os valores de  $g$  e  $c$ ; os outros programas recebem estes valores (e o do campo externo caso se queira calcular a magnetização) e o conjunto de valores de temperatura para o qual devem achar os valores das propriedades termodinâmicas calculadas. É lógico que os programas secundários precisam da saída do programa inicial para desempenhar seu papel.

A vantagem de se ter vários programas que geram resultados a partir de um inicial é que não é necessário obter todas as informações sobre o sistema

sempre. Por exemplo: se por alguma razão existe interesse em se ter a energia livre em função da temperatura para um conjunto de valores de  $g$ ,  $c$  e do expoente de decaimento, só é preciso utilizar o programa inicial e o programa que gera os pontos dessa curva; ou seja, não é preciso gerar os pontos das curvas do calor específico, da entropia, função de correlação e da energia livre com o escalamento de Tsallis ... . Além disso, a fragmentação em programas menores permite identificar e depurar os erros com mais facilidade quando estes estão presentes.

Vale a pena enfatizar que no método apresentado não existem restrições quanto aos valores nem aos sinais das constantes de acoplamento. Na versão original do programa usada em trabalhos pretéritos para estudar o caso da cadeia ferromagnética, bastava especificar o valor da constante de acoplamento maior e obter as outras por uma lei de potência. Para este trabalho fez-se uma adaptação em que se lia um novo parâmetro de entrada decimal que quando convertido para binário dava o sinal das constantes de acoplamento, permitindo assim considerar as interações antiferromagnéticas, mas mantendo a queda da magnitude com uma lei de potência. Fez-se um programa auxiliar que gerava essa entrada a partir da configuração de sinais desejada. Essa generalização permite trabalhar com configuração qualquer de sinais, inclusive não periódica.

Vale a pena enfatizar que não há nenhuma restrição do método que obrigue a se trabalhar com interações cujos módulos decaíam com lei de potência de modo que é possível adaptar o programa para ler um vetor com os valores (incluindo sinal) das constantes de acoplamento individualmente, permitindo assim estudar sequências não periódicas, vidros de spin, seqüências de Fibonacci e outros problemas de interesse da comunidade científica.



## 4. Resultados

Neste capítulo pretende-se apresentar os resultados obtidos com o método mostrado no capítulo anterior para o sistema em questão nesta dissertação, definido por (5), (7) e (8).

Estes resultados englobam o cálculo das propriedades termodinâmicas, a validade do escalamento de Tsallis e um pequeno estudo da transição de fase para um dos casos; mostrar-se-ão também alguns resultados que são úteis para atestar a confiabilidade do método.

Neste capítulo continuar-se-á usando a convenção definida no capítulo anterior em que  $g$  é a ordem máxima das interações da cadeia e o número total de spins é  $N=g+c+1$ .

Em todos os resultados apresentados o campo magnético externo é nulo, Isso é razoável; pois a não extensividade do sistema, quando presente, se deve ao termo de acoplamento e não ao do campo externo. O sistema com hamiltoniano dado pelo termo do campo externo sozinho tem solução analítica que é amplamente conhecida e é extensiva; este hamiltoniano já foi utilizado para modelar o paramagnetismo.

Este capítulo está dividido em três seções: a primeira apresenta os resultados quanto à validade do escalamento de Tsallis mostrado no capítulo II; a segunda mostra as propriedades termodinâmicas e complementa o que foi dito na primeira; a terceira exhibe alguns resultados iniciais sobre o estudo da transição de fase para o caso II.

A primeira seção é dividida em cinco subseções cada uma encarregada de um dos casos da expressão (8); na segunda seção esta subdivisão não é mantida mas procura-se dar exemplos que complementem o que foi mostrado na seção anterior e que atestem a confiabilidade do método; a última seção apresenta alguns resultados e indica uma boa perspectiva para trabalhos futuros.

Vale a pena ressaltar que na primeira seção as escalas dos gráficos da energia livre contra a temperatura foram alteradas de modo a ampliar a região de baixas temperaturas, que é aquela em que os escalamentos são mais difíceis de serem válidos.

Para valores altos de temperatura é sempre mais fácil achar um colapso das curvas da energia livre para diferentes valores de  $g$  e  $c$ , definidos de acordo com a convenção da seção anterior por isso então os gráficos se concentram na região em que a temperatura tende a zero pois, ela representa a pior situação para a validade dos escalamentos.

## 4.1. Quanto ao Escalamento de Tsallis

### 4.1.1. Caso I – A(1,0)

O caso I (na convenção das expressões (5), (7) e (8)) consiste na cadeia antiferromagnética, como mostrado anteriormente.

Neste caso pode-se provar analiticamente que o sistema é extensivo, pois a energia é proporcional a  $N$ . Basta tomar o caso em que  $\alpha=0$  e  $c=0$ , que é o caso em que todos os spins interagem entre si e não existe decaimento das interações com a distância (campo médio), portanto o mais provável de ser não extensivo.

Neste caso tomando uma cadeia com  $N$  spins (supondo  $N$  par sem perda de generalidade) a configuração de menor energia consiste em metade dos spins com uma orientação e a outra metade com outra orientação. Considerando as expressões 5 a 7 a energia desta configuração será dada por:

$$\begin{aligned} \frac{U}{-J_0} = & \left[ \left( \frac{N}{2} - 1 \right) \cdot 1 + \left( \frac{N}{2} \right) \cdot (-1) \right] + \left[ \left( \frac{N-2}{2} \right) \cdot 1 + \left( \frac{N-2}{2} \right) \cdot (-1) \right] + \\ & + \left[ \left( \frac{N-2}{2} - 1 \right) \cdot 1 + \left( \frac{N-2}{2} \right) \cdot (-1) \right] + \dots + \left[ \left( \frac{N-(N-1)}{2} - 1 \right) \cdot 1 + \left( \frac{N-1}{2} \right) \cdot (-1) \right] \end{aligned} \quad (80)$$

onde o primeiro termo entre colchetes reflete a interação do primeiro spin com os outros da cadeia, o segundo a interação do segundo spin com os

outros remanescentes e assim por diante. Como cada colchete dos spins ímpares dá (-1) e cada um de spin par dá 0 e existem N-1 colchetes, o que no limite termodinâmico é o mesmo que N colchetes, tem-se:

$$U = J_0 \cdot \frac{N}{2} \quad (J_0 < 0) \quad (81)$$

o que evidencia que a extensividade do sistema. A degenerescência deste estado de energia é dada trivialmente por

$$\Omega = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}\right)! \cdot \left(\frac{N}{2}\right)!} \quad (82)$$

logo a entropia é dada no limite termodinâmico por :

$$S = k_B \cdot \ln \left[ \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}\right)! \cdot \left(\frac{N}{2}\right)!} \right] = N \cdot k_B \cdot \ln 2 \quad (83)$$

onde se usou a expansão de Stirling na última expressão.

Esta configuração de energia no estado fundamental para  $\alpha=0$  não apresenta nenhuma magnetização, da mesma maneira que para  $\alpha \rightarrow \infty$  também não há magnetização e a configuração de energia mínima é similar com as mesmas propriedades.

Assim sendo a entropia deve ser constante e os gráficos da energia livre contra a temperatura devem ser retas, como se pode ver nas próximas figuras. Este tipo de comportamento não deve se manter para outros valores

de  $c$  além de zero, pois aí nem todos os spins da cadeia estarão interagindo entre si com a mesma intensidade.

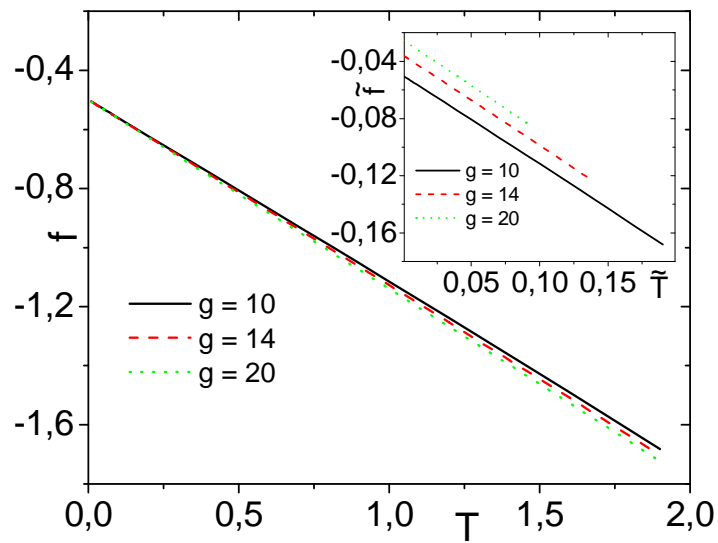


Figura 1 – Energia livre contra temperatura com escalamento normal e inset com o de Tsallis (caso  $A(1,0)$ ).  $\alpha=0$ ,  $c=0$  e  $g=10, 14, 20$ .

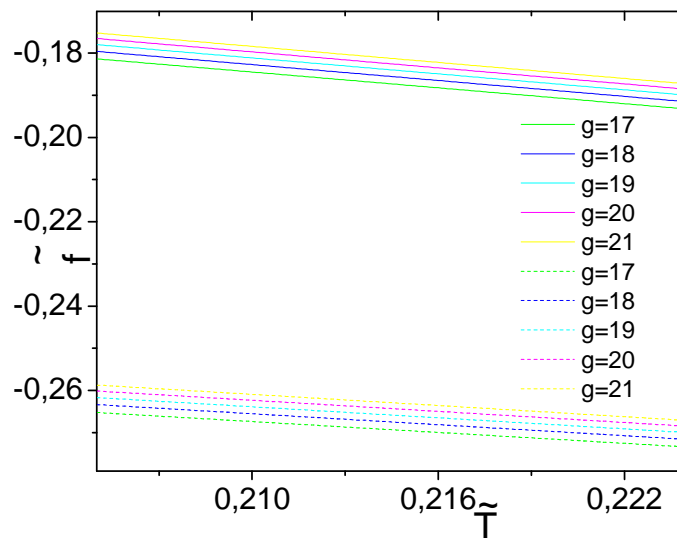
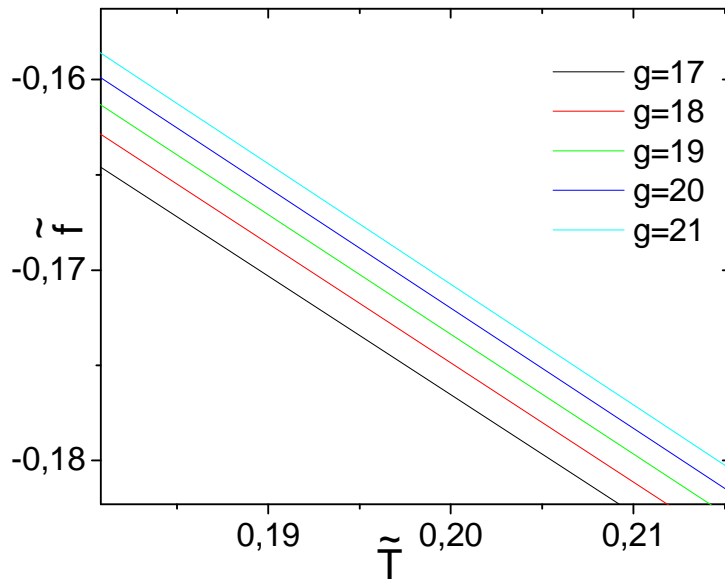
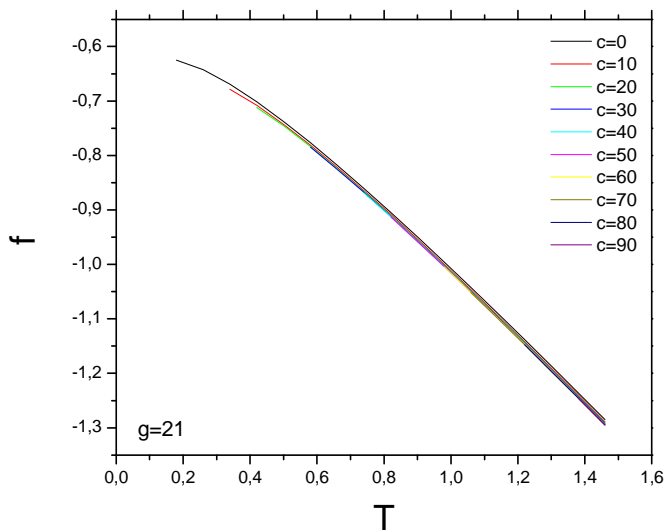


Figura 2 – Energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis (caso  $A(1,0)$ ).  $\alpha=0,5$  (linhas cheias) e  $\alpha=1,2$  (linhas tracejadas),  $c=0$  e  $g=17, 18, \dots, 21$ .



**Figura 3 – Energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis (caso A(1,0)).  $\alpha = 0,5$ ,  $c=0$  e  $g=17, 18, \dots, 21$  com  $c=0$ .**



**Figura 4 – Energia livre contra temperatura com o escalamento normal (caso A(1,0)).  $\alpha = 0,5$ ,  $g=21$  e  $c=0, 10, 20, \dots, 90$ .**

A figura 1 mostra a energia livre contra a temperatura para  $\alpha=0$  e  $c=0$  com os valores de  $g$  10, 14 e 20. A figura maior mostra com o escalamento normal e a menor com o de Tsallis. Pode-se ver que o escalamento normal

apresenta melhor convergência das curvas para a variação de  $g$  do que o de Tsallis.

Na figura 2 tem-se a energia livre contra a temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0,5$  (linhas cheias) e  $\alpha=1,2$  (linhas tracejadas) com  $c=0$  e  $g$  variando de 17 a 21 e na figura 3 tem-se a energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha =0,5$  e  $g=17,18,19,20,21$  com  $c=0$ . As figuras 2 e 3 mostram que a distância entre as curvas não muda sensivelmente quando se aumenta  $g$  e se usa o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0,5$  e  $\alpha=1,2$ . Note que a escala das figuras 2 e 3 está bem mais ampliada que a da figura 1.

As expressões (12) e (13) mostram que o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0$  no caso da cadeia finita é uma simples mudança de escala no gráfico da energia livre, com o mesmo fator em ambos os eixos que seria  $N$  por (12), mas como já foi discutido anteriormente, deve-se usar  $g$  em vez de  $N$ . Logo cada curva difere da curva do escalamento usual pelos fatores de multiplicação 10, 14 e 20 no gráfico mostrado, o que não leva a uma boa convergência do escalamento de Tsallis. É óbvio que as variações absolutas serão menores com o escalamento de Tsallis; afinal, os números foram divididos por inteiros maiores que 1 mas a variação relativa é maior.

A figura 4 mostra a energia livre contra temperatura sem o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0,5$  e  $g=21$  com  $c$  variando de 0 a 90 com incrementos de 10. Ela mostra boa convergência das curvas da energia livre para  $\alpha=0,5$  e  $g=21$  quando se varia  $c$  no escalamento usual.

Os resultados numéricos obtidos com o formalismo de matriz transferência apresentado neste trabalho sugerem que a cadeia antiferromagnética seja extensiva para todo valor de  $\alpha$ , ou seja, que o escalamento usual seja válido neste caso; o que condiz com o resultado analítico apresentado no início desta subseção pela expressão (85).

### 4.1.2. Caso II – F(5,1)

O caso II (na convenção das expressões (5), (7) e (8)) é aquele em que apenas as interações de ordem múltiplas de 6 são antiferromagnéticas, portanto é o mais próximo dos apresentados da situação ferromagnética.

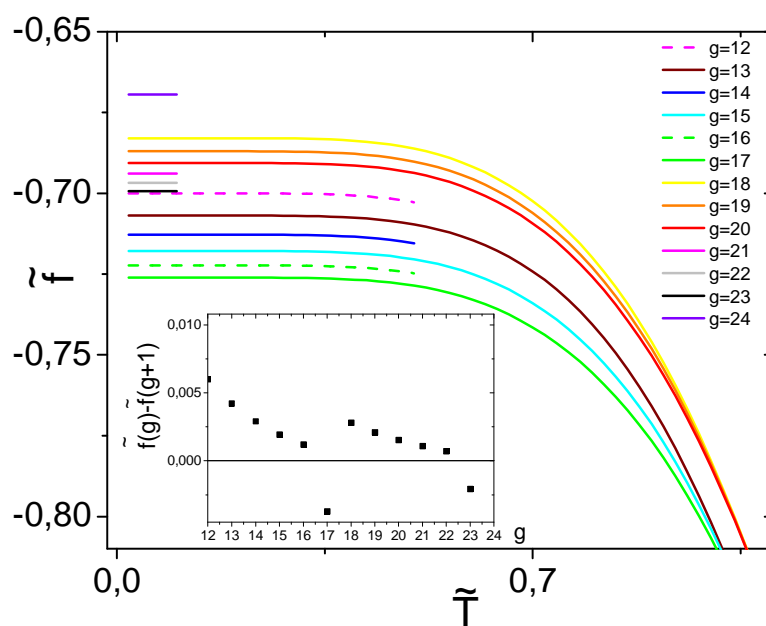
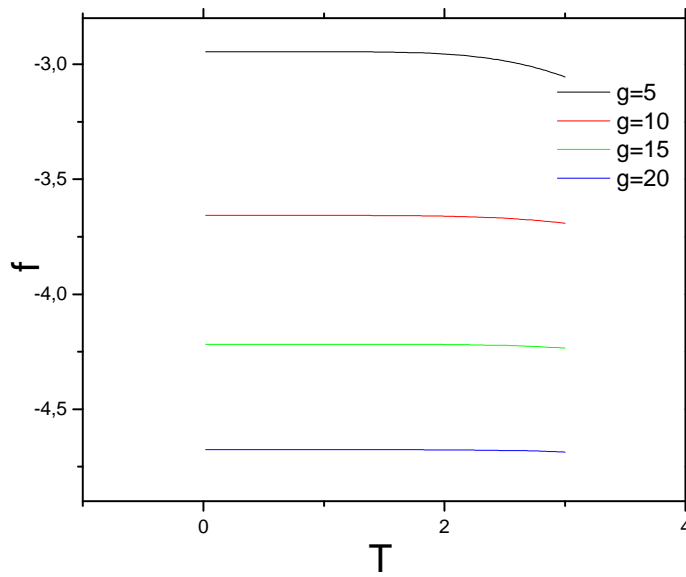
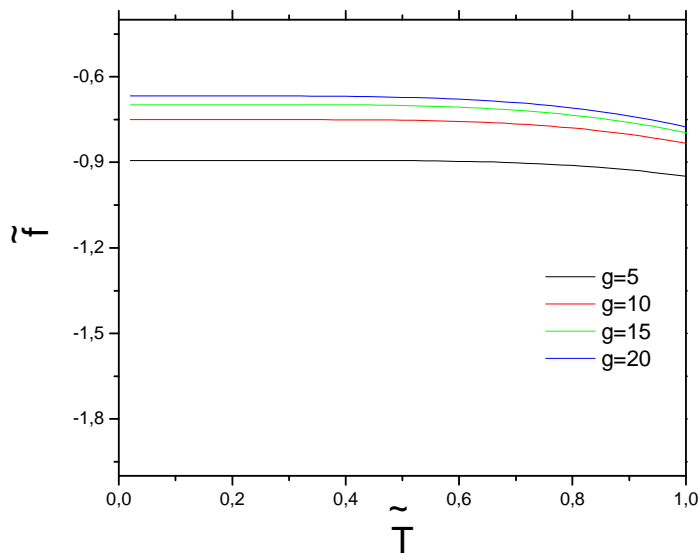


Figura 5 – Energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(5,1)).  $\alpha=0$ ,  $c=95$  e  $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.

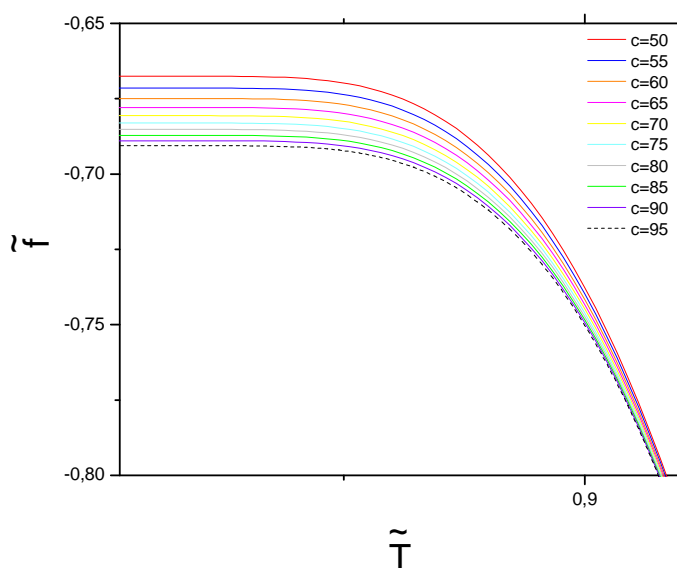


**Figura 6 – Energia livre contra a temperatura no escalamento usual (caso  $F(5,1)$ ).  $\alpha=0,6$ ,  $c=99$  e  $g=5, 10, 15, 20$ .**



**Figura 7 – Energia livre contra a temperatura com escalamento de Tsallis (caso  $F(5,1)$ ).  $\alpha=0,6$ ,  $c=99$  e  $g=5, 10, 15, 20$ .**





**Figura 8 – Energia livre contra a temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(5,1)).  $\alpha=0,6$  ,  $g=20$  e  $c=50, 55, 60, \dots, 95$ .**

A figura 5 apresenta a energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0$  e  $c=95$  com  $g$  variando de 14 a 24 e a inserção menor mostra a diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura. Vale ressaltar que nesta figura há curvas feitas para intervalos menores de variação da temperatura pois só havia interesse nos valores de baixas temperaturas para compará-las entre si, o comportamento global da curva já está bastante claro.

A figura 6 mostra a energia livre contra a temperatura no escalamento usual com  $\alpha=0,6$  e  $c=99$  com  $g$  assumindo os valores 5, 10, 15 e 20 e a figura 7 mostra o mesmo resultado da figura 6 quando se usa o escalamento de Tsallis.

Deste modo as figuras 5, 6 e 7 mostram que a energia livre apresenta um melhor colapso das curvas ao se variar  $g$  quando se usa o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0$  e  $\alpha=0,6$ ; vê-se que à medida que  $g$  aumenta a diferença entre as curvas diminui.

Em contrapartida, a figura 6 mostra que as curvas da energia livre do sistema em questão não colapsam quando se usa o escalamento normal

para  $\alpha=0,6$ ; vê-se também que a diferença entre as curvas varia muito pouco com o aumento de  $g$ , evidenciando a não-extensividade do sistema.

A figura 5 mostra que a diferença entre as curvas apresenta um salto a cada variação de 6 no valor de  $g$ ; essa periodicidade nos saltos se deve à aparição das interações antiferromagnéticas que surgem quando a ordem das interações é múltipla de 6.

O inset da figura 5 mostra que tomando valores de  $g$  entre dois múltiplos consecutivos de 6 a energia livre em função da temperatura tende a diminuir monotonicamente, dando saltos grandes no sentido crescente quando se obtém os múltiplos de 6. Isso quer dizer que à medida que se aumenta  $g$  a energia livre vai diminuindo, depois aumenta subitamente devido ao aparecimento das interações antiferromagnéticas, mudando o sinal entre a diferença das energias livres calculadas com  $g$  e  $g+1$ , voltando a diminuir para depois aumentar novamente. Isto difere do que acontece no caso ferromagnético em que a energia livre apresenta um comportamento monotônico com  $g$ , como na referência [21].

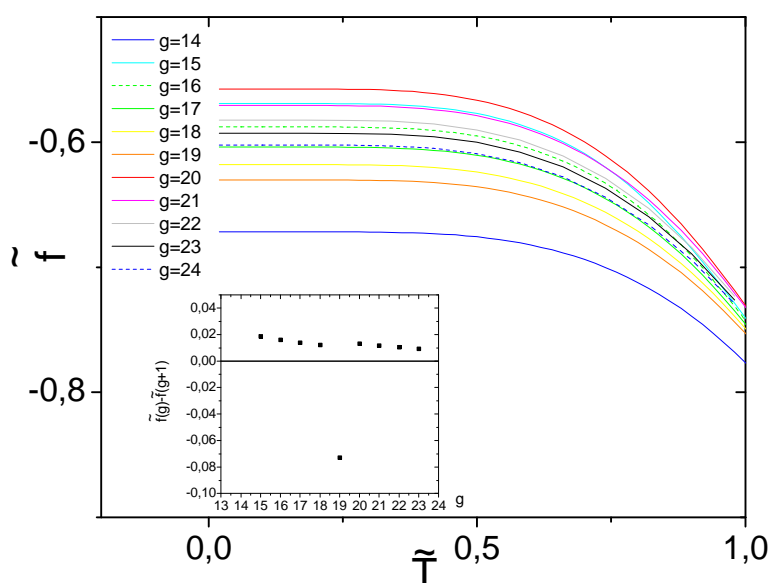
Embora a energia livre tenda a diminuir entre cada conjunto de valores de  $g$  entre dois múltiplos de 6, vê-se que as curvas que diferem por um múltiplo de 6 apresentam um comportamento crescente com  $g$  quando se usa o escalamento de Tsallis. Isto evidencia um comportamento da energia livre decrescente com  $g$ , exceto para os valores de  $g$  que são múltiplos de 6 nos quais o comportamento é crescente. Vê-se também que a diferença entre as curvas com diferença de  $g$  múltipla de 6 diminui em módulo com o aumento de  $g$  evidenciando convergência da energia livre com este escalamento.

A figura 8 mostra que as curvas da energia livre não variam muito quando se varia  $c$  para  $g=20$ . Ainda que seja possível distinguir bem as curvas vê-se que a diferença entre os valores da energia livre é inferior a 0,05 unidades da energia livre numa variação de  $c$  em até 45, para qualquer valor de temperatura. Este resultado é esperado, pois: aumentar o número de spins da cadeia sem se aumentar a ordem das interações corresponde a uma situação tipicamente extensiva em que o escalamento usual deve valer; logo para a cadeia finita, como é o caso, as curvas devem estar bem aglutinadas ao se usar o escalamento de Tsallis, ainda que a variação relativa entre elas não se mostre tão pronunciada.

Como as expressões (12), (13) e (16) mostram: para  $\alpha > 1$  a diferença entre o escalamento usual e o de Tsallis é dada apenas por um fator multiplicativo no limite termodinâmico, correspondendo a uma mudança de escala no escalamento usual, os resultados apresentados indicam que o escalamento de Tsallis definem bem as grandezas intensivas usuais, sugerindo então que a energia livre é extensiva para  $\alpha > 1$ , mas obedece ao escalamento de Tsallis  $\alpha < 1$ . Portanto, este último escalamento deve funcionar adequadamente para todos os valores de  $\alpha$  no presente caso.

### 4.1.3. Caso III – F(4,1)

É o caso em que as interações antiferromagnéticas são as de ordem múltipla de 5 (na convenção das expressões (5), (7) e (8)), é o segundo caso mais próximo da situação ferromagnética.



**Figura 9 – Energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(4,1)).  $\alpha=0$ ,  $c=95$  e  $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.**

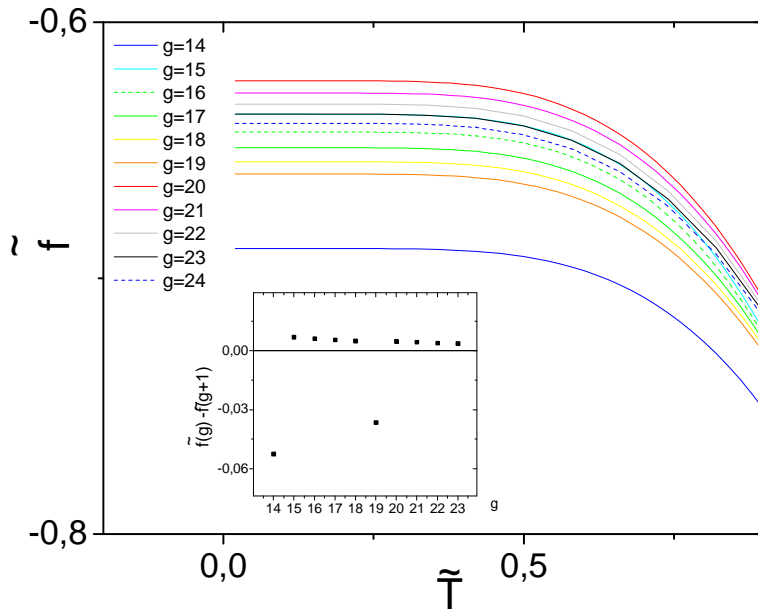


Figura 10 – Energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(4,1)).  $\alpha=0,6$ ,  $c=95$  e  $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.

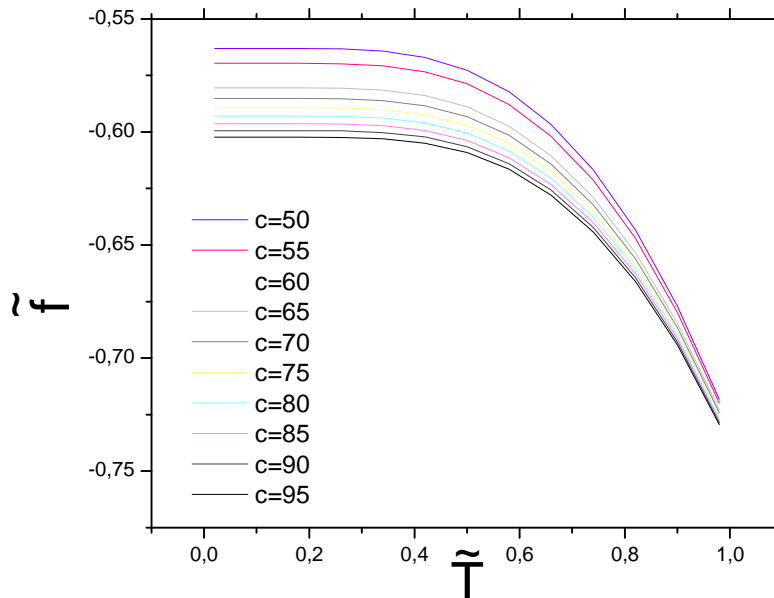
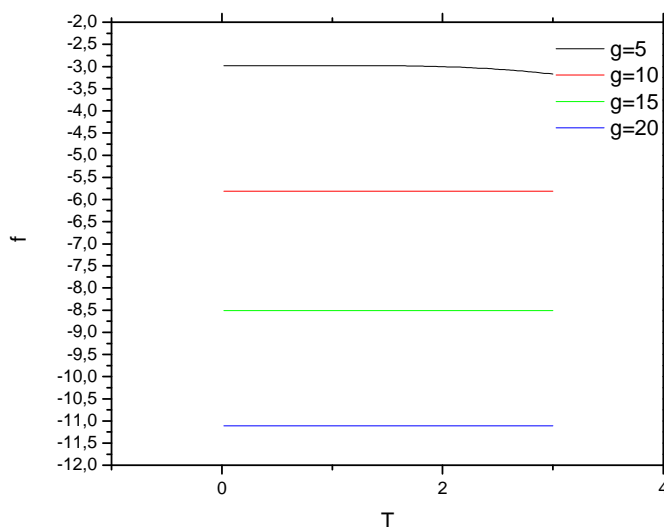


Figura 11 – Energia livre contra a temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(4,1)).  $\alpha=0$ ,  $g=24$  e  $c=50, 55, 60, \dots, 95$ .



**Figura 12 – Energia livre contra a temperatura no escalamento normal (caso F(4,1)).  $\alpha=0$  ,  $c=99$  e  $g=5, 10, 15, 20$ .**

Nas figuras 9 e 10 tem-se a energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0$  (figura 9) e  $\alpha=0,6$  (figura 10) com  $c=95$  e  $g$  variando de 14 a 24. A figura menor mostra a diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.

A figura 11 apresenta a energia livre contra a temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0$ ,  $g=24$  e  $c$  variando de 50 a 95 com incrementos de 5; enquanto a figura 12 mostra a energia livre contra a temperatura com o escalamento normal para  $\alpha=0$ ,  $c=99$  e  $g$  variando de 5 a 20 em incrementos de 5.

As figuras 9, 10 e 12 mostram que as curvas da energia livre se aproximam mais quando se usa o escalamento de Tsallis do que o usual. A figura 12 mostra que quando se usa o escalamento normal a diferença entre as curvas não muda muito quando se toma valores maiores de  $g$ .

As figuras 9 e 10 mostram que essas diferenças tendem a diminuir com o aumento de  $g$  para  $\alpha=0$  e  $\alpha=0,6$  evidenciando boa convergência das curvas quando se usa o escalamento de Tsallis. Elas também mostram que, fixado um dado valor de temperatura, mantendo  $c$  fixo, a energia livre tende a decrescer com o aumento de  $g$  se este estiver entre dois múltiplos

consecutivos de 5, mas este comportamento muda quando  $g$  é múltiplo de 5, devido à aparição das interações antiferromagnéticas.

Os insets das figuras 9 e 10 mostram que o módulo da diferença entre as curvas tende a decrescer com  $g$ , para  $g$  entre dois múltiplos de 5, dando saltos no sentido contrário nos múltiplos de 5. Elas também mostram que tomando-se curvas cujos valores de  $g$  diferem por múltiplos de 5, a energia livre tende a crescer com  $g$ . Isto evidencia um comportamento decrescente da energia livre com  $g$ , exceto para os valores de  $g$  múltiplos de 5 nos quais o comportamento passa a ser crescente.

A figura 11 mostra que para  $\alpha=0$  e  $g=24$  a diferença na energia livre é inferior a 0,06 para todo valor de temperatura quando se varia  $c$  entre 50 e 95 usando o escalamento de Tsallis, ainda que a variação relativa entre as curvas seja pequena; este resultado é equivalente ao do caso anterior e justificado por argumentos análogos, ou seja, mais uma vez vê-se que fixar  $g$  e aumentar  $c$  corresponde a uma situação extensiva.

Por argumentos análogos ao da subseção anterior espera-se então que o escalamento de Tsallis seja válido (variando-se  $g$ ) neste caso para todos os valores de  $\alpha$ , sendo que para  $\alpha>1$  o escalamento usual também vale.

#### **4.1.4. Caso IV – F(2,1)**

É o caso em que as interações antiferromagnéticas são as de ordem múltipla de 3 (na convenção das expressões (5), (7) e (8)), é o terceiro caso mais próximo da situação ferromagnética.

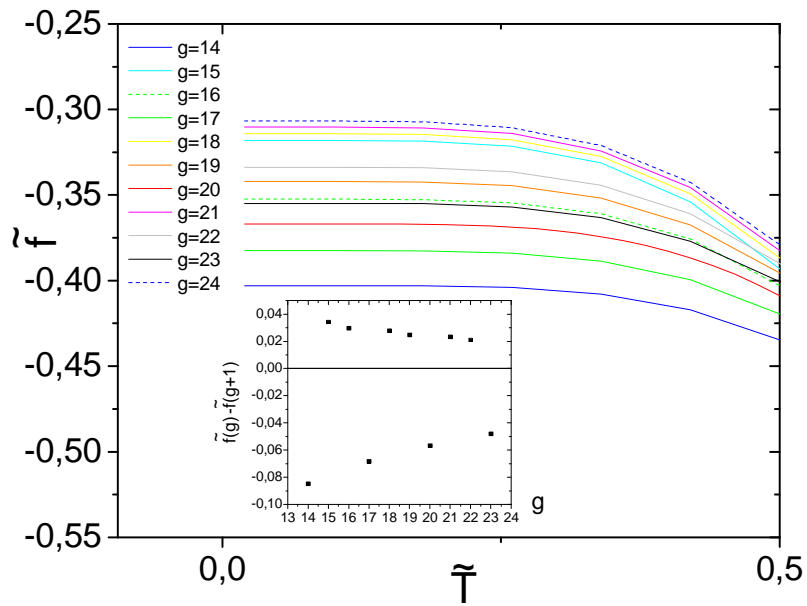


Figura 13 – Energia livre contra temperatura com o escalamento de Tsallis (caso F(2,1)).  $\alpha=0$ ,  $c=95$  e  $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.

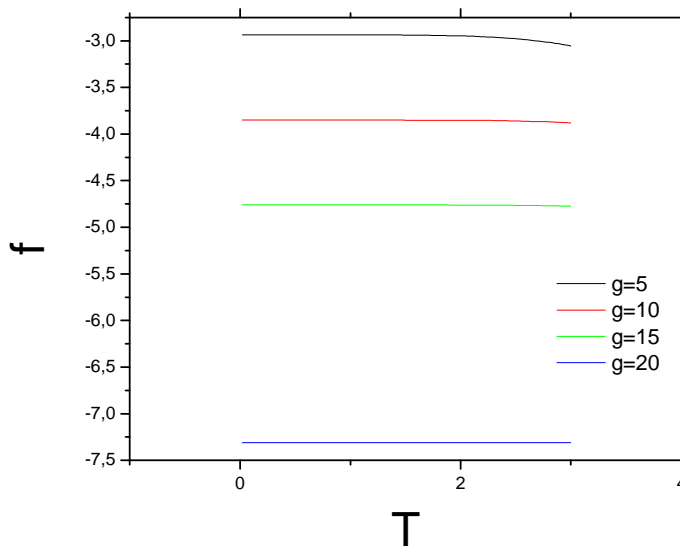
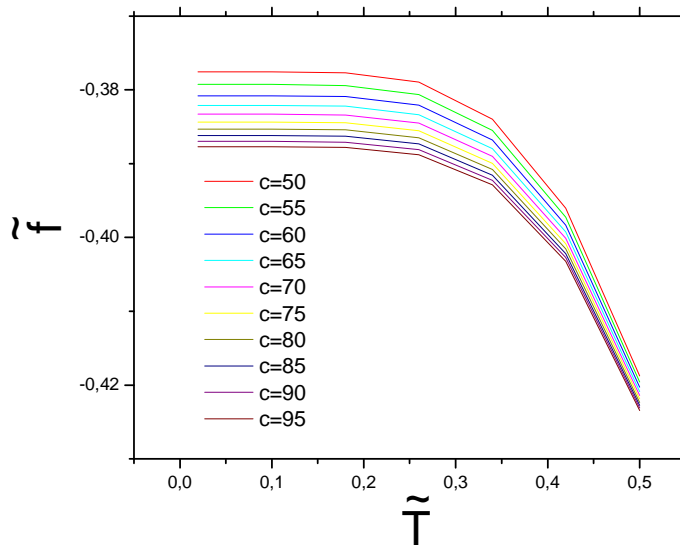
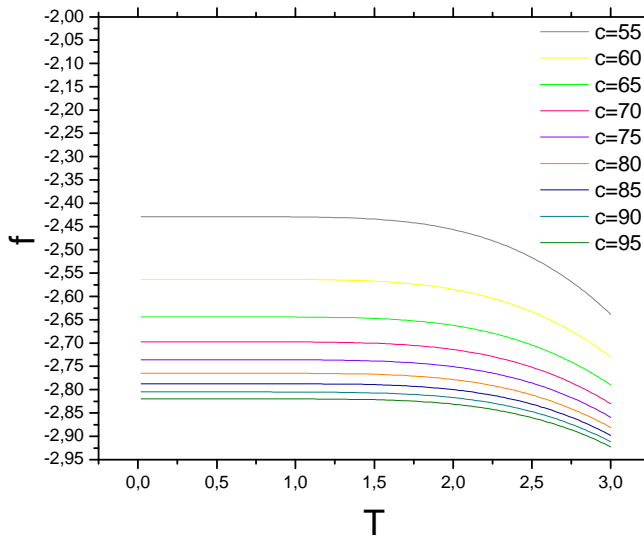


Figura 14 – Energia livre contra a temperatura no escalamento normal (caso F(2,1)).  $\alpha=0$ ,  $c=99$  e  $g=5, 10, 15, 20$ .



**Figura 15 – Energia livre contra a temperatura com escalamento de Tsallis (caso F(2,1)).  $\alpha=0,6$ ,  $g=21$  e  $c=50, 55, 60, \dots, 95$ .**



**Figura 16 - Energia livre contra a temperatura no escalamento normal (caso F(2,1)).  $\alpha=0,6$ ,  $g=20$  e  $c=55, 60, \dots, 95$ .**

A figura 13 apresenta o gráfico da energia livre contra a temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0$  e  $c=95$  com  $g$  variando de 14 a 24. A figura menor mostra a diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.



A figura 14 Mostra a energia livre contra a temperatura com o escalamento usual para  $\alpha=0$  e  $c=99$  com  $g$  assumindo os valores 5, 10, 15 e 20.

Nas figura 15 tem-se a energia livre contra a temperatura com o escalamento de Tsallis para  $\alpha=0,6$  e  $g=21$  com  $c$  variando de 50 a 95 com incrementos de 5; e na figura 16 tem-se a energia livre contra a temperatura com o escalamento normal para  $\alpha=0,6$  e  $g=20$  com  $c$  variando de 55 a 95.

Na figura 13 vê-se que a diferença entre as curvas da energia livre tende a diminuir com o aumento de  $g$  para  $\alpha=0$  e  $c=95$ , enquanto a figura 14 mostra que essas diferenças não mudam tanto com o aumento de  $g$  e são bem maiores quando se usa o escalamento usual.

A figura 13 evidencia que a energia livre tem um comportamento crescente com  $g$  para  $g$  entre múltiplos de 3, dando saltos nos múltiplos de 3 devido a aparição das interações antiferromagnéticas. Ela ainda mostra que a diferença entre as curvas calculadas com os valores de  $g$  e  $g+1$  diminui com o aumento de  $g$ , exceto quando  $g+1$  é múltiplo de 3. Ela também mostra que para valores de  $g$  cujas diferenças sejam múltiplos de três a energia livre cresce com  $g$ . Este resultado é análogo ao que acontece nos dois últimos casos só que as mudanças de comportamento ocorrem respectivamente para  $g+1$  múltiplo de 6 e 5 nos casos II e III.

A figura 15 mostra que variação da energia livre com o escalamento de Tsallis é inferior a 0,03 unidades de energia para todos os valores de temperatura com  $\alpha=0$  e  $g=21$  quando se varia  $c$  entre 50 e 95, contudo a variação relativa entre as curvas não é muito grande.

A figura 16 sugere que a variação da energia livre com o escalamento normal também apresenta boa convergência quando se varia  $c$ ; pois embora as diferenças entre as curvas sejam muito maiores que as da figura 15, na qual se usa o escalamento de Tsallis, a variação relativa entre elas sugere que haja convergência para  $c$  grande. Isto é razoável, pois: mantendo-se  $g$  fixo e aumentando-se  $c$ , a cada acréscimo unitário de  $c$  surgem  $g$  interações de modo que a energia deve obedecer ao escalamento usual. O mesmo acontece nos casos II e III, embora os gráficos não tenham sido mostrados.

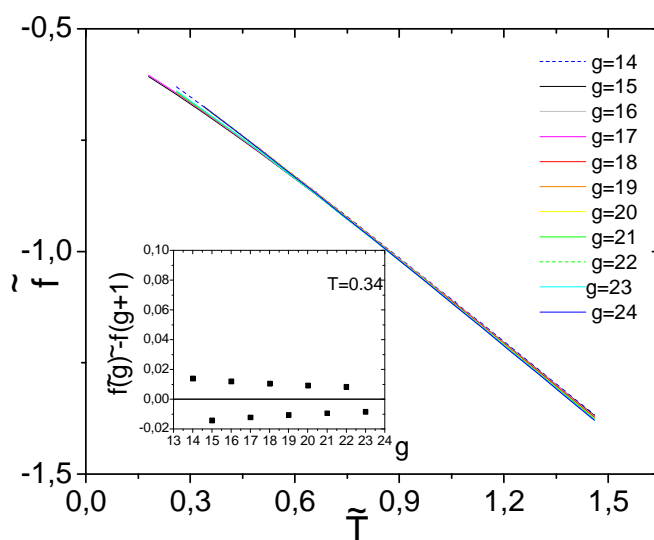
Os resultados da figura 15 sugerem que o escalamento de Tsallis apresenta boa convergência para  $\alpha < 1$  quando se varia  $c$ , enquanto que os da

figura 16 mostram que o escalamento usual não funciona. Os resultados das figuras 13 e 14 sugerem que o escalamento de Tsallis apresenta boa convergência quando se varia  $g$  com  $\alpha < 1$ , mas não o escalamento usual.

Por argumentos análogos aos das subseções anteriores espera-se então que o escalamento de Tsallis seja válido neste caso para todos os valores de  $\alpha$ , enquanto que o usual seja apenas para  $\alpha > 1$ .

#### 4.1.5. Caso V - F(1,1)

É o caso em que as interações antiferromagnéticas são as de ordem par (na convenção das expressões (5), (7) e (8)), é o caso mais próximo da situação antiferromagnética.



**Figura 17 – Energia livre contra temperatura no escalamento normal (caso F(1,1)).  $\alpha=0,1$ ,  $c=0$  e  $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.**

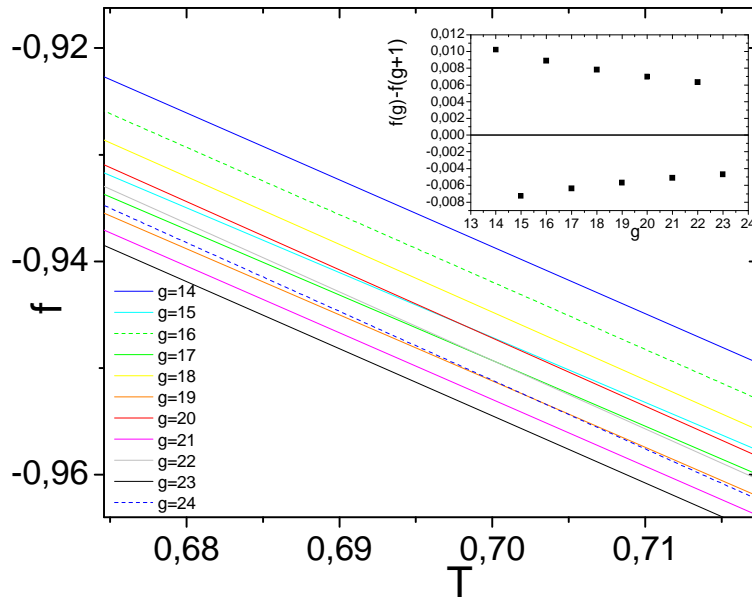


Figura 18 - Energia livre contra temperatura no escalamento normal (caso  $F(1,1)$ ).  $\alpha=0$ ,  $c=0$  e  $g=14, 15, \dots, 24$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.

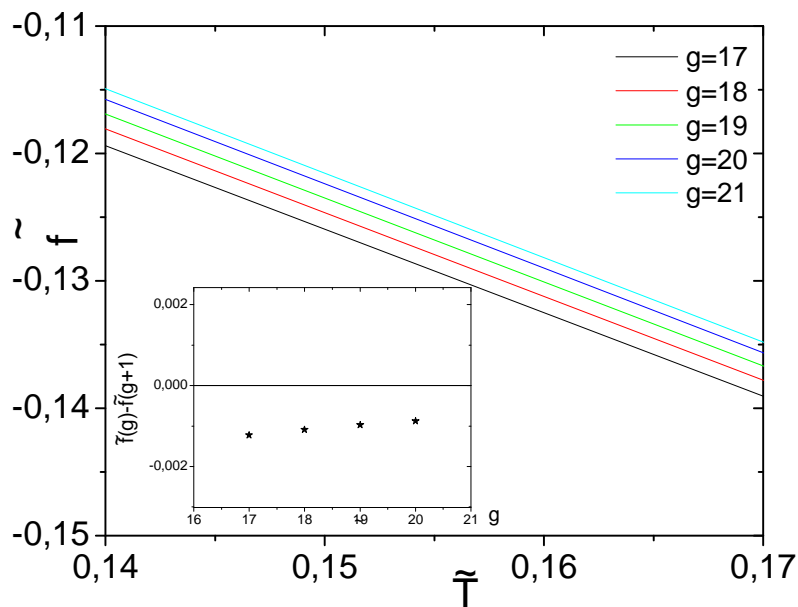
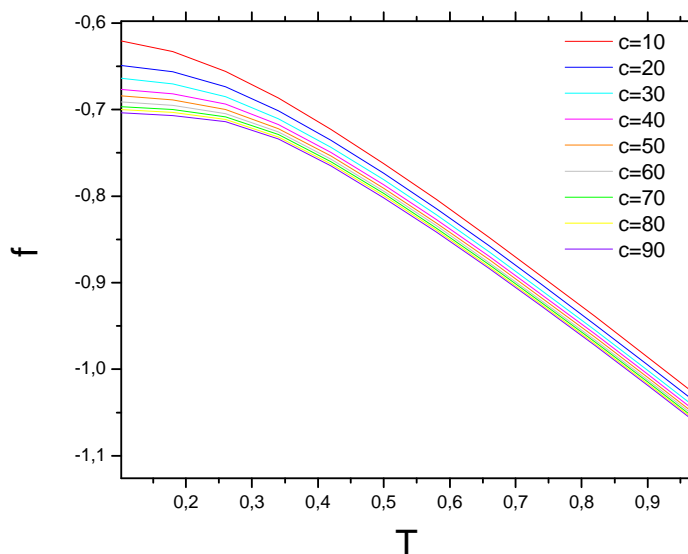


Figura 19 - Energia livre contra a temperatura com escalamento de Tsallis (caso  $F(1,1)$ ).  $\alpha=0$ ,  $c=0$  e  $g=17, 18, \dots, 21$ . Inset com diferença entre a energia livre calculada com os valores  $g$  e  $g+1$  para um valor fixo de temperatura.



**Figura 20 – Energia livre contra a temperatura no escalamento normal (caso  $F(1,1)$ ).  $\alpha=0,3$ ,  $g=24$  e  $c=10, 20, \dots, 90$ .**

As figuras 17 e 18 mostram que quando se usa o escalamento normal as curvas da energia livre para  $\alpha=0$  ou  $\alpha=0,1$  e  $c=0$  e diferentes valores de  $g$  colapsam (note que na figura 18 a escala é diferente da 17, se fosse a mesma as curvas seriam indistinguíveis); além disso a figura 18 mostra que a diferença entre as curvas tende a diminuir com o aumento do valor de  $g$ .

Os insets das figuras 17 e 18 mostram também que a diferença entre as curvas com valores pares de  $g$  tende a diminuir com o aumento de  $g$ , o mesmo acontecendo para as de valores ímpares; o comportamento alternado dos gráficos é reflexo da alternância da aparição das interações ferromagnéticas e antiferromagnéticas com o aumento de  $g$ .

A figura 19 mostra que quando se usa o escalamento de Tsallis as diferenças entre as curvas não tendem a diminuir consideravelmente, embora sejam pequenas, este tipo de escalamento também não reproduz a alternância esperada no gráfico das diferenças da energia livre contra  $g$  como o anterior.

A figura 20 mostra que quando se usa o escalamento normal a diferença entre os valores da energia livre para  $g=24$  e  $\alpha=0,3$  é inferior a 0,1 para todos

os valores de temperatura quando se varia  $c$  entre 10 e 90; além disto, essas diferenças tendem a diminuir com o aumento de  $c$ .

Estes resultados sugerem então que este caso representa um sistema extensivo para todo valor de  $\alpha$ ; afinal se a energia livre já não diverge para  $\alpha=0$  e  $\alpha=0,1$  certamente não divergirá para valores maiores que levam a um decaimento mais rápido das interações com a ordem. Espera-se que no limite termodinâmico o escalamento de Tsallis leve a uma energia livre nula exceto para  $\alpha>1$  quando este escalamento difere do usual por uma mudança de escala simples que só depende de  $\alpha$ . Apesar da interação de primeira ordem ser ferromagnética, o resultado obtido neste caso é análogo ao antiferromagnético (caso I).

No caso IV aparentemente o número de interações antiferromagnéticas ainda é muito baixo de modo que o sistema continua não-extensivo para  $\alpha<1$  como no caso ferromagnético.

#### **4.1.6. Caso VI – A(1,1)**

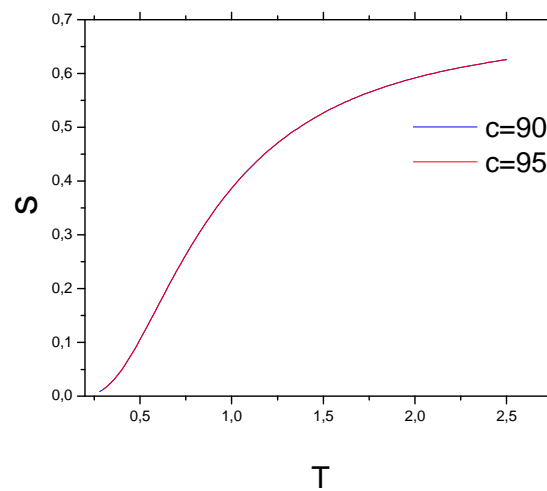
É o caso em que as interações de ordem ímpar são antiferromagnéticas e as de ordem par são ferromagnéticas.

A diferença entre esta situação e a do caso V é que não existe competição entre as interações no estado fundamental, devido à alternância dos sinais das constantes de acoplamento com as interações de ordem ímpar sendo antiferromagnéticas. Portanto, não ocorrem ligações frustradas, e a configuração do estado de menor energia é aquela em que cada spin tem alinhamento oposto aos seus primeiros vizinhos.

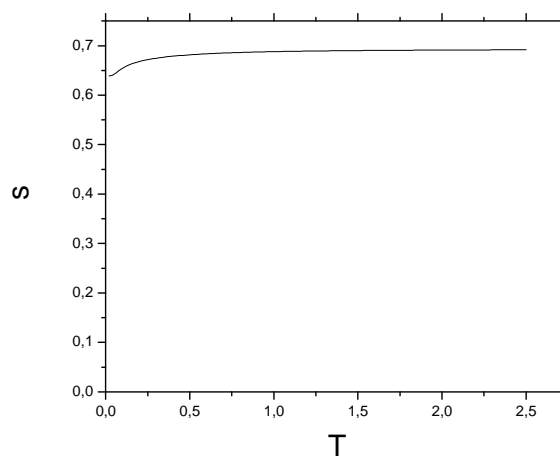
Neste caso a energia cresce mais rápido do que o número de spins e o escalamento usual não é válido. A configuração de energia fundamental pode ser interpretada com base no caso ferromagnético, basta pensá-la como duas cadeias ferromagnéticas, com o alinhamento de uma cadeia oposto ao da outra, resultando numa magnetização total nula. Deste modo, assim como no caso ferromagnético [21,22], o escalamento de Tsallis é o que vale.

## 4.2. Outras propriedades termodinâmicas

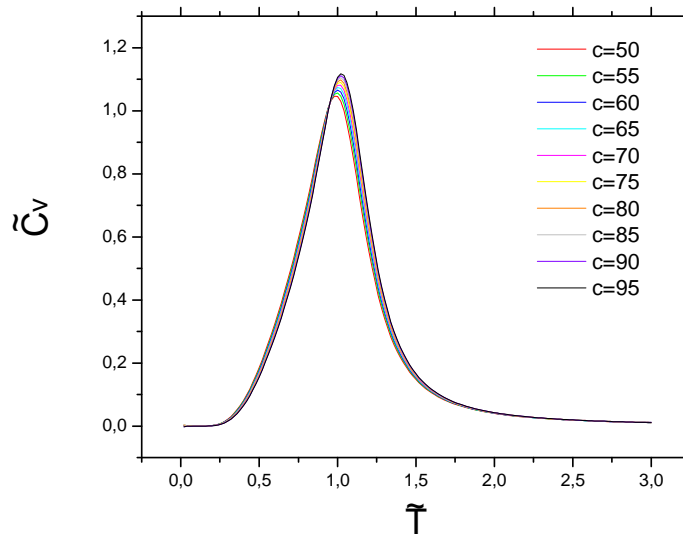
Conforme foi mostrado no capítulo 3 o método proposto neste trabalho permite calcular as propriedades termodinâmicas do sistema. A seguir, mostrar-se-ão alguns gráficos das propriedades termodinâmicas para os casos apresentados.



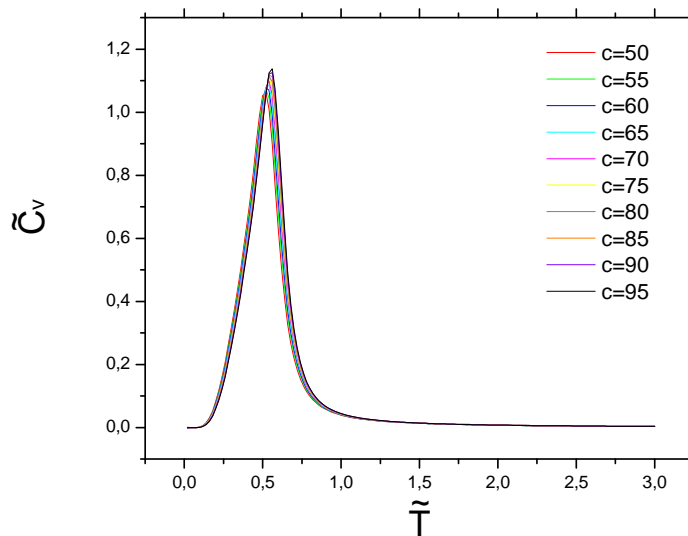
**Figura 21 – Entropia contra a temperatura: caso A(1,0),  $g=10$ ,  $c=90$  ou  $c=95$  e  $\alpha=20$ .**



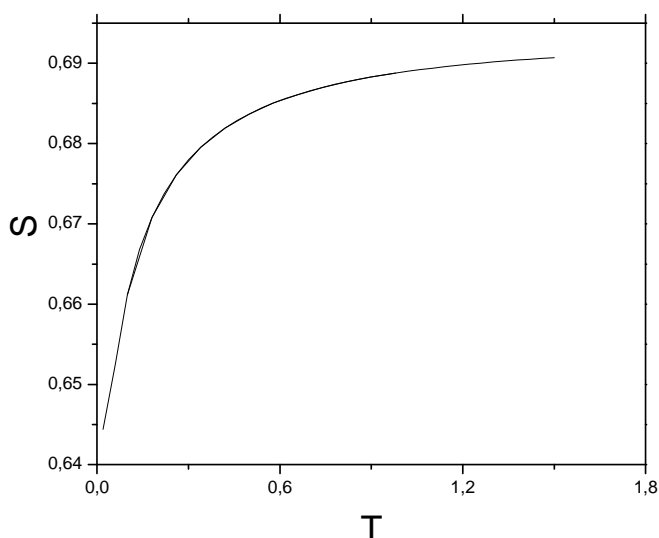
**Figura 22 – Entropia contra a temperatura: caso A(1,0),  $g=20$ ,  $c=0$  e  $\alpha=0$ .**



**Figura 23 – Calor específico contra temperatura com escalamento de Tsallis: caso F(5,1),  $g=20$ ,  $\alpha=0,6$  e  $c=50, 55, \dots, 95$ .**



**Figura 24 – Calor específico contra temperatura com escalamento de Tsallis: caso F(2,1),  $g=20$ ,  $\alpha=0$  e  $c=50, 55, \dots, 95$ .**



**Figura 25 – Entropia contra a temperatura: caso F(1,1),  $g=24$ ,  $c=0$  e  $\alpha=0$ .**

As figuras 21 e 22 apresentam os gráficos da entropia contra a temperatura para a cadeia antiferromagnética. Na figura 21 tem-se  $\alpha=20$  e  $g=10$  para  $c=90$  e para  $c=95$ ; na figura 22 tem-se  $g=20$ ,  $c=0$  e  $\alpha=0$ .

Nos gráficos das figuras 23 e 24 tem-se o calor específico contra a temperatura com o escalamento de Tsallis para  $g=20$  e  $c$  variando de 50 a 95 em incrementos de cinco. Na figura 23 tem-se o caso II, F(5,1), para  $\alpha=0.6$ ; e na figura 24 tem-se o caso IV, F(2,1), para  $\alpha=0$ .

A figura 25 apresenta a entropia contra a temperatura para o caso V, F(1,1), com  $g=24$ ,  $c=0$  e  $\alpha=0$ .

A figura 21 mostra o gráfico da entropia contra a temperatura da cadeia antiferromagnética para  $\alpha=20$  com o escalamento de Tsallis; este resultado mostra que quando a temperatura tende a zero, a entropia do sistema tende a zero.

Este resultado é esperado, pois  $\alpha=20$  é praticamente o caso em que  $\alpha$  é infinito e só há interações entre primeiros vizinhos (as interações de segunda ordem são  $2^{20}$  vezes mais fracas que as de primeira) cuja solução é conhecida e na qual a entropia tende a zero quando a temperatura tende a zero.



A cadeia antiferromagnética é extensiva; mais do que isso, a cadeia com interações de curto alcance é extensiva, no entanto para  $\alpha > 1$  a expressão (16) mostra que o escalamento de Tsallis difere do usual por uma transformação de escala no limite termodinâmico.

Além disso, como a cadeia é finita no sistema extensivo o escalamento de Tsallis também corresponderá a uma transformação de escala que depende de  $N$  (finito) pelas expressões (12) e (13). Como o valor  $s=0$  é invariante por transformação de escala, nos sistemas finitos os gráficos com escalamento de Tsallis podem ser usados para investigar a ocorrência de entropia residual.

A figura 22 mostra que a cadeia antiferromagnética apresenta entropia residual quando as interações são de longo alcance. Isso é esperado, pois cada spin tende a se opor aos seus vizinhos de primeira ordem e aos de ordem superior também, caracterizando um sistema repleto de ligações frustradas.

Como as interações caem com a distância, espera-se que no estado fundamental cada spin se oponha aos seus dois vizinhos, caracterizando uma cadeia com sinais alternados de spin, que possui obviamente degenerescência 2. Portanto espera-se que a entropia tenda ao valor  $\ln 2$  quando a temperatura tende a zero; daí a entropia residual.

No caso em que  $\alpha=0$  e  $c=0$  todas as interações têm a mesma intensidade, ou seja, obtém-se a aproximação de campo médio. Neste caso espera-se que no estado fundamental para  $N$  par, metade dos spins da cadeia se alinhe e a outra metade se alinhe em sentido contrário, não importando o quão próximos ou distantes estão os spins alinhados, pois todos os spins interagem com a mesma intensidade; este é o caso da figura 22.

Assim sendo, a entropia da figura 22 deve tender ao valor  $\ln(N!/(N!/2).(N!/2))$  quando a temperatura tende a zero usando-se o escalamento de Tsallis com  $N=g$  na expressão (12). Como já foi discutido anteriormente espera-se que este valor seja aproximadamente 0,63867 o que apresenta boa concordância com a figura 22 extrapolando os resultados obtidos.

As figuras 23 e 24 mostram gráficos do calor específico para os casos II e IV. Os picos destes gráficos tendem a ser mais delgados quando ocorre

transição de fase, se fossem os gráficos da solução exata da cadeia infinita, em vez de picos haveria descontinuidades no calor específico, pois ele divergiria na temperatura crítica. Na próxima seção discutir-se-á melhor a questão da transição de fase para este tipo de sistema.

A figura 25 mostra que existe entropia residual no caso V, isto também é esperado, pois neste caso as interações de ordem ímpar tendem a alinhar os spins e as de ordem par tendem a fazer o contrário. Desta forma espera-se que o caso V apresente uma alternância nos sinais dos spins da cadeia no estado fundamental como acontece no caso antiferromagnético, só que desta vez não existe nenhuma ligação frustrada.

Nesta seção se apresentou alguns gráficos das propriedades termodinâmicas para os diferentes sistemas estudados; aproveitou-se então a oportunidade para ilustrar alguns resultados esperados, mas interessantes, como a ocorrência de entropia residual em alguns dos sistemas estudados; a obtenção destes resultados com o método utilizado serve para atestar sua confiabilidade.

### 4.3. Transição de fase

Este método de matriz de transferência já foi usado anteriormente em [21] para estudar a cadeia ferromagnética. Neste trabalho foi feito um estudo da transição de fase para este sistema.

Resultados analíticos já conhecidos na literatura [11-20] apontavam que a cadeia ferromagnética só apresentava transição de fase para  $1 < \alpha \leq 2$ . Contudo os resultados para a função de correlação permitiram criar um critério de transição de fase que concorda com estes resultados.

O critério consiste em definir a temperatura crítica  $T_{c,g}$  dos spins para a cadeia finita como sendo aquela em que

$$C_g(g; T_{c,g+1}) = C_{g+1}(g+1; T_{c,g+1}) \quad (84)$$

onde  $C_g(r,T)$  é a função de correlação numa cadeia com interações de ordem até  $g$ , para spins a distância  $r$  e à temperatura  $T$ . A temperatura crítica real da cadeia infinita é dada por:

$$T_c = \lim_{g \rightarrow \infty} T_{c,g} \quad (85)$$

Dentro das limitações computacionais o máximo valor de  $g$  que se conseguiu obter naquela ocasião foi  $g=25$ , a análise dos gráficos de  $C_g(r,T)$  contra  $r$  permite verificar a fase em que o sistema se encontra na temperatura  $T$ . Por exemplo, mantendo-se  $g$  fixo, na fase ferromagnética espera-se que a função de correlação tenda a crescer com  $r$ , como na figura 26, para valores altos de  $r$ ; já na fase paramagnética deve-se encontrar um comportamento decrescente de  $C_g(r,T)$  contra  $r$ , como na figura 27; próximo da temperatura crítica  $C_g(r,T)$  deve ser aproximadamente constante em função de  $r$ , como na figura 28.

Analisar-se-á os gráficos de  $C_g(r,T)$  para o caso II (figuras 29, 30 e 31), para ver se é possível manter este critério nos sistemas em questão nesta dissertação. O caso II é o mais próximo do ferromagnético, portanto deve apresentar também uma faixa de valores de  $\alpha$  a qual ocorre transição de fase, ainda que não seja a mesma do caso ferromagnético.

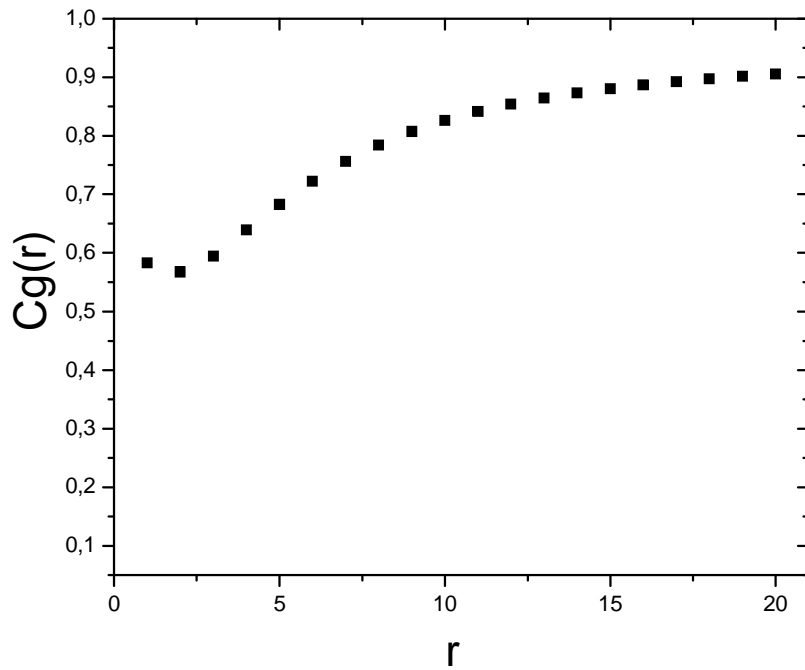


Figura 26 – Função de correlação contra distância entre spins: caso ferromagnético,  $g=20$ ,  $T=1,5$  e  $\alpha=1,2$ .

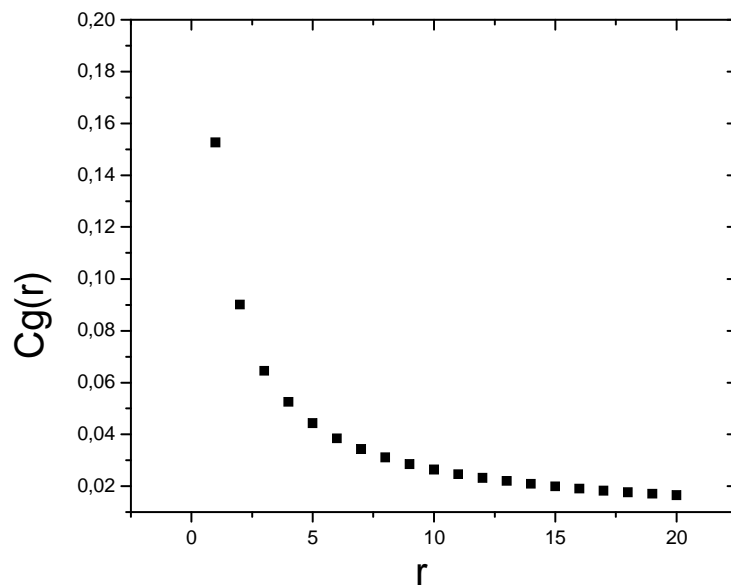
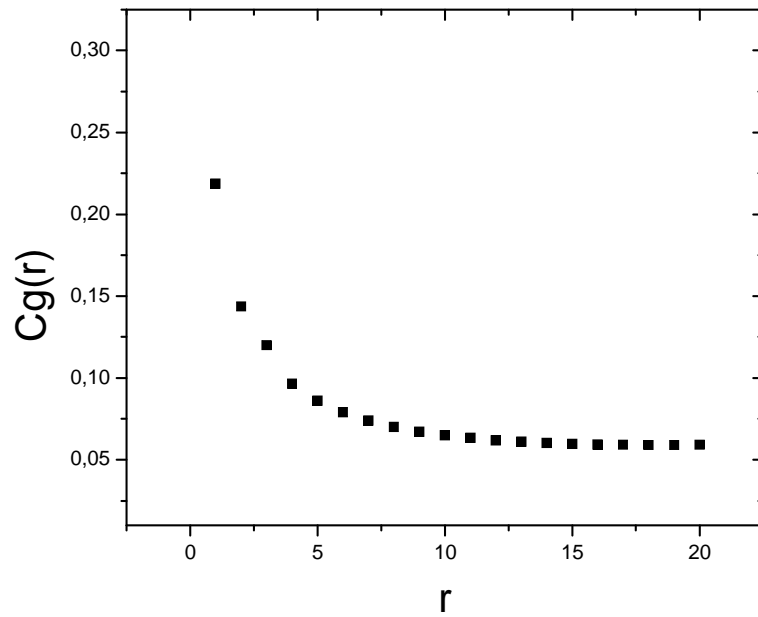
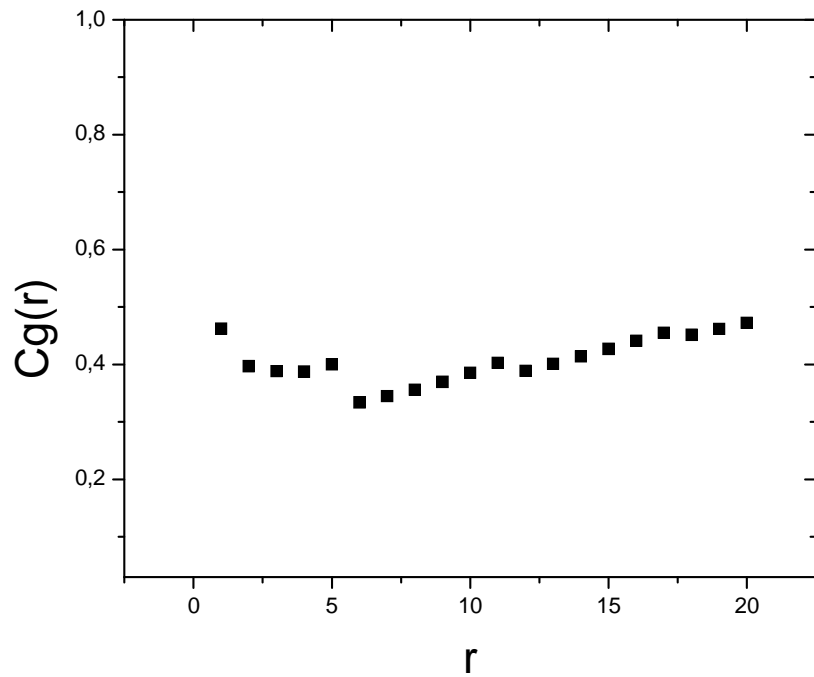


Figura 27 – Função de correlação contra distância entre spins: caso ferromagnético,  $g=20$ ,  $T=6,5$  e  $\alpha=1,2$ .



**Figura 28 – Função de correlação contra distância entre spins: caso ferromagnético,  $g=20$ ,  $T=4,5$  e  $\alpha=1,2$**



**Figura 29 – Função de correlação contra distância entre spins: caso  $F(5,1)$ ,  $g=20$ ,  $T=2$  e  $\alpha=1,3$ .**

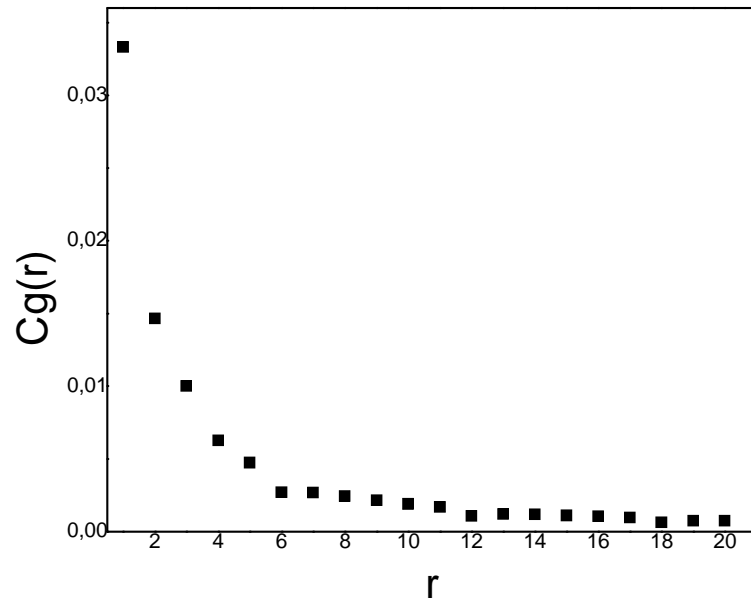


Figura 30 - Função de correlação contra distância entre spins: caso F(5,1),  $g=20$ ,  $T=30$  e  $\alpha=1,3$ .

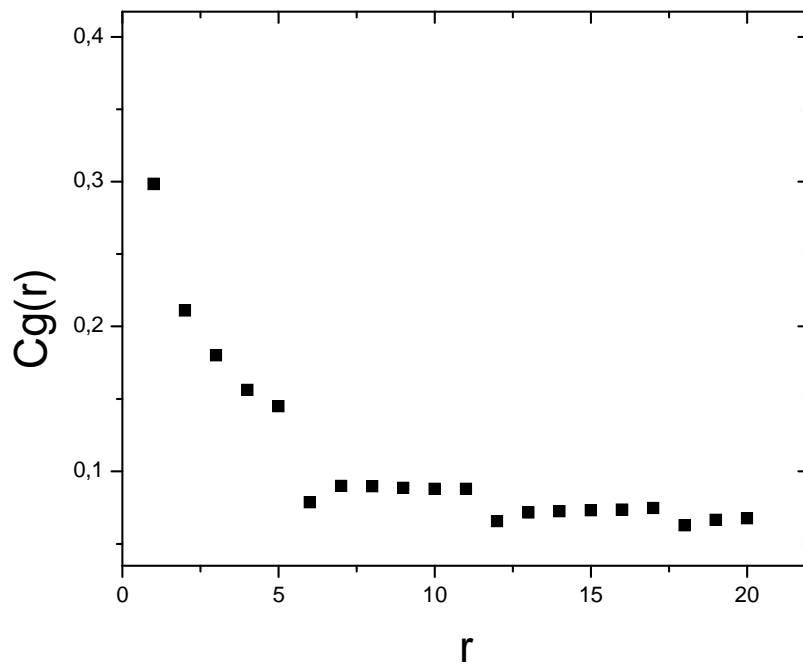


Figura 31 - Função de correlação contra distância entre spins: caso F(5,1),  $g=20$ ,  $T=3,2$  e  $\alpha=1,3$ .

As figuras 26, 27 e 28 apresentam gráficos da função de correlação em função da distância entre os spins para o caso ferromagnético com  $\alpha=1,2$ . Na figura 26, a temperatura vale  $T=1,5$  enquanto nas figuras 27 e 28  $T=6,5$  e  $T=4,5$  respectivamente.

As figuras 29, 30 e 31 mostram a função de correlação contra a distância entre os spins para o caso II,  $F(5,1)$ , com  $\alpha=1,3$ . Na figura 29 a temperatura vale  $T=2$  e nas figuras 30 e 31 tem-se  $T=3,0$  e  $T=3,2$  respectivamente.

Os gráficos apresentados mostram que, para spins com ordem de interação múltipla de 6, a correlação entre eles sofre uma queda brusca, evidenciando uma periodicidade das quedas com  $r$ . Isto é esperado pois as interações antiferromagnéticas são as de ordem múltipla de 6.

Foram feitos gráficos análogos para os outros casos e a periodicidade das quedas mudou de acordo com a diferença na periodicidade das interações antiferromagnéticas corroborando a explicação apresentada no parágrafo anterior.

A despeito das quedas pode-se ver que na figura 29 a função de correlação apresenta um comportamento crescente para valores maiores de  $r$  evidenciando que o sistema está na fase ferromagnética; na figura 30 a correlação tende a decair para valores altos de  $r$  sugerindo que o sistema está na fase paramagnética e na figura 31 as variações da correlação diminuem com o aumento de  $r$  tendendo a uma constante, evidenciando que a temperatura utilizada neste gráfico é próxima da temperatura crítica do sistema.

Já era esperado que este sistema apresentasse transição de fase para  $\alpha=1,3$  pois ele é o mais próximo do ferromagnético que apresenta transição de fase para  $1 < \alpha \leq 2$ .

Os resultados obtidos sugerem que o critério de transição de fase, proposto em [21], continua valendo para os sistemas desta dissertação. Uma boa abordagem é comparar os spins cujo resto da divisão de  $r$  por 6 dê o mesmo valor, pois eles estão na “mesma posição” nas seqüências de spins com valores de  $r$  entre dois múltiplos de 6.

Os gráficos da função de correlação podem ser muito úteis para verificar quando ocorrerá transição de fase na cadeia ferromagnética (embora isso não seja preciso, uma vez que existem resultados analíticos) mas nos

sistemas em questão eles não necessariamente levarão a resultados conclusivos, pois eles são mais complexos de forma que o valor de  $g=25$ , que foi o maior implementado dentro das limitações computacionais existentes, nem sempre será o bastante para verificar quando a transição irá ocorrer.



## 5. Conclusões e perspectivas

Este trabalho visou o estudo do modelo de Ising unidimensional com interações de longo alcance. Existem em particular muitos resultados na literatura para a cadeia ferromagnética [11-20]; nesta dissertação foram apresentados resultados para o caso antiferromagnético e os casos mistos periódicos II a VI segundo a convenção da expressão (8).

Trabalhos anteriores indicam que a cadeia ferromagnética com interação de longo alcance obedece ao escalamento proposto por Tsallis e apresenta transição de fase a temperatura finita apenas quando  $1 < \alpha \leq 2$ , sendo que para  $\alpha < 1$  existe apenas a fase ferromagnética e para  $\alpha > 1$  apenas a fase paramagnética.

Os resultados foram obtidos com um método de matriz de transferência proposto em [21] que fora concebido originalmente para o caso ferromagnético e adaptado para o caso em que as constantes de acoplamento possam possuir qualquer sinal.

Com este método é possível obter as funções termodinâmicas usuais para uma cadeia de  $N=g+c+1$  spins com interações de ordem menor ou igual a  $g$ . Pode-se então verificar a convergência das curvas das propriedades termodinâmicas para diferentes valores de  $g$  e  $c$ , para descobrir se elas ficam bem definidas pelo escalamento usual ou pelo proposto por Tsallis.

Segundo a convenção da expressão (8) o escalamento de Tsallis deve valer para os casos II, III, IV e VI para todos os valores de  $\alpha$ , enquanto que o caso antiferromagnético (I) e o caso V obedecem ao escalamento usual, sendo extensivos para todo valor de  $\alpha$ .

Estes resultados sugerem que o aumento do número de interações antiferromagnéticas tenda a tornar o sistema mais extensivo enquanto que as interações ferromagnéticas tendem a deixar o sistema não extensivo para  $\alpha < 1$ , obedecendo ao escalamento de Tsallis.

Assim sendo, espera-se que os casos em que as interações antiferromagnéticas sejam as de ordem múltipla de um número inteiro maior

ou igual que dois devem obedecer ao mesmo escalamento que o caso ferromagnético (Tsallis) enquanto que o caso antiferromagnético e o caso com interações de ordem par antiferromagnéticas devem obedecer ao escalamento usual.

O estudo das propriedades termodinâmicas indica que a aparição das interações antiferromagnéticas em sistemas de longo alcance tende a causar o surgimento de entropia residual.

O estudo do caso II, que é o mais próximo do ferromagnético, indica que deve continuar a existir uma faixa de valores de  $\alpha$  para o qual ocorre transição de fase, mas essa faixa deve ser tão mais diferente da do caso ferromagnético quanto o sistema o seja.

Os gráficos e os valores da função de correlação dão uma idéia de quando pode ocorrer transição de fase no sistema, mas não são um critério absolutamente infalível diante das limitações computacionais.

Nos casos em que a transição ocorrerá pode-se obter as temperaturas em que o crescimento da função de correlação com  $g$  mudará de comportamento para cada valor de  $g$ , fixado  $c$ ; pode-se assim estimar a temperatura crítica  $T_{g,c}$  para as cadeias finitas.

Essas temperaturas foram calculadas para alguns valores de  $\alpha$  no caso II e evidenciam que para certos valores deste expoente o sistema apresenta transição de fase, mas não na mesma faixa que a do caso ferromagnético.

O estudo da transição de fase neste tipo de sistema apresenta ainda apenas resultados preliminares; em trabalhos futuros espera-se determinar a temperatura crítica da cadeia infinita para diferentes valores de  $\alpha$  a partir da série de temperaturas críticas das cadeias finitas com a técnica dos aproximantes de Padé.

Espera-se obter, dentro da precisão possível, a faixa de valores de  $\alpha$  para a qual o sistema exhibe transição de fase e espera-se fazer isso não só para o caso II, mas para outros casos também.

Pretende-se também utilizar este método para outros tipos de cadeias de Ising não necessariamente periódicas, em especial para aquela em que a alternância do sinal das constantes de acoplamento do hamiltoniano de Ising seja dada por uma seqüência de Fibonacci.

# Referências

- [1] - C. Anteneodo and C. Tsallis. Phys. Rev. Lett. **80**, 24 (1998).
- [2] - M.F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, and U. Frisch. Lévy Flights and Related Topics in Physics (Springer, Berlin, 1995).
- [3] - D.H. Zanette and P. A. Alemany, Phys. Rev. Lett. **75**, 366 (1995); C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. de Souza, and R. Maynard. Phys. Rev. Lett. **77**, 5442 (1996); **77**, 5442(E) (1996).
- [4] - A. R. Plastino, Phys. Lett. A **174**, 384 (1993).
- [5] - B. M. Boghosian, Phys. Rev. E **53**, 4754 (1996).
- [6] - L. Koponen, Phys. Rev. E **55**, 7759 (1997).
- [7] - X.-P. Huang and C.F. Driscoll, Phys. Rev. Lett. **72**, 2187 (1994).
- [8] - D. C. Clayton, Nature (London) **249**, 191 (1974); G. Kaniadakis, A. Lavagno, and P. Quarati, Phys. Lett. B **369**, 308 (1996); P. Quarati, A. Carbone, G. Gervino, G. Kaniadakis, A. Lavagno, and /e. Miraldi, Nucl Phys. **A621**, 345c (1997).
- [9] - J. M. Liu, J. S. De Groot, J. P. Matte, T. W. Johnston, and R. P. Drake, Phys. Rev. Lett. **72**, 2717 (1994); C. Tsallis and A. M. C de Souza, Phys. Lett. A **235**, 444 (1997).
- [10] - J. Maddox, Nature (London) **365**, 103 (1993); V. H. Hamity and D. E. Barraco, Phys. Rev. Lett. **76**, 4664 (1996); D. F. Torres, H. Vucetich, and A. Plastino, Phys. Rev. Lett. **79**, 1588 (1997); N. A. Bahcall and S. P. Oh, Astrophys. J. **462**, L49 (1996); A. Lavagno, G. Kaniadakis, M. Rego-Monteiro, P. Quarati, and Tsallis, Astrophys. Lett. Commun. **35/6**, 449 (1998).
- [11] - F. J. Dyson, Commun. Math. Phys. **12**, 91 (1969).
- [12] - J. Frólich and T. Spencer, Commun. Math. Phys. **84**, 87 (1982).
- [13] - J. L. Cardy, J. Phys. A **14**, 1407 (1981),
- [14] - M. Aizenman, J. T. Chayes, and C. M. Newman, J. Stat. Phys. **50**, 1 (1988); M. Aizenman and R. Fernández, Lett. Math. Phys. **16**, 39 (1988).
- [15] - J. F. Nagle and J. C. Bonner, J. Phys. C **3**, 352 (1970).

- [16] - M. E. Fisher, S. K. Ma and B. G. Nickel, Phys. Rev. Lett. **29**, 917 (1972).
- [17] - J. L. Monroe, R. Lucente, and J. P. Hourlland, J. Phys. A **23**, 2555 (1990).
- [18] - Z. Glumack and C. Uzelac, J. Phys. A **22**, 4439 (1989).
- [19] - Z. Glumack and C. Uzelac, J. Phys. A **26**, 5267 (1993).
- [20] - S. A. Cannas and A. C. N. de Magalhães, J. Phys. A **30**, 3345 (1997).
- [21] - R. F. S. Andrade and S. T. R. Pinho, Phys. Rev. E **71**, 026126 (2005).
- [22] - R. F. S. Andrade and S. T. R. Pinho, Eur. J. Phys. B **50**, 33 (2006).
- [23] - F. Tamarati and C. Anteneodo, Phys. Rev. Lett. **84**, 208 (2000).
- [24] - V. Latora, A. Rapisarda, and C. Tsallis, Phys. Rev. E **64**, 056134 (2001).
- [25] - H. H. Rego, L. S. Lucena, L. R. da Silva, and C. Tsallis, Physica A **266**, 42 (1999).
- [26] - S. A. Cannas, Phys. Rev. B **52**, 3034 (1995).
- [27] - S. A. Cannas and F. A Tamarati, Phys. Rev. B **54**, R10 661 (1996).
- [28] - S. A. Cannas, A. C. N. de Magalhães, and F. A Tamarati, Phys. Rev. B **61**, 11 521 (2000).
- [29] - E. Ising, Zeitschrift für Physik **31**, 259 (1925).
- [30] - L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [31] - K. Wilson H. G, Phys. Ver. B **4**, 3174 (1971).
- [32] - S. Abe, A. K. Rajagopal, Phys. Lett. A **337**, 292 (2005).
- [33] - Zhang Z-D. Philosophical magazine. **87**, 1478 (2007).
- [34] - A. T. Bernardes, J. Florêncio and R. Dickman (guest editors) , Ising Centennial Colloquium. Braz. J. Phys. **30**, no. 4 (2000).
- [35] - H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford University Press, New York (1971).
- [36] - S. R. A. Salinas, Introdução à Física Estatística. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo (2005) .

- [37] - H.B. Callen. Thermodynamics and An Introduction To Thermostatistics. 2ed, John Wiley & Sons. New York(1985).
- [38] - K. Huang. Statistical Mechanics. John Wiley & Sons, New York (1963).
- [39] - P. Jund, S. G. Kim, and C. Tsallis, Phys. Rev. B **52**, 50 (1995).
- [40] - C. Tsallis, Fractals **3**, 541 (1995).
- [41] - C. Tsallis, Braz. J. Phys. **29**, 1 (1999).
- [42] - G. A. Baker. Phys Rev **124**, 3 (1961).

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)