

Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Departamento de Física
Curso de Pós-Graduação em Física

POLÍMERO NUMA REDE UNIDIMENSIONAL

Dissertação submetida ao Curso de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Santa Cata-
rina para obtenção do grau de Mestre em Ciências
por

José Arthur Martins

Orientador:

Jürgen F. Stilck

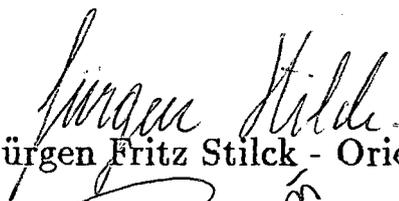
UFSC

Florianópolis, fevereiro de 1994

POLÍMERO NUMA REDE UNIDIMENSIONAL

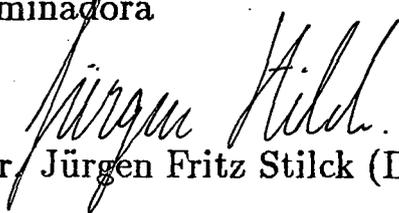
JOSÉ ARTHUR MARTINS

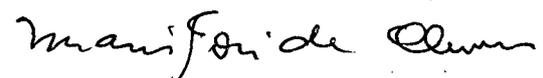
Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de
MESTRE EM CIÊNCIAS
especialidade Física e aprovada em sua forma final pelo Programa de
Pós-Graduação.


Prof. Dr. Jürgen Fritz Stilck - Orientador


Prof. Dr. Wagner Figueiredo - Coordenador do Curso

Banca Examinadora


Prof. Dr. Jürgen Fritz Stilck (DF-UFSC) - Presidente


Prof. Dr. Málio José de Oliveira (IF-USP)


Prof. Dr. Paulo Cesar D'Ajello (DF-UFSC)

AGRADECIMENTOS

- Ao Jürgen pela orientação , amizade e paciência durante todo este tempo, meu muito obrigado.

- Aos amigos professores e funcionarios do curso de Pós-graduação em física pela amizade e ajuda durante todo o tempo de permanência nesta instituição .

- Um abraço ao amigo e professor Wagner Figueiredo por ter sido um grande "quebra-galho" nos momentos difíceis deste longo parto.

-Aos colegas da pós e da graduação que são tantos que não vou citar para não fazer injustiça com alguns, valeu por terem me aturado todo este tempo.

-Aos amigos de tantas conversas, cervejas e utopias(Márcio, André, Vando, João , Alte, Maurício, Kleber, Chita e Cíntia), vamos chegar lá, um abraço .

-Aos meus familiares(avós, tios e primos)que me ajudaram em muitos momentos difíceis desta caminhada, meu grande beijo a todos.

-E finalmente à pessoa para quem eu dedico todo este trabalho de 3 anos e que me ajudou em todos os momentos, sem cobranças ou exigências: Minha MÃE. Demorou mas eu cheguei lá, é uma primeira etapa, outras virão mas nós conseguiremos.

RESUMO

Consideramos um modelo para um polímero dirigido numa rede unidimensional da largura 2, com interações atrativas entre monômeros que ocupam sítios primeiros vizinhos na rede sem serem consecutivos ao longo da cadeia. Mostramos que este modelo pode ser mapeado no modelo de Ising unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos. Analisamos o comportamento cinético do modelo na região do diagrama de fases em que o estado fundamental não apresenta frustração, a partir de uma hipótese do tipo Glauber para a evolução temporal das configurações do modelo. Para desacoplar as equações de evolução temporal do modelo, recorreremos à aproximação de pares. Nesta aproximação mostramos que o valor do expoente crítico dinâmico apresenta uma dependência da razão das intensidades das interações entre spins segundos e primeiros vizinhos.

ABSTRACT

We consider a model for a directed polymer on a one-dimensional lattice of width equal to 2, with attractive interaction between monomers which occupy first-neighbor sites on the lattice and are not consecutive along the chain. We show that this model is equivalent to the one-dimensional Ising model with first- and second- neighbor interactions. We study the kinetic behavior of the model in the region of the phase diagram where the ground state is not frustrated, using a Glauber like ansatz for the evolution of configurations. In order to decouple the dynamical equations, we use the pair approximation. In this approximation, we show that the dynamical exponent depends of the ratio between second- and first- neighbor interaction strengths.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O estudo da Mecânica Estatística fora do Equilíbrio, apesar das grandes dificuldades matemáticas e conceituais envolvidas, tem sido de grande interesse para tentarmos entender alguns modelos físicos que mostram alguma semelhança com o que ocorre na natureza. Um trabalho clássico nesta área foi feito por Roy J. Glauber (1963) onde ele formulou um modelo dinâmico baseado no modelo de Ising. Este modelo pode ser resolvido exatamente em uma dimensão .

O problema de polímeros já foi estudado em varios trabalhos teóricos e experimentais. O modelo mais simples é aquele em que o polímero percorre os sítios da rede aleatoriamente (um trabalho de revisão sobre o tema foi feito por Weiss e Rubin (1983), que incluem aplicação em polímeros), apesar de ser matematicamente simples, o modelo não é suficientemente realista pois não consegue descrever algumas propriedades de polímeros.

Um modelo mais usado e que se mostra mais realista, é o de cadeias auto-e mutuamente excludentes, isto é, o polímero passa por sítios da rede aleatoriamente, mas com a condição de não passar por um sítio já ocupado por outro monômero do próprio polímero ou de outro. Podemos citar os trabalhos realizados por Huggins (1942)

e Flory (1966) dando um tratamento de campo médio, e de Flory (1966), Fischer (1969) e De Gennes (1979) usando os chamados argumentos de Flory para o cálculo de um dos expoentes críticos.

Em particular, foi mostrado por De Gennes (1972) e Des Cloiseaux (1975) que existe uma analogia entre polimerização e modelos magnéticos, possibilitando o estudo deste problema do ponto de vista da teoria de fenômenos críticos usando tratamento como campo médio (Wheeler e Pfeuty (1981a, 1981b)), rede de Bethe (Stilck e Wheeler (1987)), grupo de renormalização (Shapiro (1978)), etc.

Neste trabalho nós nos concentramos no problema de polímeros dirigidos¹ e procuramos associar a ele um conjunto de equações dinâmicas baseadas no trabalho de Glauber². Nos limitaremos a uma rede unidimensional de largura 2, o que possibilitará um mapeamento do modelo de polimerização no modelo de Ising unidimensional.

No primeiro capítulo nós definimos o modelo de polímeros, e usando técnicas de matriz de transferência³ procuramos determinar sua função partição e energia livre. Em seguida relacionamos o modelo proposto com o modelo de Ising através de sua função partição e mostramos que o hamiltoniano que representa o modelo de polímeros é um hamiltoniano de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos, e finalmente calculamos o comprimento de correlação, necessário para podermos determinar o expoente crítico dinâmico, e mostramos que ela diverge quando T se aproxima de $T_c = 0$.

No segundo capítulo, fundamentado no trabalho de Glauber², os spins são representados como funções estocásticas do tempo fazendo transições aleatórias entre os valores ± 1 que dependem somente dos vizinhos mais próximos e de um agente externo. Vamos propor inicialmente uma equação para transição de probabilidade (ω) baseada na

condição de balanço detalhado, e mostrarmos que ela é diferente da equação proposta por Glauber² e que não leva a um estado estacionário de equilíbrio termodinâmico para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Em seguida escrevemos um conjunto de equações dinâmicas (magnetização e a função correlação de spins primeiros vizinhos e spins segundos vizinhos) usando ω proposto, e mostramos que quando $J_2 \rightarrow 0$ as equações correspondem às equações propostas por Glauber².

No terceiro capítulo vamos estudar as equações dinâmicas usando para isso uma aproximação (aproximação de pares), em que as probabilidades das configurações de aglomerados de spins são escritas em termos das probabilidades de pares de spins, proposta por Mamada e Takano⁴, resultando num sistema de equações autoconsistentes. Em seguida, usando uma expansão onde tratamos as interações entre segundos vizinhos como uma perturbação do sistema, calculamos as funções correlação entre spins no estado estacionário, levando em conta que no momento em que o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico a magnetização espontânea numa cadeia unidimensional é nula. Finalmente calculamos o tempo de relaxação e mostramos que ele diverge quando $T \rightarrow 0$, como era esperado. Determinamos, também, o expoente crítico dinâmico (z), mostrando que existe uma dependência deste expoente com a razão das interações de segundos e primeiro vizinhos no modelo de Ising.

CAPÍTULO II

MODELO E SOLUÇÃO NO EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO

Modelo

Consideremos uma cadeia de N células centradas em sítios de uma rede unidimensional de largura 2 associadas com $2N$ ligações da rede. Cada sítio da rede poderá conter ou não um monômero que deve estar ligado com dois monômeros adjacentes, formando um polímero, com condições periódicas de contorno. Cada ligação entre monômeros da cadeia tem fugacidade x . O problema corresponde a polímeros dirigidos e foi tratado por Privman e Svrič¹, na rede quadrada.

Vamos analisar o caso em que existam interações atrativas ($w = e^{-\beta\epsilon}$) associadas a todo par de sítios primeiros vizinhos incorporados ao polímero que não sejam sítios consecutivos da cadeia (Fig.1).

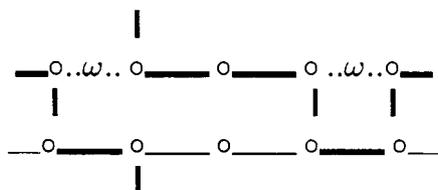


Fig 1. O polímero acima com 10 sítios tem peso estatístico $x^9 \omega^2$

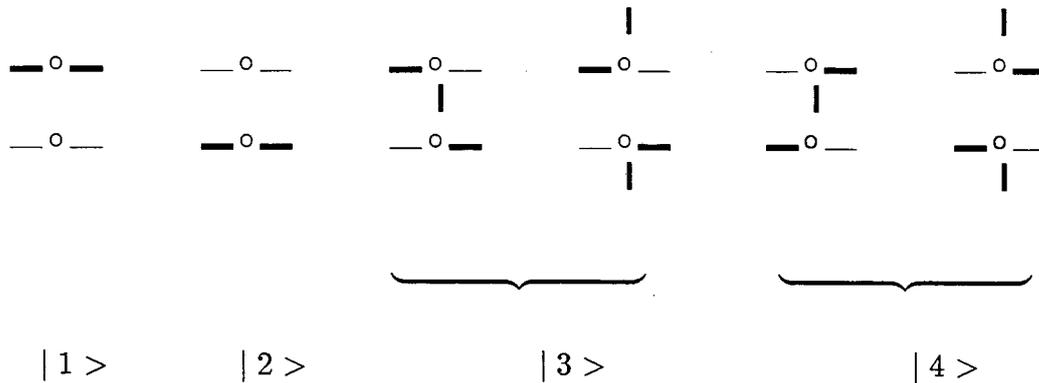
Matriz de Transferência

Para um polímero auto-interagente, a função partição pode ser definida do seguinte modo:

$$Y_N(x) = \sum \omega^{n_p} x^{n_b} \Gamma(n_p, n_b, N), \quad (2.1)$$

onde ω é o fator de Boltzmann correspondente à interação atrativa a todo par de sítios primeiros vizinhos que não sejam sítios consecutivos do polímero, n_p é o número de pares de sítios primeiros vizinhos incorporados no polímero que não sejam sítios consecutivos da cadeia, x é o peso estatístico da ligação incorporada ao polímero, n_b é o número de ligações entre os monômeros e $\Gamma(n_p, n_b, N)$ é o número de configurações possíveis, com n_b ligações e n_p pares interagentes.

Notamos que as ligações incidentes sobre um par vertical de sítios têm quatro configurações ,



em termos das quais definimos a matriz de transferência. Vemos que os elementos da matriz T_{ij} são dados por

$$\begin{aligned}
T_{11} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = x, & T_{13} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ | \end{array} = \sqrt{2x^3}, \\
T_{22} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = x, & T_{24} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ | \end{array} = \sqrt{2x^3}, \\
T_{32} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = \sqrt{2x^3}, & T_{34} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \dots \omega \dots \circ \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = 2\omega x^2, \\
T_{41} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = \sqrt{2x^3}, & T_{43} &= \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \circ \dots \omega \dots \circ \text{---} \end{array} = 2\omega x^2,
\end{aligned}$$

assim, a matriz \mathbf{T} pode ser escrita na seguinte forma:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} x & 0 & \sqrt{2x^3} & 0 \\ 0 & x & 0 & \sqrt{2x^3} \\ 0 & \sqrt{2x^3} & 0 & 2\omega x^2 \\ \sqrt{2x^3} & 0 & 2\omega x^2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Notamos que os elementos

$$T_{12}, T_{14}, T_{21}, T_{23}, T_{31}, T_{33}, T_{42} \text{ e } T_{44}$$

são nulos, pois não formam um polímero. Por exemplo, vemos que:

$$T_{12} = \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \\ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = 0.$$

A equação secular associada à matriz \mathbf{T} é dada por:

$$\begin{aligned}
\det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}) &= \lambda^2 x^2 - 4x^4 \omega^2 - \lambda^3 x + 4\lambda \omega^2 x^3 + 4\omega x^6 - \lambda^3 x + 4\lambda \omega^2 x^3 + \lambda^4 - 4\lambda^2 \omega^2 x^2 \\
&\quad - 4\lambda \omega^5 - 4\lambda \omega x^3 + 4\omega x^4 - 4x^6 = 0, \\
\lambda^4 - 2\lambda^3 x + \lambda^2(x^2 - 4\omega^2 x^4) - \lambda(8\omega^2 x^5 + 8\omega x^5) - 4x^6(\omega - 1) &= 0, \quad (2.3)
\end{aligned}$$

onde λ são os autovalores da matriz \mathbf{T} . Resolvendo a equação anterior, teremos.

$$\lambda_1 = \frac{-x(\sqrt{4\omega^2 x^2 - 4x(\omega - 2) + 1} - 2\omega x - 1)}{2}, \quad (2.4)$$

$$\lambda_2 = \frac{x(\sqrt{4\omega^2 x^2 - 4x(\omega - 2) + 1} + 2\omega x + 1)}{2}, \quad (2.5)$$

$$\lambda_3 = \frac{x(\sqrt{4\omega^2 x^2 + 4x(\omega - 2) + 1} - 2\omega x + 1)}{2}, \quad (2.6)$$

$$\lambda_4 = \frac{-x(\sqrt{4\omega^2 x^2 + 4x(\omega - 2) + 1} + 2\omega x - 1)}{2}. \quad (2.7)$$

Quando fizermos $\omega \rightarrow 1$ (sem interações atrativas) os autovalores se resumem a

$$\lambda = x \pm 2x^2. \quad (2.8)$$

Sabemos que a função partição é dada por $Y_N = Tr(\mathbf{T}^{\frac{N}{2}})$, pois o número de pares verticais de monômeros é igual a $\frac{N}{2}$. Y_N é portanto a soma dos elementos da diagonal de $\mathbf{T}^{\frac{N}{2}}$, isto é o traço de $\mathbf{T}^{\frac{N}{2}}$. Como o traço de uma matriz é a soma dos autovalores resulta

$$Y_N = \sum_{i=1}^4 \lambda_i^{\frac{N}{2}}. \quad (2.9)$$

No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ a função partição pode ser escrita como

$$Y_N = \lambda_i^{\frac{N}{2}}, \quad (2.10)$$

com λ_i sendo o maior autovalor da matriz, logo $\lambda_i = \lambda_2$ e

$$Y_N = \left\{ \frac{x(\sqrt{4\omega^2 x^2 - 4x(\omega - 2) + 1} + 2\omega x + 1)}{2} \right\}^{\frac{N}{2}}. \quad (2.11)$$

A energia livre de Gibbs para o sistema é dada por

$$\frac{G(T)}{-k_B T} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Y_N = \ln \lambda_i, \quad (2.12)$$

então

$$G(T) = \frac{-k_B T}{2} \ln \left\{ \frac{x(\sqrt{4\omega^2 x^2 - 4x(\omega - 2) + 1} + 2\omega x + 1)}{2} \right\}. \quad (2.13)$$

Mapeamento Modelo de Ising - Polímeros

Nosso objetivo agora é procurar um hamiltoniano efetivo que represente o polímero já descrito e para isto vamos relacionar o modelo apresentado anteriormente com o modelo de Ising, através de suas funções partição .

Para compararmos com o modelo de Ising, vamos admitir inicialmente que o nosso sistema possa ser descrito pelo hamiltoniano efetivo

$$H(\sigma_i) = \frac{-J_1}{2} \sum_i (\sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+2}) - J_2 \sum_i \sigma_i \sigma_{i+2} - J_o \frac{N}{2}, \quad (2.14)$$

com condições periódicas de contorno ($\sigma_{\frac{N}{2}+1} = \sigma_1$), que pode ser entendida como um hamiltoniano para o modelo de Ising, onde J_1 e J_2 são as constantes de interação entre os spins primeiros e segundos vizinhos respectivamente. As variáveis de spin (σ_i) assumem os valores ± 1 e J_o é uma constante de energia que nos possibilita fazer o mapeamento.

A função partição é dada por

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H}. \quad (2.15)$$

Vamos definir que o polímero ao passar pela ligação superior de um par de ligações horizontais será representado no modelo de Ising por $\sigma = 1$, e quando passar pela ligação inferior por $\sigma = -1$ (Fig.2).

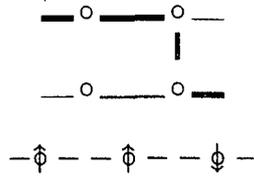


Fig.2 exemplo de mapeamento polímero - Ising

Substituindo o hamiltoniano (eq. 2.14) na função partição canônica definida pela equação (2.15), podemos escrever a matriz transferência³ para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos definindo os seguintes estados $|\sigma_i\sigma_{i+1}\rangle$ e $|\sigma_{i+1}\sigma_{i+2}\rangle$, que apresentam as seguintes configurações

$$|1\rangle = |++\rangle, \quad |2\rangle = |--\rangle, \quad |3\rangle = |+-\rangle, \quad |4\rangle = |-+\rangle,$$

logo, por exemplo, o elemento de matriz M_{11} corresponde a

$$M_{11} = \exp\left[\beta\frac{J_1}{2}(\sigma_i\sigma_{i+1} + \sigma_{i+1}\sigma_{i+2}) + \beta J_2(\sigma_i\sigma_{i+2}) + \beta J_0\right]$$

onde $\sigma_i = \sigma_{i+1} = \sigma_{i+2} = 1$, resultando:

$$M_{11} = \exp\left[\beta J_1 + \beta J_2 + \beta J_0\right]$$

e assim sucessivamente. Os elementos $M_{12}, M_{14}, M_{21}, M_{23}, M_{31}, M_{33}, M_{42}$ e M_{44} são nulos, pois os valores do spin σ_{i+1} não coincidem. Agora escrevendo a matriz \mathbf{M} , onde:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J_1+J_2+J_0)} & 0 & e^{-\beta(J_2+J_0)} & 0 \\ 0 & e^{\beta(J_1+J_2+J_0)} & 0 & e^{-\beta(J_2-J_0)} \\ 0 & e^{-\beta(J_2-J_0)} & 0 & e^{-\beta(J_1-J_2-J_0)} \\ e^{-\beta(J_2-J_0)} & 0 & e^{-\beta(J_1-J_2-J_0)} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

a qual, através das definições $\omega_0 = e^{\beta J_0}$, $\omega_1 = e^{\beta J_1}$ e $\omega_2 = e^{\beta J_2}$, torna-se

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \omega_0\omega_1\omega_2 & 0 & \omega_0\omega_2^{-1} & 0 \\ 0 & \omega_0\omega_1\omega_2 & 0 & \omega_0\omega_2^{-1} \\ 0 & \omega_0\omega_2^{-1} & 0 & \omega_0\omega_1^{-1}\omega_2 \\ \omega_0\omega_2^{-1} & 0 & \omega_0\omega_1^{-1}\omega_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

que apresenta os seguintes autovalores:

$$\lambda_1 = \frac{\omega_0\omega_2(\omega_1^2 + 1) - \omega_0\omega_2\sqrt{\omega_1^4 - 2\omega_1^2 + 4\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + 1}}{2\omega_1}, \quad (2.18)$$

$$\lambda_2 = \frac{\omega_0\omega_2(\omega_1^2 + 1) + \omega_0\omega_2\sqrt{\omega_1^4 - 2\omega_1^2 + 4\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + 1}}{2\omega_1}, \quad (2.19)$$

$$\lambda_3 = \frac{\omega_0\omega_2(\omega_1^2 - 1) - \omega_0\omega_2\sqrt{\omega_1^4 + 2\omega_1^2 - 4\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + 1}}{2\omega_1}, \quad (2.20)$$

$$\lambda_4 = \frac{\omega_0\omega_2(\omega_1^2 - 1) + \omega_0\omega_2\sqrt{\omega_1^4 + 2\omega_1^2 - 4\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + 1}}{2\omega_1}. \quad (2.21)$$

Agora, podemos fazer o mapeamento para os pesos estatísticos das configurações de polímero com as do modelo de Ising, comparando elemento por elemento das matrizes \mathbf{T} e \mathbf{M} . Podemos então concluir que:

$$x = \omega_0\omega_1\omega_2,$$

$$\sqrt{2x^3} = \omega_0\omega_2^{-1},$$

$$2x^2\omega = \omega_0\omega_1^{-1}\omega_2,$$

e resolvendo o sistema de equações acima teremos :

$$\omega_1 = \frac{1}{\sqrt{2x\omega}}, \quad (2.22)$$

$$\omega_2 = \omega^{\frac{1}{4}}, \quad (2.23)$$

$$\omega_0 = x\omega^{-\frac{1}{4}}\sqrt{2x\omega}. \quad (2.24)$$

Substituindo os valores acima para ω_0, ω_1 e ω_2 nos autovalores da matriz \mathbf{M} , segue-se

$$\lambda_1 = \frac{-x(\sqrt{4\omega^2 x^2 - 4x(\omega - 2) + 1} - 2\omega x - 1)}{2},$$

$$\lambda_2 = \frac{x(\sqrt{4\omega^2 x^2 - 4x(\omega - 2) + 1} + 2\omega x + 1)}{2},$$

$$\lambda_3 = \frac{x(\sqrt{4\omega^2 x^2 + 4x(\omega - 2) + 1} - 2\omega x + 1)}{2},$$

$$\lambda_4 = \frac{-x(\sqrt{4\omega^2 x^2 + 4x(\omega - 2) + 1} + 2\omega x - 1)}{2},$$

que são idênticos aos autovalores da matriz \mathbf{T} .

A função partição para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos é dada por

$$Z_N = \left(\frac{x(\sqrt{4x^2\omega + 1 - 4x(\omega - 2) + 2x\omega + 1})}{2} \right)^{\frac{N}{2}}, \quad (2.25)$$

a qual está de acordo com a eq.(2.11). Com isto podemos concluir que o hamiltoniano efetivo proposto anteriormente consegue descrever satisfatoriamente o modelo de polímero.

Podemos estudar o estado fundamental do modelo proposto (Fig. 3) em termos das variáveis de polímero ω e x . Na região em que $\omega > 1$ (sem competição)

que corresponde à interação atrativa entre monômeros, teremos uma fase ferromagnética ($J_1 > 0$ e $J_2 > 0$) e uma fase antiferromagnética ($J_1 < 0$ e $J_2 > 0$). Na região em que $\omega < 1$ (com competição), que corresponde às interações repulsivas entre monômeros, o estado fundamental apresenta uma frustração e sua determinação é menos trivial. No presente trabalho nos dedicaremos apenas à região sem competição, onde a determinação do estado fundamental é mais simples. O estudo do modelo de Ising unidimensional com interações entre primeiros e segundos vizinhos já foi realizado de forma exata por Stephenson⁵ para as regiões com e sem competição.

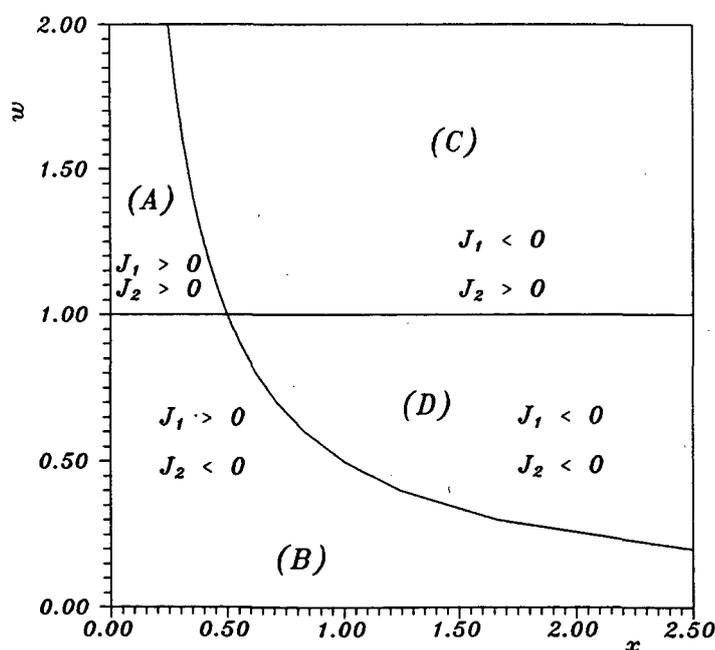


Figura 3 J_1 e J_2 são as interações entre primeiros e segundos vizinhos. Nas regiões A e D teremos uma fase ferromagnética e nas regiões B e C uma fase antiferromagnética. A curva é dada pela equação $\omega = \frac{1}{2x}$ fazendo $J_1 = 0$ na equação(2.23). A reta $\omega = 1$, é obtida fazendo $J_2 = 0$ na equação(2.24).

Comprimento de Correlação

Calculemos agora o comprimento de correlação (ξ) que nos será útil para determinar posteriormente o expoente crítico dinâmico. Para isto começamos escrevendo o hamiltoniano proposto anteriormente.

$$H(\sigma_i) = \frac{-J_1}{2} \sum_i (\sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+2}) - J_2 \sum_i \sigma_i \sigma_{i+2} \quad (2.26)$$

onde fizemos $J_0 = 0$, já que este parâmetro não tem influência sobre as propriedades termodinâmicas. Para uma cadeia linear o comprimento de correlação ξ pode ser calculado como⁶

$$\xi = \left(\ln \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right) \right)^{-1}, \quad (2.27)$$

onde λ_i e λ_j são, respectivamente, o 1° e 2° maiores autovalores da matriz \mathbf{M} determinados anteriormente, o que nos leva a:

$$\xi = \left(\ln \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_4} \right) \right)^{-1},$$

$$\xi = \left(\ln \left(\frac{\sqrt{\omega_1^4 \omega_2^4 - 2\omega_1^2(\omega_2^4 - 2) + \omega_2^4} + \omega_1^2 \omega_2^2 + \omega_2^2}{\sqrt{\omega_1^4 \omega_2^4 + 2\omega_1^2(\omega_2^4 - 2) + \omega_2^4} + \omega_1^2 \omega_2^2 - \omega_2^2} \right) \right)^{-1}.$$

Podemos reescrever a equação acima somente em termos de ω_1 definindo

$\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ e com isto $\omega_2 = \omega_1^\alpha$, o que nos permite escrever:

$$\xi = \left(\ln \left(\frac{\sqrt{\omega_1^{4\alpha}(\omega_1^4 - 2\omega_1^2 + 1) + 4\omega_1^2} + \omega_1^{2\alpha}(\omega_1^2 + 1)}{\sqrt{\omega_1^{4\alpha}(\omega_1^4 - 2\omega_1^2 + 1) - 4\omega_1^2} + \omega_1^{2\alpha}(\omega_1^2 - 1)} \right) \right)^{-1},$$

manipulando algebricamente a equação acima, teremos

$$\xi = \left(\ln \left(\frac{\sqrt{1-x} + 1 + \omega_1^{-2}}{\sqrt{1+y} + 1 - \omega_1^{-2}} \right) \right)^{-1}, \quad (2.28)$$

onde

$$\begin{aligned} x &= 2\omega_1^{-2} - \omega_1^{-4} - 4\omega_1^{-2(2\alpha+1)}, \\ y &= 2\omega_1^{-2} + \omega_1^{-4} - 4\omega_1^{-2(2\alpha+1)}. \end{aligned}$$

Próximo de $T \rightarrow 0$, no caso de $\alpha \geq 0$, usando série de Taylor, teremos

$$\begin{aligned} \sqrt{1-x} &\approx 1 - \frac{x}{2}, \\ \sqrt{1+y} &\approx 1 + \frac{y}{2}, \end{aligned}$$

e rescrevendo a eq.(2.28), vemos que :

$$\begin{aligned} \xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1 - \frac{x}{2} + 1 + \omega_1^{-2}}{1 + \frac{y}{2} + 1 - \omega_1^{-2}} \right) \right)^{-1}, \\ \xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1 + \frac{1}{4}\omega_1^{-4} + \omega_1^{-2(2\alpha+1)}}{1 + \frac{1}{4}\omega_1^{-4} - \omega_1^{-2(2\alpha+1)}} \right) \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

fazendo:

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{4}\omega_1^{-4} + \omega_1^{-2(2\alpha+1)} \quad \text{e} \\ y &= \frac{1}{4}\omega_1^{-4} - \omega_1^{-2(2\alpha+1)}, \end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned} \xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1+x}{1+y} \right) \right)^{-1}, \\ \xi &\simeq (\ln(1+x) - \ln(1+y))^{-1}. \end{aligned}$$

A equação acima pode ser escrita de uma forma mais simples onde $\ln(1+z) \approx z$ para $z \simeq 0$, com isto

$$\begin{aligned}\xi &\simeq (x - y)^{-1}, \\ \xi &\simeq \left(\frac{1}{4}\omega_1^{-4} + \omega_1^{-2(2\alpha+1)} - \frac{1}{4}\omega_1^{-4} + \omega_1^{-2(2\alpha+1)} \right)^{-1}, \\ \xi &\simeq 2\omega_1^{2(2\alpha+1)},\end{aligned}\tag{2.30}$$

quando $\alpha = 0$ teremos $J_2 = 0$, isto é, somente interação entre primeiros vizinhos, logo o comprimento de correlação se resume a :

$$\xi \simeq 2\omega_1^2.\tag{2.31}$$

Para $\alpha < 0$ temos $J_1 < 0$. Logo, podemos escrever a equação (2.28) da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1 - \omega_1^{-2} + 2\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + \omega_1^{-4} + 1 + \omega_1^{-2}}{1 + \omega_1^{-2} - 2\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + \omega_1^{-4} + 1 - \omega_1^{-2}} \right) \right)^{-1}, \\ \xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{2 + 2\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + \omega_1^{-4}}{2 - 2\omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + \omega_1^{-4}} \right) \right)^{-1}, \\ \xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1 + \omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + \frac{\omega_1^{-4}}{4}}{1 + \omega_1^{-2}\omega_2^{-4} + \frac{\omega_1^{-4}}{4}} \right) \right)^{-1},\end{aligned}\tag{2.32}$$

escrevendo a equação acima somente em termos de ω_1 , resulta em :

$$\begin{aligned}\xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1 + \omega_1^{2(-1-2\alpha)} + \frac{\omega_1^{-4}}{4}}{1 - \omega_1^{2(-1-2\alpha)} + \frac{\omega_1^{-4}}{4}} \right) \right)^{-1}, \\ \xi &\simeq \left(\ln \left(\frac{1+x}{1-y} \right) \right)^{-1},\end{aligned}$$

onde:

$$x = \omega_1^{-2} \omega_1^{+4\alpha} + \frac{\omega_1^{-4}}{4} \quad \text{e}$$

$$y = \omega_1^{-2} \omega_1^{+4\alpha} - \frac{\omega_1^{-4}}{4}.$$

Voltando à equação anterior,

$$\xi \simeq (\ln(1+x) - \ln(1-y))^{-1}, \quad (2.33)$$

e expandindo os termos logarítmicos da expressão acima em série de Taylor,

$$\ln(1+x) \approx x \quad \text{para} \quad -1 < x \leq 1,$$

$$\ln(1-y) \approx -y \quad \text{para} \quad -1 < y \leq 1,$$

e reescrevendo a equação (2.34) de uma forma mais compacta, resulta:

$$\xi \simeq (x+y)^{-1},$$

$$\xi \simeq \left(\omega_1^{-2} \omega_1^{4\alpha} + \frac{\omega_1^{-4}}{4} + \omega_1^{-2} \omega_1^{4\alpha} - \frac{\omega_1^{-4}}{4} \right)^{-1}$$

$$\xi \simeq 2\omega_1^{2(1-2\alpha)}. \quad (2.34)$$

CAPÍTULO III

EQUAÇÕES DO MODELO DINÂMICO

O modelo que nós discutiremos é um modelo estocástico, onde as configurações das ligações horizontais entre monômeros da rede são representadas por spins, que são funções estocásticas do tempo $\sigma_i(t)$ ($i = 1, \dots, n$), assumindo os valores ± 1 e fazendo transições aleatórias entre eles.

As probabilidades de transição dos spins individuais dependem somente do valor momentâneo dos spins vizinhos e da temperatura. É por esta razão que surgem correlações entre spins vizinhos.

As funções de spin dependentes do tempo formam um processo de Markov de N variáveis aleatórias discretas e uma variável contínua de tempo como argumento. Se tomarmos $\omega(\sigma_i)$ como a probabilidade por unidade de tempo de que o i -ésimo spin mude de σ_i para $-\sigma_i$, enquanto os outros permanecem momentaneamente fixos, nós podemos escrever a derivada da probabilidade total $P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t)$ como :

$$\begin{aligned} \frac{dP(\sigma_1, \dots, \sigma_{\frac{n}{2}}, t)}{dt} = & - \sum_i \omega(\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_{\frac{n}{2}}, t) \\ & + \sum_i \omega(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_{\frac{n}{2}}, t), \end{aligned} \quad (3.1)$$

isto é, o estado $\sigma_1, \dots, \sigma_{\frac{n}{2}}$ é destruído por uma mudança de qualquer spin σ_i , mas ele pode ser criado por um spin mudado de qualquer estado $\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_{\frac{n}{2}}$. Nós nos referimos à equação (3.1) como Equação Master pois sua solução contém a descrição mais completa possível do sistema.

Concluimos anteriormente que o hamiltoniano do nosso modelo pode ser escrito como hamiltoniano efetivo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos isto é:

$$H(\sigma_i) = -J_1 \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - J_2 \sum_i \sigma_i \sigma_{i+2}, \quad (3.2)$$

onde J_1 é a constante de interação entre primeiros vizinhos e J_2 entre segundos vizinhos.

Usando a equação da probabilidade de transição $\omega(\sigma_i)$ proposta por Glauber (equação 115, ref.2) para o modelo de Ising com interações entre os primeiros n vizinhos, teremos:

$$\omega(\sigma_i) = \frac{1}{2}\mu \left\{ 1 - \frac{1}{2}\sigma_i \sum_{l=1}^n \gamma_l (\sigma_{i-l} + \sigma_{i+l}) \right\},$$

onde $\gamma_l = \tanh K_l$ com $K_l = \frac{J_l}{k_B T}$ e $l = 1, 2, \dots$. Particularizando a equação acima para $n = 2$, vemos que

$$\begin{aligned} \omega(\sigma_i) &= \frac{1}{2}\mu \left\{ 1 - \frac{1}{2}\sigma_i \sum_{l=1}^2 \gamma_l (\sigma_{i-l} + \sigma_{i+l}) \right\}, \\ &= \frac{1}{2}\mu \left\{ 1 - \frac{1}{2}\sigma_i \left(\gamma_1 (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \gamma_2 (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \right) \right\}, \end{aligned}$$

que resulta em

$$\omega(\sigma_i) = \frac{1}{2}\mu \left\{ 1 - \frac{1}{2}\sigma_i \left(\tanh K_1 (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \tanh K_2 (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \right) \right\}. \quad (3.3)$$

Quando o sistema atinge o equilíbrio a uma determinada temperatura T , a probabilidade de uma configuração é proporcional ao fator de Maxwell-Boltzmann.

$$P(\sigma_i) \propto e^{-\frac{H(\sigma_i)}{K_B T}}.$$

No equilíbrio, a razão entre as probabilidades $P_i(\sigma_i)$ e $P_i(-\sigma_i)$, considerando o hamiltoniano (3.2) é dada, então, por

$$\frac{P(\sigma_i)}{P(-\sigma_i)} = \frac{e^{-\beta(-J_1\sigma_i(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1})-J_2\sigma_i(\sigma_{i-2}+\sigma_{i+2}))}}{e^{-\beta(-J_1(-\sigma_i)(\sigma_{i-1}+\sigma_{i+1})-J_2(-\sigma_i)(\sigma_{i-2}+\sigma_{i+2}))}}, \quad (3.4)$$

onde $\beta = \frac{1}{K_B T}$. Podemos reescrever a equação acima, levando em conta as seguintes relações :

$$e^{\pm(a+b)} = \cosh(a+b) \pm \sinh(a+b), \quad (3.5)$$

onde

$$a = \beta J_1 \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \quad e \quad b = \beta J_2 \sigma_i (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}),$$

com isto teremos que:

$$\begin{aligned} \cosh(a+b) &= \cosh \pm \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})), \\ &= \cosh \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})), \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \sinh(a+b) &= \sinh \pm \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})), \\ &= \sigma_i \sinh \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})), \end{aligned} \quad (3.7)$$

agora substituindo as eq.(3.6) e (3.7) em (3.5) e depois em (3.4) teremos

$$\begin{aligned} \frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} &= \frac{\cosh \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}))}{\cosh \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}))} \\ &\quad \frac{-\sigma_i \sinh \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}))}{+\sigma_i \sinh \beta (J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}))}, \end{aligned}$$

$$\frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} = \frac{1 - \sigma_i \tanh \beta \left(J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \right)}{1 + \sigma_i \tanh \beta \left(J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \right)}. \quad (3.8)$$

Se todos os spins (menos σ_i) são considerados fixos o modelo estocástico descrito em (3.1) aproxima-se do equilíbrio (estado estacionário), no qual

$$\frac{P(-\sigma_i)}{P(\sigma_i)} = \frac{\omega(\sigma_i)}{\omega(-\sigma_i)}, \quad (3.9)$$

logo:

$$\omega(\sigma_i) = \frac{1}{2} \mu \left\{ 1 - \sigma_i \tanh \left[\beta J_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \beta J_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \right] \right\}, \quad (3.10)$$

onde o parâmetro μ que aparece na equação acima, simplesmente descreve a escala de tempo em que as transições se sucedem. Ele não tem nenhum análogo na discussão do modelo de Ising com interação entre primeiros e segundos vizinhos no equilíbrio.

Comparando a equação (3.10) com a equação (3.3), observamos que elas não estão de acordo. Isto evidencia que a expressão de Glauber (equação 3.3) não leva a um estado estacionário de equilíbrio termodinâmico para o modelo de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos. A relação de Glauber é linear e permite solução exata da dinâmica, mas é incorreta quando levamos em consideração interações entre segundos vizinhos, por isso, no presente trabalho usaremos a equação (3.10).

Analisando novamente a equação (3.10) podemos observar que o termo $\tanh(K_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + K_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}))$ onde $K_1 = \frac{J_1}{K_B T}$ e $K_2 = \frac{J_2}{K_B T}$, pode assumir os seguintes valores :

$$\rho = \tanh(2K_1 + 2K_2), \quad (3.11)$$

$$\gamma = \tanh(2K_1 - 2K_2), \quad (3.12)$$

$$\delta = \tanh(2K_2), \quad (3.13)$$

$$\eta = \tanh(2K_1), \quad (3.14)$$

desenvolvendo $\tanh(K_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + K_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}))$, teremos

$$\begin{aligned} \tanh\{K_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + K_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})\} = & \left(\frac{(1 + \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i+1})(1 + \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right. \\ & - \left. \frac{(1 - \sigma_{i-1})(1 - \sigma_{i+1})(1 - \sigma_{i-2})(1 - \sigma_{i+2})}{16} \right) \rho + \left(\frac{(1 + \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i+1})(1 - \sigma_{i-2})(1 - \sigma_{i+2})}{16} \right. \\ & - \left. \frac{(1 - \sigma_{i-1})(1 - \sigma_{i+1})(1 + \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right) \gamma + \left(\frac{(1 + \sigma_{i-1})(1 - \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right. \\ & - \left. \frac{(1 - \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i+1})(1 - \sigma_{i-2})(1 - \sigma_{i+2})}{16} \right) \delta + \left(\frac{(1 - \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i+1})(1 + \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right. \\ & - \left. \frac{(1 + \sigma_{i-1})(1 - \sigma_{i+1})(1 - \sigma_{i-2})(1 - \sigma_{i+2})}{16} \right) \delta + \left(\frac{(1 + \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i+1})(1 + \sigma_{i-2})(1 - \sigma_{i+2})}{16} \right. \\ & - \left. \frac{(1 - \sigma_{i-1})(1 - \sigma_{i+1})(1 - \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right) \eta + \left(\frac{(1 + \sigma_{i-1})(1 + \sigma_{i+1})(1 - \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right. \\ & - \left. \frac{(1 - \sigma_{i-1})(1 - \sigma_{i+1})(1 + \sigma_{i-2})(1 + \sigma_{i+2})}{16} \right) \eta, \end{aligned}$$

manipulando a equação anterior, teremos

$$\begin{aligned} \tanh\{K_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + K_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})\} = & \frac{1}{8} \left((\sigma_{i-1}\sigma_{i+1}\sigma_{i-2})(\rho - \gamma - 2\delta) \right. \\ & + (\sigma_{i-1}\sigma_{i+1}\sigma_{i+2})(\rho - \gamma - 2\delta) + (\sigma_{i-1}\sigma_{i+2}\sigma_{i-2})(\rho + \gamma - 2\eta) + (\sigma_{i+1}\sigma_{i+2}\sigma_{i-2}) \\ & (\rho + \gamma - 2\eta) + \sigma_{i-1}(\rho + \gamma + 2\eta) + \sigma_{i+1}(\rho + \gamma + 2\eta) \\ & \left. + \sigma_{i-2}(\rho - \gamma + 2\delta) + \sigma_{i+2}(\rho - \gamma + 2\delta) \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tanh\{K_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + K_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})\} = & \frac{1}{8} \left((\rho - \gamma - 2\delta)\sigma_{i-1}\sigma_{i+1}(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \right. \\ & (\rho + \gamma - 2\eta)\sigma_{i-2}\sigma_{i+2}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + (\rho + \gamma + 2\eta)(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + (\rho - \gamma + 2\delta)(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \left. \right), \end{aligned}$$

chamando

$$A = \frac{1}{4}(\rho + \gamma + 2\eta),$$

$$B = \frac{1}{4}(\rho - \gamma + 2\delta),$$

$$C = \frac{1}{4}(\rho + \gamma - 2\eta),$$

$$D = \frac{1}{4}(\rho - \gamma - 2\delta),$$

vemos que

$$\begin{aligned} \tanh\{K_1(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + K_2(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2})\} = & \frac{A}{2}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \frac{B}{2}(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \\ & \frac{D}{2}\sigma_{i-1}\sigma_{i+1}(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \frac{C}{2}\sigma_{i-2}\sigma_{i+2}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}). \quad (3.15) \end{aligned}$$

Substituindo a equação (3.15) na equação (3.10), teremos a forma final da transição de probabilidade $w(\sigma_i)$

$$\omega(\sigma_i) = \frac{1}{2}\mu \left\{ 1 - \sigma_i \left[\frac{A}{2}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \frac{B}{2}(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \frac{D}{2}\sigma_{i-1}\sigma_{i+1}(\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \frac{C}{2}\sigma_{i-2}\sigma_{i+2}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right] \right\}. \quad (3.16)$$

Para o limite $J_2 \rightarrow 0$, teremos

$$A = \eta, \quad B = 0, \quad C = 0, \quad D = 0,$$

com isto

$$\omega(\sigma_i) = \frac{1}{2}\mu \left(1 - \sigma_i \left(\frac{\eta}{2}(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right) \right).$$

que é idêntica à equação proposta por Glauber (equação 30, ref 1), para o modelo de Ising com interações entre primeiros vizinhos, apenas.

As probabilidades $P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t)$ que satisfazem a equação Master fornecem, como já citamos, a descrição mais completa possível do sistema. Podemos observar, também, que para um grande número de spins elas contém mais informações que o necessário para responder às questões físicas mais comuns sobre o sistema. De fato, muitas vezes é suficiente conhecer somente a probabilidade de que os spins individuais ou pares de spins ocupem estados específicos.

Vamos então definir $q_i(t)$ como sendo o valor esperado do spin $\sigma_i(t)$, considerado como uma função estocástica do tempo

$$q_i(t) = \langle \sigma_i(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t), \quad (3.17)$$

e definiremos também um $r_{j,k}(t)$ como o valor esperado do produto $\sigma_j(t)\sigma_k(t)$.

$$r_{j,k}(t) = \langle \sigma_j(t)\sigma_k(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_j \sigma_k P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t). \quad (3.18)$$

Para encontrar as equações dependentes do tempo satisfeitas pelos valores esperados, vamos escrever a Equação Master(3.2) numa forma mais compacta proposta por Glauber (equação 28, ref. 1).

$$\frac{d}{dt} P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t) = - \sum_m \sigma_m \sum_{\sigma'_m} \sigma'_m \omega(\sigma'_m) P(\sigma_1, \dots, \sigma'_m, \dots, \sigma_n, t). \quad (3.19)$$

Se multiplicarmos ambos os lados desta relação por σ_i e somarmos sobre todos os valores da variável σ obteremos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i(t) &= -2 \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \omega(\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t) \\ &= -2 \langle \sigma_i(t) \omega(\sigma_i(t)) \rangle . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Substituindo a equação (3.16) na equação (3.20) teremos

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i(t) \rangle = -2 \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \left\{ \frac{1}{2} \mu \left[1 - \sigma_i \left(\frac{A}{2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \frac{B}{2} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. \frac{D}{2} \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) + \frac{C}{2} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right) \right] \right\} P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t),$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_i(t) \rangle = -2 \sum_{\{\sigma\}} \left\{ \frac{1}{2} \mu \left[1 - \sigma_i \left(\frac{1}{8} \rho (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1} + \sigma_{i-2} + \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} \right. \right. \right.$$

$$+ \sigma_{i+1} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i-2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i+2}) - \frac{1}{8} \gamma (-\sigma_{i-1} - \sigma_{i+1} + \sigma_{i-2}$$

$$+ \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i-2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} - \sigma_{i+1} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} - \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i-2})$$

$$+ \frac{1}{4} \delta (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2} - \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i-2} - \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i+2}) \frac{1}{4} \eta (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}$$

$$\left. \left. - \sigma_{i-1} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} - \sigma_{i+1} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2}) \right] \right\} P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t). \quad (2.21)$$

Podemos agora escrever a equação (2.21) de uma forma mais compacta

$$\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_i \rangle + \frac{A}{2} \langle \sigma_{i-1} + \sigma_{i+1} \rangle + \frac{B}{2} \langle \sigma_{i-2} + \sigma_{i+2} \rangle$$

$$+ \frac{C}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \rangle. \quad (3.22)$$

Agora se multiplicarmos ambos os lados da equação (3.18) por $\sigma_j \sigma_k$ (com $j \neq k$) e somarmos sobre todas as variáveis de spins teremos

$$\frac{d}{dt} r_{j,k} = -2 \sum_{\{\sigma\}} \sigma_j \sigma_k (\omega(\sigma_j) + \omega(\sigma_k)) P(\sigma_1, \dots, \sigma_n, t)$$

$$= -2 \langle \sigma_j(t) \sigma_k(t) (\omega(\sigma_j(t)) + \omega(\sigma_k(t))) \rangle. \quad (2.23)$$

Substituindo a equação (3.16) na equação acima podemos calcular as correlações entre primeiros e segundos vizinhos, obtendo

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_j \sigma_k \rangle &= -2 \langle \sigma_j \sigma_k \rangle + \frac{1}{8} (\rho + \gamma + 2\eta) (\langle \sigma_k \sigma_{j+1} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k+1} \rangle) + \\
&\quad \frac{1}{8} (\rho + \gamma + 2\eta) (\langle \sigma_k \sigma_{j-1} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k-1} \rangle) + \\
&\quad \frac{1}{8} (\rho + \gamma + 2\eta) (\langle \sigma_k \sigma_{j-1} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k-1} \rangle) + \frac{1}{8} (\rho - \gamma + 2\delta) (\langle \sigma_k \sigma_{j+2} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k+2} \rangle + \\
&\quad \frac{1}{8} (\rho - \gamma + 2\delta) (\langle \sigma_k \sigma_{j-2} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k-2} \rangle) + \frac{1}{8} (\rho - \gamma - 2\delta) (\langle \sigma_k \sigma_{j-1} \sigma_{j+1} \sigma_{j-2} \rangle + \\
&\quad \langle \sigma_j \sigma_{k-1} \sigma_{k+1} \sigma_{k-2} \rangle) + \frac{1}{8} (\rho - \gamma - 2\delta) (\langle \sigma_k \sigma_{j-1} \sigma_{j+1} \sigma_{j+2} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k-1} \sigma_{k+1} \sigma_{k+2} \rangle) \\
&\quad \frac{1}{8} (\rho + \gamma - 2\eta) (\langle \sigma_k \sigma_{j-2} \sigma_{j+2} \sigma_{j+1} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k-2} \sigma_{k+2} \sigma_{k+1} \rangle) + \frac{1}{8} (\rho + \gamma - 2\eta) \\
&\quad (\langle \sigma_k \sigma_{j-2} \sigma_{j+2} \sigma_{i+1} \rangle + \langle \sigma_j \sigma_{k-2} \sigma_{k+2} \sigma_{k-1} \rangle). \tag{3.24}
\end{aligned}$$

A correlação entre primeiros vizinhos, pode ser obtida a partir da expressão (3.23), fazendo $j = i$ e $k = i + 1$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle &= -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i-1} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \rangle + \frac{C}{2} \langle \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} \\
&\quad \sigma_{i-2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \rangle + \frac{A}{2} \langle \sigma_{i+1} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \rangle + \frac{B}{2} \langle \sigma_{i+1} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \rangle \\
&\quad + \frac{D}{2} \langle \sigma_i \sigma_i \sigma_{i+2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+3}) \rangle + \frac{C}{2} \langle \sigma_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+3} (\sigma_i + \sigma_{i+2}) \rangle + \\
&\quad \frac{A}{2} \langle \sigma_i (\sigma_i (\sigma_i + \sigma_{i+2})) \rangle + \frac{B}{2} \langle \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+3}) \rangle,
\end{aligned}$$

logo teremos

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle &= -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i-1} + 2\sigma_{i-1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i+2} \sigma_{i+3} \rangle + \\
&\frac{C}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+3} + \sigma_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+2} \sigma_{i+3} \rangle + \\
\frac{A}{2} \langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle &+ A + \frac{B}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_i + \sigma_i \sigma_{i+3} \rangle. \quad (3.25)
\end{aligned}$$

Calculamos as correlações de segundos vizinhos usando a equação (3.24), e fazendo $j = i$ e $k = i + 2$, logo

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle &= -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i+2} \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \rangle + \\
&\frac{C}{2} \langle \sigma_{i+2} \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \rangle + \frac{A}{2} \langle \sigma_{i+2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \rangle + \\
&\frac{B}{2} \langle \sigma_{i+2} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+3} (\sigma_i + \sigma_{i+4}) \rangle + \\
&\frac{C}{2} \langle \sigma_i \sigma_i \sigma_{i+4} (\sigma_{i+1} + \sigma_{i+3}) \rangle + \frac{A}{2} \langle \sigma_i (\sigma_{i+1} + \sigma_{i+3}) \rangle \\
&+ \frac{B}{2} \langle \sigma_i (\sigma_i + \sigma_{i+4}) \rangle,
\end{aligned}$$

que pode ser escrita da seguinte forma.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle &= -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} \sigma_{i-1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+3} + \\
&\sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+3} \sigma_{i+4} \rangle + \frac{C}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} + \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+4} + \sigma_{i+3} \sigma_{i+4} \rangle +
\end{aligned}$$

$$\frac{A}{2} \langle \sigma_{i-1}\sigma_{i+2} + \sigma_{i+1}\sigma_{i+2} + \sigma_i\sigma_{i+1} + \sigma_i\sigma_{i+3} \rangle + \frac{B}{2} \langle \sigma_{i-2}\sigma_{i+2} + \sigma_i\sigma_{i+4} \rangle + B. \quad (3.26)$$

No limite $J_2 \rightarrow 0$ (modelo de Glauber)⁴, vemos que $K_2 = 0$, logo:

$$\rho = \tanh(2K_1 + 2K_2) = \tanh(2K_1),$$

$$\gamma = \tanh(2K_1 - 2K_2) = \tanh(2K_1),$$

$$\delta = \tanh(2K_2) = 0,$$

$$\eta = \tanh(2K_1),$$

então, neste caso temos

$$A = \tanh(2K_1),$$

$$B = 0,$$

$$C = 0,$$

$$D = 0.$$

Com isto o valor médio de um spin (equação (3.19)) e a função correlação de dois spins (equação (3.22)) podem ser escritos como

$$\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = - \langle \sigma_i \rangle + \frac{\eta}{2} \langle \sigma_{i-1} + \sigma_{i+1} \rangle,$$

$$\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle + \frac{\eta}{2} \langle 2 + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle,$$

que coincidem as equações propostas por Glauber (equações 30 e 31 ref. 1).

CAPÍTULO IV

EQUAÇÕES DA DINÂMICA COM APROXIMAÇÃO DE PARES

Inicialmente vamos reescrever as equações para $\langle \sigma_i \rangle$, $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ e $\langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle$ dependentes do tempo.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \rangle = & \langle \sigma_i \rangle + \frac{A}{2} \langle \sigma_{i-1} + \sigma_{i+1} \rangle + \frac{B}{2} \langle \sigma_{i-2} + \sigma_{i+2} \rangle \\ & + \frac{C}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} (\sigma_{i-2} + \sigma_{i+2}) \rangle, \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = & -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle + \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i-1} + 2\sigma_{i-1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i+2} \sigma_{i+3} \rangle \\ & + \frac{C}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+3} + \sigma_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+2} \sigma_{i+3} \rangle \\ & + \frac{B}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_i + \sigma_i \sigma_{i+3} \rangle \\ & + A + \frac{A}{2} \langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle, \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} \langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle &= -2 \langle \sigma_i \sigma_{i+2} \rangle + \frac{A}{2} \langle \sigma_{i-1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} + \sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma_i \sigma_{i+3} \rangle \\
&+ \frac{B}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+2} + \sigma_i \sigma_{i+4} \rangle + B \\
&+ \frac{D}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} \sigma_{i-1} \sigma_{i+2} + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+3} + \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+3} \sigma_{i+4} \rangle \\
&+ \frac{C}{2} \langle \sigma_{i-2} \sigma_{i-1} + \sigma_{i-2} \sigma_{i+1} + \sigma_{i+1} \sigma_{i+4} + \sigma_{i+3} \sigma_{i+4} \rangle . \tag{4.3}
\end{aligned}$$

Analisando as equações acima observamos que elas envolvem três tipos diferentes de funções de correlação de spin. Na primeira equação temos valores médios de spins isolados e de produtos de três spins escolhidos entre os primeiros e segundos vizinhos do spin central (equação (4.1)). Na segunda equação temos o valor médio de um par de spins primeiros vizinhos e de produtos de dois e quatro spins, escolhidos entre os primeiros e segundos vizinhos do par central (equação (4.2)) e finalmente, na terceira equação temos o valor médio de um par de spins segundos vizinhos e de produtos de dois e quatro spins, escolhidos entre os primeiros e segundos vizinhos do par central (equação (4.3)).

Notamos então que, no caso do modelo de Ising com interações entre primeiro e segundos vizinhos, a equação de evolução temporal do valor esperado do produto de n variáveis σ tem em seu segundo membro valores esperados dos produtos de n e $n + 2$ variáveis σ . Este acoplamento, que desaparece no caso $J_2 = 0$, faz com que as equações não sejam solúveis pelas técnicas usadas por Glauber² no caso do modelo com interações entre primeiros vizinhos apenas.

Para estudarmos estas equações, vamos usar uma aproximação em que as probabilidades das configurações de aglomerados de spins são escritas em termos das

probabilidades de pares de spins ⁴. Para isto vamos dividir a rede unidimensional em duas subredes A e B alternadas (Fig.4). Procuramos soluções em que o valor médio de σ_i^A é igual a m_1 para qualquer spin pertencente à subrede A, o valor médio de σ_{i+1}^B é igual a m_2 para qualquer spin pertencente à subrede B, o valor médio da correlação de spins $\sigma_i^A \sigma_{i+2}^A$ é igual a r_1 para qualquer par de spins pertencente à subrede A, o valor médio da correlação de spins $\sigma_i^B \sigma_{i+2}^B$ é igual a r_2 para qualquer par de spins pertencente à subrede B, e finalmente, o valor médio da correlação de dois spins $\sigma_i^A \sigma_{i+1}^B$ é igual a r_3 para qualquer par de spins primeiros vizinhos.

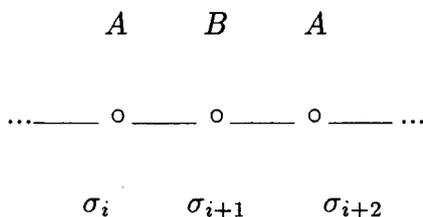


Fig. 4 Modelo subdividido em duas subredes A e B alternadas

Vamos chamar de $P_1(\sigma_i, \sigma_{i+1})$, a probabilidade de uma configuração do par de spins primeiros vizinhos, de $P_2(\sigma_i, \sigma_{i+2})$ a mesma probabilidade para um par de spins segundos vizinhos e de $P(\sigma_i)$ a probabilidade de uma configuração de um spin individual. Temos então que:

$$P_A(\sigma_i^A) = \frac{1}{2}(1 + m_1 \sigma_i^A), \quad (4.4)$$

onde $P_A(\sigma_i^A)$ é a probabilidade do spin σ_i na subrede A. Para os outros casos teremos

$$P_B(\sigma_{i+1}^B) = \frac{1}{2}(1 + m_2 \sigma_{i+1}^B), \quad (4.5)$$

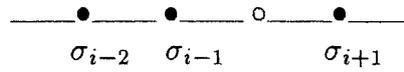
$$P_1(\sigma_i^A, \sigma_{i+1}^B) = \frac{1}{4}(1 + m_1 \sigma_i^A + m_2 \sigma_{i+1}^B + r_3 \sigma_i^A \sigma_{i+1}^B), \quad (4.6)$$

$$P_{2,A}(\sigma_i^A, \sigma_{i+2}^A) = \frac{1}{4}(1 + m_1\sigma_i^A + m_1\sigma_{i+2}^A + r_1\sigma_i^A\sigma_{i+2}^A), \quad (4.7)$$

$$P_{2,B}(\sigma_i^B, \sigma_{i+2}^B) = \frac{1}{4}(1 + m_2\sigma_i^B + m_2\sigma_{i+2}^B + r_2\sigma_i^B\sigma_{i+2}^B), \quad (4.8)$$

Vamos agora calcular as probabilidades de pares para os diferentes tipos de aglomerados nas equações (4.1-4).

A) Para um aglomerado do tipo



a probabilidade total é dada por $P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1})$. Usando a aproximação de pares

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) \sim P(\sigma_{i-1})P(\sigma_{i+1} | \sigma_{i-1})P(\sigma_{i-2} | \sigma_{i-1}),$$

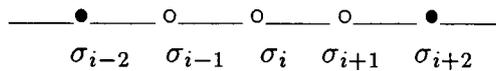
onde $P(\sigma_j | \sigma_{i-1})$ é a probabilidade condicional de obtermos σ_j para σ_{i-1} dado. Usando a identidade

$$P(\sigma_j, \sigma_{i-1}) = P(\sigma_{i-1})P(\sigma_j | \sigma_{i-1}),$$

teremos:

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) \sim \frac{P(\sigma_{i-1}, \sigma_{i-2})P(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1})}{P(\sigma_{i-1})}.$$

B) Se o aglomerado for do tipo



podemos escrever a probabilidade total como

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i+2}) = \sum_{\sigma_i} P(\sigma_{i-2}, \sigma_i, \sigma_{i+2}),$$

a probabilidade de pares é dada por

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_i, \sigma_{i+2}) \sim P(\sigma_i)P(\sigma_{i-2} | \sigma_i)P(\sigma_{i+2} | \sigma_i),$$

com $P(\sigma_j | \sigma_i)$ sendo a probabilidade condicional de obtermos σ_j para σ_i dado. Usando a identidade

$$P(\sigma_i, \sigma_j) = P(\sigma_i)P(\sigma_j | \sigma_i),$$

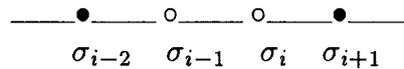
vemos que,

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_i, \sigma_{i+2}) \sim \frac{P(\sigma_{i-2}, \sigma_i)P(\sigma_{i+2}, \sigma_i)}{P(\sigma_i)},$$

onde concluímos

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i+2}) = \sum_{\sigma_i} \frac{P(\sigma_{i-2}, \sigma_i)P(\sigma_{i+2}, \sigma_i)}{P(\sigma_i)}.$$

C) Agora para um aglomerado do tipo



podemos escrever a probabilidade total como

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i+1}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i} P(\sigma_{i-2}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_{i-1}} P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}),$$

a aproximação de pares para o primeiro termo do lado direito da equação acima é dado por

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \sim P(\sigma_i)P(\sigma_{i-2} | \sigma_i)P(\sigma_{i+1} | \sigma_i),$$

onde $P(\sigma_j | \sigma_i)$ é a probabilidade condicional de obtermos σ_j para σ_i dado. Usando a identidade

$$P(\sigma_j, \sigma_i) = P(\sigma_i)P(\sigma_j | \sigma_i),$$

teremos

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_i, \sigma_{i+1}) \sim \frac{P(\sigma_{i-2}, \sigma_i)P(\sigma_{i+1}, \sigma_i)}{P(\sigma_i)}.$$

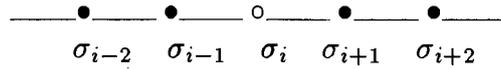
Para o outro termo da equação , seguindo os mesmos argumentos segue-se que

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) \sim \frac{P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1})P(\sigma_{i+1}, \sigma_{i-1})}{P(\sigma_{i-1})},$$

que resulta em

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i+1}) \sim \frac{1}{2} \sum_{\sigma_i} \frac{P(\sigma_{i-2}, \sigma_i)P(\sigma_{i+1}, \sigma_i)}{P(\sigma_i)} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_{i-1}} \frac{P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1})P(\sigma_{i+1}, \sigma_{i-1})}{P(\sigma_{i-1})}.$$

D) Para um aglomerado do tipo



a probabilidade total é dado por $P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}, \sigma_{i+2})$. Podemos escrever a aproximação de pares como

$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}, \sigma_{i+2}) \sim P(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1})P(\sigma_{i-2} | \sigma_{i-1})P(\sigma_{i+2} | \sigma_{i+1}),$$

usando,

$$P(\sigma_{i-2} | \sigma_{i-1}) = P(\sigma_{i-1})P(\sigma_{i-2} | \sigma_{i-1}),$$

$$P(\sigma_{i+2} | \sigma_{i+1}) = P(\sigma_{i+1})P(\sigma_{i+2} | \sigma_{i+1}),$$

teremos

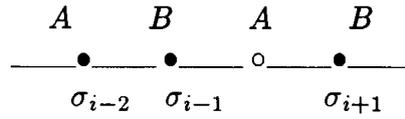
$$P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}, \sigma_{i+2}) \sim \frac{P(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1})P(\sigma_{i-2}, \sigma_{i-1})P(\sigma_{i+2}, \sigma_{i+1})}{P(\sigma_{i-1})P(\sigma_{i+1})}.$$

Em ambos os casos, se fizermos a aproximação $P(\sigma_i \sigma_j) \sim P(\sigma_i)P(\sigma_j)$ obtemos resultados de campo médio⁷, em que as probabilidades de qualquer aglomerado de spins são escritas como produtos das probabilidades individuais dos spins do aglomerado. Para o modelo de Ising com interação somente entre primeiros vizinhos a aproximação de pares, leva a um estado estacionário equivalente ao estado de equilíbrio termodinâmico obtido na aproximação de Bethe⁴.

Para melhor fixarmos a idéia vamos aplicar as expressões acima num produto de três spins da equação (4.1)

$$\langle \sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B \sigma_{i-2}^A \rangle = \sum_{\sigma_i} \sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B \sigma_{i-2}^A P(\sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \sigma_{i-2}), \quad (4.9)$$

representado graficamente por



escolhendo como spin central σ_{i-1} e usando aproximação de pares, vemos que:

$$P(\sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B \sigma_{i-2}^A) \approx \frac{P(\sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B) P(\sigma_{i-1}^B \sigma_{i-2}^A)}{P(\sigma_{i-1}^B)}. \quad (4.10)$$

Substituindo a eq.(4.10) na eq.(4.9) e somando para todos os valores dos spins, teremos

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B \sigma_{i-2}^A \rangle &\approx \frac{P(+B+B)P(+B+A)}{P(+B)} - \frac{P(-B+B)P(-B+A)}{P(-B)} - \frac{P(+B-B)P(+B+A)}{P(+B)} \\
&- \frac{P(+B+B)P(+B-A)}{P(+B)} - \frac{P(-B-B)P(-B-A)}{P(-B)} + \frac{P(+B-B)P(+B-A)}{P(+B)} \\
&+ \frac{P(-B+B)P(-B-A)}{P(-B)} + \frac{P(-B-B)P(-B+A)}{P(-B)},
\end{aligned}$$

usando as equações (4.4 – 8), segue-se que

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B \sigma_{i-2}^A \rangle &\approx \frac{(1-r_2)}{2(1-m_2)} \left(\frac{1}{4}(1-m_1-m_2+r_3) - \frac{1}{4}(1+m_1-m_2-r_3) \right) \\
&+ \frac{(1-r_2)}{2(1+m_2)} \left(\frac{1}{4}(1-m_1+m_2-r_3) - \frac{1}{4}(1+m_1+m_2+r_3) \right) \\
&+ \frac{(1-2m_2+r_2)}{2(1-m_2)} \left(\frac{1}{4}(1+m_1-m_2-r_3) - \frac{1}{4}(1-m_1-m_2+r_3) \right) \\
&+ \frac{(1+2m_2+r_2)}{2(1+m_2)} \left(\frac{1}{4}(1+m_1+m_2+r_3) - \frac{1}{4}(1-m_1+m_2-r_3) \right),
\end{aligned}$$

manipulando algebricamente a equação acima vemos que:

$$\langle \sigma_{i-1}^B \sigma_{i+1}^B \sigma_{i-2}^A \rangle \approx \frac{r_2(m_2 r_3 - m_1) - m_2(r_3 - m_1 m_2)}{m_2^2 - 1}. \quad (4.11)$$

Agora aplicando este procedimento para os outros aglomerados das equações concluímos que, na aproximação de pares, podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} m_1 &= -m_1 + Am_2 + Bm_1 + Cm_1 r_3 \\ &+ D \left(\frac{r_2(m_2 r_3 - m_1) - m_2(r_3 - m_1 m_2)}{m_2^2 - 1} \right), \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} m_2 &= -m_2 + Am_1 + Bm_2 + Cm_2 r_3 \\ &+ D \left(\frac{r_1(m_1 r_3 - m_2) - m_1(r_3 - m_1 m_2)}{m_1^2 - 1} \right), \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} r_1 &= -2r_1 + \frac{D}{2} \left\{ 2r_2 - \frac{(2m_1^2(m_2^2 - r_2) - 4r_3 m_1 m_2(m_2^2 - r_2) - 2r_3^2(m_2^2(r_2 - 2) + 1))}{(1 - m_2^2)^2} \right\} \\ &+ \frac{C}{2} \left\{ 2r_3 + \frac{m_2 m_1 + r_2 r_3 - m_2^2 r_3 - m_1 m_2 r_2}{(1 - m_2^2)} + \frac{m_2 m_1 + r_1 r_3 - m_1^2 r_3 - m_1 m_2 r_2}{(1 - m_1^2)} \right\} \\ &+ \frac{A}{2} \left\{ 2r_3 + \frac{m_2 m_1 + r_2 r_3 - m_2^2 r_3 - m_1 m_2 r_2}{(1 - m_2^2)} + \frac{m_2 m_1 + r_1 r_3 - m_1^2 r_3 - m_1 m_2 r_2}{(1 - m_1^2)} \right\} \\ &+ \frac{B}{2} \left\{ \frac{2m_1^2 + 2r_1^2 - 4r_1 m_1^2}{(1 - m_1^2)} \right\} + B, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} r_2 &= -2r_2 + \frac{D}{2} \left\{ 2r_1 - \frac{(2m_2^2(m_1^2 - r_1) - 4r_3 m_1 m_2 (m_1^2 - r_1) - 2r_3^2 (m_1^2 (r_1 - 2) + 1))}{(1 - m_1^2)^2} \right\} \\
&+ \frac{C}{2} \left\{ 2r_3 + \frac{m_2 m_1 + r_1 r_3 - m_1^2 r_3 - m_1 m_2 r_1}{(1 - m_1^2)} + \frac{m_2 m_1 + r_2 r_3 - m_2^2 r_3 - m_1 m_2 r_1}{(1 - m_2^2)} \right\} \\
&+ \frac{A}{2} \left\{ 2r_3 + \frac{m_2 m_1 + r_1 r_3 - m_1^2 r_3 - m_1 m_2 r_1}{(1 - m_1^2)} + \frac{m_2 m_1 + r_2 r_3 - m_2^2 r_3 - m_1 m_2 r_1}{(1 - m_2^2)} \right\} \\
&+ \frac{B}{2} \left\{ \frac{2m_2^2 + 2r_2^2 - 4r_2 m_2^2}{(1 - m_2^2)} \right\} + B, \tag{4.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu} \frac{d}{dt} r_3 &= -2r_3 + \frac{D}{2} \left\{ 2r_3 + \frac{m_2 m_1 + r_2 r_3 - m_2^2 r_3 - m_1 m_2 r_2}{1 - m_2^2} + \frac{m_2 m_1 + r_1 r_3 - m_1^2 r_3 - m_1 m_2 r_1}{1 - m_1^2} \right\} \\
&+ \frac{C}{2} \left\{ \frac{m_1^2 + r_1^2 - 2r_1 m_1^2}{1 - m_1^2} - \frac{(m_2^2 (m_1^2 - r_1) - 2r_3 m_1 m_2 (m_1^2 - r_1) - r_3^2 (m_1^2 (r_1 - 2) + 1))}{(1 - m_1^2)^2} \right. \\
&+ \left. \frac{m_2^2 + r_2^2 - 2r_2 m_2^2}{1 - m_2^2} - \frac{(m_1^2 (m_2^2 - r_2) - 2r_3 m_1 m_2 (m_2^2 - r_2) - r_3^2 (m_2^2 (r_2 - 2) + 1))}{(1 - m_2^2)^2} \right\} \\
&+ \frac{B}{2} \left\{ 2r_3 + \frac{m_2 m_1 + r_2 r_3 - m_2^2 r_3 - m_1 m_2 r_2}{(1 - m_1^2)} + \frac{m_2 m_1 + r_1 r_3 - m_1^2 r_3 - m_1 m_2 r_1}{(1 - m_1^2)} \right\} \\
&+ \frac{A}{2} (r_1 + r_2) + A. \tag{4.16}
\end{aligned}$$

Outra importante quantidade a se determinar é a função correlação de pares. Para isto vamos levar em conta que quando o sistema atinge o equilíbrio termodinâmico ($t \rightarrow \infty$), a magnetização espontânea numa cadeia linear é zero como pode ser verificado nas equações (4.12 – 13). Logo, as equações (4.14 – 16) assumem a forma:

$$0 = -2r_1 + D(r_2 + r_3^2) + \frac{1}{2}(C + A)(2r_3 + (r_2 + r_1)r_3) + Br_1^2 + B, \quad (4.17)$$

$$0 = -2r_2 + D(r_1 + r_3^2) + \frac{1}{2}(C + A)(2r_3 + (r_2 + r_1)r_3) + Br_2^2 + B, \quad (4.18)$$

$$0 = -2r_3 + \frac{C}{2}(r_1^2 + r_2^2 + 2r_3^2) + \frac{1}{2}(B + D)(2r_3 + (r_2 + r_1)r_3) + \frac{A}{2}(r_1 + r_2) + A. \quad (4.19)$$

Observando as expressões acima vemos que para encontrarmos os valores das funções de correlação, devemos resolver um sistema de equações não lineares onde as incógnitas são r_1, r_2, r_3 . Fazendo inicialmente (4.17) – (4.18) teremos:

$$-2r_1 + 2r_2 + D(r_2 - r_1) + Br_1^2 - Br_2^2 = 0,$$

$$-2r_1 - Dr_1 + Br_1^2 = -2r_2 - Dr_2 + Br_2^2,$$

$$r_1 = r_2,$$

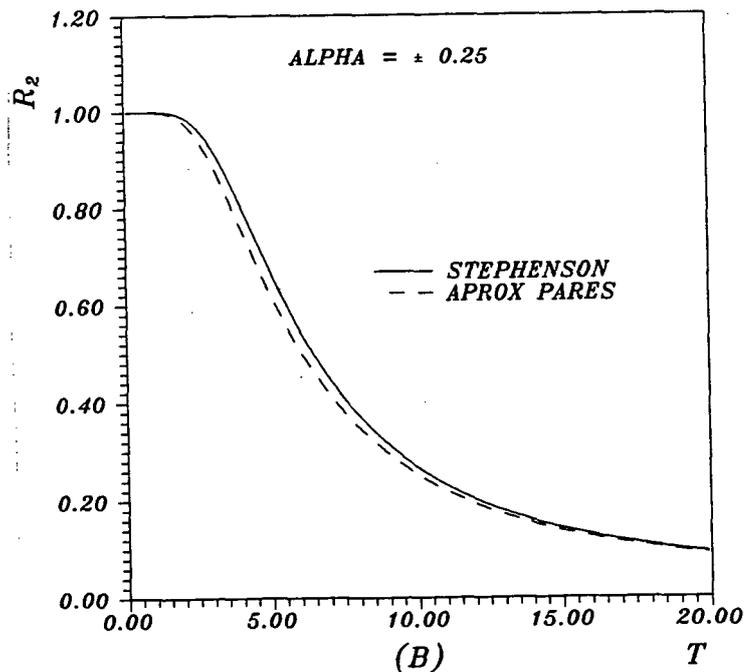
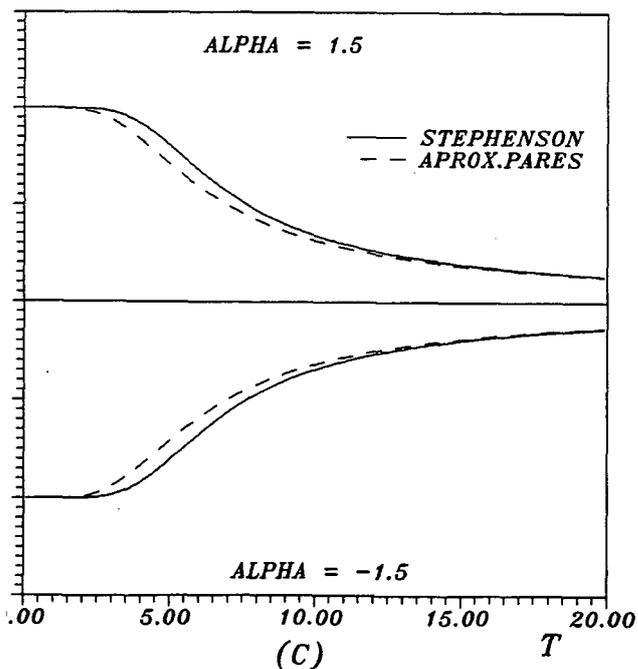
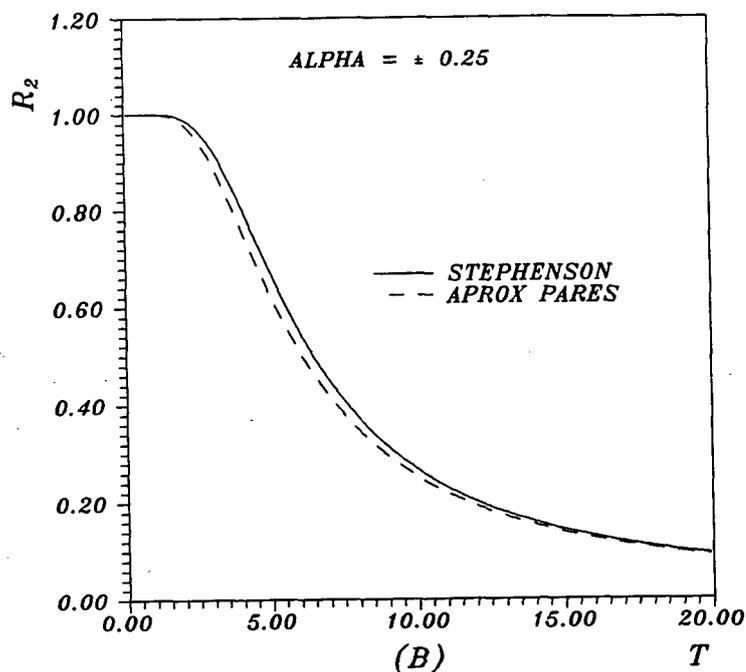
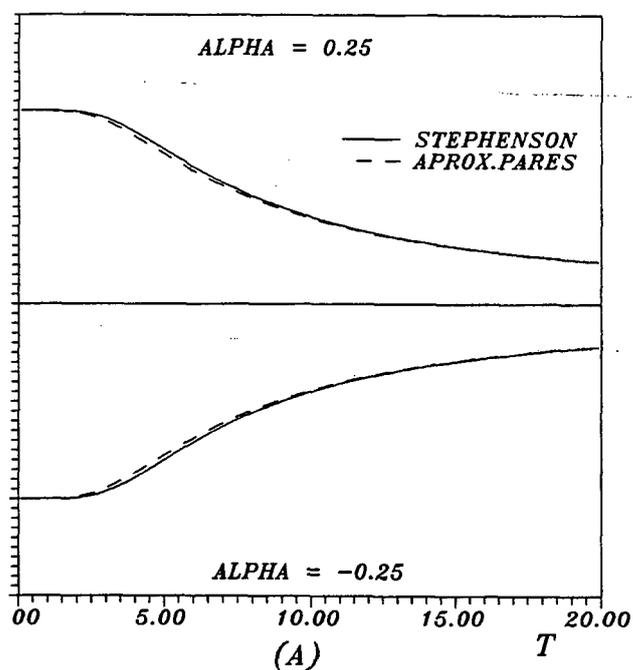
reduzindo o nosso sistema a somente duas equações e duas incógnitas

$$0 = -2r_2 + D(r_2 + r_3^2) + C(r_3 + r_2r_3) + A(r_3 + r_2r_3) + Br_2^2 + B, \quad (4.20)$$

$$0 = -2r_3 + D(r_3 + r_2r_3) + C(r_2^2 + r_3^2) + Ar_2 + B(r_3 + r_2r_3) + A. \quad (4.21)$$

Resolvendo numericamente as equações acima podemos fazer uma comparação com a solução exata encontrada por Stephenson⁵, através dos gráficos de r_3 x T

(fig.5a e 5c) e $r_2 \times T$ (fig. 5b e 5d) para diferentes regiões de α com $T = (k_B T)^{-1}$. Observamos que os resultados encontrados pela aproximação de pares são satisfatórios para um método aproximado.



Figuras 5 Os gráficos acima correspondem aos resultados numéricos encontrados na solução das equações (4.20-21) usando aproximação de pares comparados com os resultados exatos encontrados por Stephenson para diferentes valores de α , onde r_3 é a correlação entre spins primeiros vizinhos, r_2 a correlação entre spins segundos vizinhos e $T' \equiv K_B T/J_1$.

Estamos interessados em saber como é o comportamento do expoente crítico dinâmico para $\alpha \neq 0$. Uma forma de analisarmos e resolvermos aproximadamente o sistema de equações não lineares é tratarmos as interações entre segundos vizinhos J_2 como uma perturbação do sistema de Ising de primeiros vizinhos. Para isto, verificamos inicialmente o comportamento das funções ρ, γ, δ e η (equações (3.11-14)), fazendo uma expansão em série de Taylor até primeira ordem na variável α em torno do modelo com interações de primeiros vizinhos apenas ($\alpha = 0$), obtemos

$$\rho = \tanh \{2K_1(1 + \alpha)\} \simeq F + \alpha G,$$

$$\gamma = \tanh \{2K_1(1 - \alpha)\} \simeq F - \alpha G,$$

$$\delta = \tanh(2K_1\alpha) \simeq 2K_1\alpha,$$

$$\eta = \tanh(2K_1),$$

onde

$$F = \tanh(2K_1),$$

$$G = 2K_1 \operatorname{sech}^2(2K_1) = 2K_1(1 - \tanh^2(2K_1)) = 2K_1(1 - F^2).$$

Podemos agora reescrever as constantes A, B, C, D determinadas anteriormente de forma aproximada mantendo termos até primeira ordem em α

$$A = F,$$

$$B \simeq K_1(2 - F^2)\alpha,$$

$$C \simeq 0,$$

$$D \simeq -K_1 F^2 \alpha.$$

Substituindo as constantes A,B,C,D no sistema de equações não lineares (equações 4.20-21), e fazendo uma expansão em série de Taylor até primeira ordem das

correlações r_2 e r_3 na variável α

$$r_2 \simeq r_{20} + r_{21}\alpha,$$

$$r_3 \simeq r_{30} + r_{31}\alpha,$$

podemos concluir que:

$$0 = -2r_{20} + F(r_{30} + r_{20}r_{30}) + \left[-2r_{21} - K_1F^2(r_{20} + r_{30}^2) + F(r_{31} + r_{20}r_{31} + r_{30}r_{21}) + (K_1(2 - F^2))(r_{20} + 1) \right] \alpha, \quad (4.22)$$

$$0 = -2r_{30} + F(r_{20} + 1) + \left[-2r_{31} + (2K_1(1 - F^2))(r_{30} + r_{30}r_{20}) + Fr_{21} \right] \alpha. \quad (4.23)$$

Para ordem zero em α , isto é, somente com interações entre primeiros vizinhos podemos calcular o valor de r_{20} e r_{30} , pois o sistema de equações acima se reduz a

$$-2r_{20} + F(r_{30} + r_{20}r_{30}) = 0, \quad (4.24)$$

$$-2r_{30} + F(r_{20} + 1) = 0. \quad (4.25)$$

Resolvendo a equação (4.25) para r_{20} , segue-se que

$$r_{20} = \frac{2r_{30}}{F} - 1. \quad (4.26)$$

Substituindo em (4.24) obtemos

$$Fr_{30}^2 - 2r_{30} + F = 0, \quad (4.27)$$

donde concluímos que

$$r_{30} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - F^2}}{F}.$$

Como o valor da correlação r_{30} não pode exceder a unidade, a raiz fisicamente correta é dada por

$$r_{30} = \frac{1 - \sqrt{1 - F^2}}{F},$$

$$r_{30} = \tanh K_1. \quad (4.28)$$

Substituindo a equação (4.28) em (4.26), obteremos o valor para r_{20}

$$r_{20} = (\tanh K_1)^2, \quad (4.29)$$

que coincidem com os resultados exatos, que podem ser vistos, por exemplo, no artigo de Stephenson⁵.

Para primeira ordem em α , teremos

$$0 = -2r_{21} - K_1 F^2 (r_{20} + r_{30}^2) + F(r_{31}(1 + r_{20}) + r_{30}r_{21}) + K_1(2 - F^2)(r_{20}^2 + 1)$$

$$0 = -2r_{31} + Fr_{21} + 2K_1(1 - F^2)r_{30}(1 + r_{20}).$$

Basta substituírmos os resultados de r_{20} e r_{30} , fazendo $r_{30} = L$, $r_{20} = L^2$, e substituir no sistema de equações acima onde concluímos que

$$r_{21} = \frac{\Delta r_{21}}{\Delta} \quad \text{e} \quad r_{31} = \frac{\Delta r_{31}}{\Delta}$$

onde

$$\Delta = 4 - 2FL - F^2(1 + L^2)$$

$$\Delta r_{21} = 2K_1 \left[-2F^2L^2 + (2 - F^2)(1 + L^4) + FL(1 - F^2)(1 + L^2)^2 \right]$$

$$\Delta r_{31} = K_1 \left\{ 2L \left[2(1 - F^2)(1 + L^2) - FL(1 - F^2)(1 + L^2) - F^3L \right] + F(2 - F^2)(1 + L^4) \right\}$$

em $T = 0$, teremos

$$F = 1 \quad , \quad L = 1,$$

logo, $r_{20} = r_{30} = 1$, $r_{21} = 0$, $r_{31} = 0$, como esperado.

Vamos admitir que o nosso sistema está inicialmente fora do equilíbrio e quando $t \rightarrow \infty$ ele alcança o estado de equilíbrio. Estamos interessados em saber como esse sistema decai para o equilíbrio. Podemos então definir o tempo de relaxação (τ) deste fenômeno como o tempo característico que descreve o decaimento do sistema para o estado de equilíbrio. Nós sabemos que o tempo de relaxação diverge quando o sistema se aproxima do ponto crítico ($T_c = 0$)⁷. A forma de escala⁸ para o tempo de relaxação é

$$\tau \approx \xi^z \psi, \quad (4.30)$$

onde ψ é uma constante, z o expoente crítico dinâmico e ξ o comprimento de correlação .

Escrevendo novamente as equações dependentes do tempo para as magnetizações (4.12-13), e fazendo uma aproximação linear nos desvios de $m_{1,2}$ e $r_{1,2,3}$ do seu valor estacionário, válida para tempos suficientemente grandes, definimos

$$m_{1,2} = m_{1,2}(t),$$

$$r_{1,2,3} = r_{1,2,3}^* - \Delta r_{1,2,3}(t),$$

obtendo as equações :

$$\frac{1}{\mu} \frac{dm_1}{dt} = -m_1 + Am_2 + Bm_1 + Cr_3^* m_1 - Dr_2^* r_3^* m_2 + Dr_2^* m_1 + Dr_3^* m_2, \quad (4.31)$$

$$\frac{1}{\mu} \frac{dm_2}{dt} = -m_2 + Am_1 + Bm_2 + Cr_3^* m_2 - Dr_1^* r_3^* m_1 + Dr_1^* m_2 + Dr_3^* m_1, \quad (4.32)$$

onde A , B , C e D são constantes já definidas anteriormente e r_1^* , r_2^* e r_3^* são as correlações no estado estacionário. As equações acima admitem soluções do tipo:

$$m_1 = A_1 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad \text{e} \quad m_2 = A_2 e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (4.33)$$

onde A_1 e A_2 são constantes arbitrárias diferentes de zero e τ o tempo de relaxação. As derivadas de m_1 e m_2 em função de t são dadas por:

$$\frac{dm_1}{dt} = -\frac{A_1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad \text{e} \quad \frac{dm_2}{dt} = -\frac{A_2}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (4.34)$$

Substituindo as equações (4.45) e (4.46) em (4.43) e (4.44), teremos:

$$\begin{aligned} \frac{-1}{\mu} \frac{A_1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} &= -A_1 e^{-\frac{t}{\tau}} + A_2 A e^{-\frac{t}{\tau}} + A_1 B e^{-\frac{t}{\tau}} + A_1 C r_3 e^{-\frac{t}{\tau}} \\ &\quad - A_2 D r_2 r_3 e^{-\frac{t}{\tau}} + A_1 D r_2 e^{-\frac{t}{\tau}} + A_2 D r_3 e^{-\frac{t}{\tau}}, \\ \frac{-1}{\mu} \frac{A_2}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} &= -A_2 e^{-\frac{t}{\tau}} + A_1 A e^{-\frac{t}{\tau}} + A_2 B e^{-\frac{t}{\tau}} + A_2 C r_3 e^{-\frac{t}{\tau}} \\ &\quad - A_1 D r_2 r_3 e^{-\frac{t}{\tau}} + A_2 D r_3 e^{-\frac{t}{\tau}} + A_1 D r_3 e^{-\frac{t}{\tau}}, \end{aligned}$$

segue-se que:

$$0 = (\omega + B + C r_3 + D r_2 - 1) A_1 + (A - D r_2 r_3 + D r_3) A_2,$$

$$0 = (A - D r_2 r_3 + D r_3) A_1 + (\omega + B + C r_3 + D r_2 - 1) A_2.$$

onde $\frac{1}{\mu\tau} = \omega$.

O determinante característico do sistema acima é dado por

$$\omega + B + C r_3 + D r_2 - 1 = \pm(A - D r_2 r_3 + D r_3),$$

fazendo uma expansão em série de Taylor até primeira ordem em α da função ω ,

$$\omega = \omega_0 + \alpha \omega_1, \quad (4.35)$$

teremos, para ordem zero em α ,

$$\omega_0^2 - 2\omega_0 + 1 - F^2 = 0,$$

donde concluímos que

$$\omega_0 = 1 \pm F^2,$$

como o tempo de relaxação diverge em $T = 0$, a solução fisicamente correta é dada por

$$\omega_0 = 1 - F^2,$$

em $T \rightarrow 0$, $F = \tanh(2K_1) \sim 1 - 2x^4$, logo

$$\omega_0 \sim 2x^2, \tag{4.36}$$

onde $x = e^{-K_1}$.

Para ordem um em α , teremos

$$\omega_1 = K_1(-2 + F^2(1 + L^2 - L^3 + L)),$$

analisando o comportamento assintótico vemos que

$$L = \tanh(K_1) \sim 1 - 2x^2 + 2x^4,$$

logo,

$$\omega_1 \sim -16K_1x^4. \tag{4.37}$$

Substituindo as equações (4.36) e (4.37) em (4.35), teremos

$$\omega \simeq x^4(2 - 16K_1\alpha).$$

O tempo de relaxação (τ) é dado por

$$\mu\tau = \frac{x^{-4}}{2}(1 + 8K_1\alpha). \quad (4.38)$$

usando a relação (4.30) podemos agora calcular o expoente crítico dinâmico onde ξ é dado pela equação (2.29) fazendo uma expansão até primeira ordem da variável α .

$$\tau \approx \xi^z \psi,$$

onde $z = z_0 + z_1\alpha$, logo

$$2^{z_0}\omega_1^{2z_0}(1 + (z_1 \ln 2 + (2z_0 + z_1)K_1)\alpha) = \frac{\omega_1^4}{2}(1 + 8K_1\alpha),$$

analisando o comportamento para $T \rightarrow 0$ e $K_1 \rightarrow \infty$, em ordem 0 de α , vemos que

$$\omega_1^{2z_0} = \omega_1^4,$$

$$z_0 = 2.$$

Em primeira ordem de α

$$\alpha(4 + z_1)K_1 = 8K_1\alpha$$

$$z_1 = 4.$$

Podemos então concluir que

$$z = 2 + 4\alpha,$$

de forma que notamos que, na aproximação de pares, o expoente crítico dinâmico z depende da variável α .

Podemos observar que existe uma simetria no modelo, pois se trocarmos J_1 por $-J_1$ e mantendo J_2 idêntico ($\alpha \leq 0$) vemos que $\rho \rightarrow \gamma, \gamma \rightarrow -\rho, \delta \rightarrow \delta, \eta \rightarrow -\eta$. Logo as constantes A e C tornam-se $A \rightarrow -A, C \rightarrow -C$, enquanto que B e D permanecem as mesmas. As equações (4.12-16) permanecem invariantes sob as transformações

$$m_1 \rightarrow m_1$$

$$m_2 \rightarrow -m_2$$

$$r_1 \rightarrow r_1$$

$$r_2 \rightarrow r_2$$

$$r_3 \rightarrow -r_3$$

evidenciando a simetria ferro-antiferro das soluções . Assim o expoente crítico dinâmico, para $\alpha \geq 0$ e $\alpha \leq 0$ é dado por

$$z = 2 + 4 |\alpha|$$

CAPÍTULO V

CONCLUSÃO

Apresentamos abaixo os principais resultados obtidos ao longo deste trabalho e discutimos algumas perspectivas de estudos futuros.

Consideramos o modelo de polímeros auto- e mutuamente excludentes formados por N monômeros numa rede unidimensional de largura dois, analisamos o caso de polímeros dirigidos, e mostramos que ele pode ser descrito por um hamiltoniano de Ising com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Mostramos também que o comprimento de correlação ξ diverge para $T = 0$ como era esperado.

Nos capítulos III e IV, construímos um conjunto de equações (4.1-3) para o modelo dinâmico. Usando uma aproximação em que as probabilidades dos aglomerados de spins são escritas como aproximação de pares, obtemos equações auto-consistentes e no limite $J_2 = 0$, elas são idênticas às equações propostas por Glauber para o modelo com interações entre primeiros vizinhos apenas. Resolvemos numericamente o conjunto de equações (4.1-3) para o estado estacionário, levando em conta que no equilíbrio termodinâmico a magnetização espontânea é nula, e mostramos que a aproximação de pares nos dá resultados satisfatórios comparados com os resultados exatos obtidos por Stephenson⁵(figuras 5a,5b,5c e 5d).

Fazendo uma expansão na variável α (que é a razão das interações entre segundo e primeiros vizinhos) até primeira ordem em torno de $\alpha = 0$, concluímos que na aproximação de pares o expoente crítico dinâmico z depende dessa razão, mostrando que o expoente crítico é não universal.

Para trabalhos futuros podemos analisar a região com competição onde a determinação do estado fundamental não é trivial. Outra possibilidade de estudo é para polímeros em redes com larguras superiores que 2, onde o mapeamento com modelos magnéticos é possível e se espera que a única alteração que ocorra é na dimensionalidade do spins. Podem ser feitas, também, comparações com soluções numéricas das equações de evolução temporal e o cálculo do expoente crítico dinâmico para α finito.

REFERÊNCIAS

- [1] Privman, V. e Svarič, N.M. ;"Direct Models of Polymers, Interfaces and Clusters: Scaling and Finite-Size Properties"(Lecture Notes in Physics,338), Springer, Berlin (1989)
- [2] Glauber,R.J. ; J. Math. Phys. 4 , 294 (1963)
- [3] Stanley,H.E. ;"Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Clarendon Press. Oxford (1971)
- [4] Mamada,H. e Takano,F. ; J. Phys. Soc. Japan 25 , 675 (1968)
- [5] Stephenson,J. ; Can. J. Phys. 48, 1724 (1970)
- [6] Kac,M. ; "Lectures in Theoretical Physics" ,1966 Brandeis Summer Institute, Gordon and Breech, New York (1968)
- [7] Suzuki, M. e Kubo, R. ; J. Phys. Soc. Japan 24 51 (1968)
- [8] Thompson,C.S. ; "Phase Transition and Critical Phenomena",vol.1,ed. C.Domb and M.S. Green, Academic Press, London(1972)
- [9] Silva,J.K.L ; "On The Critical Dynamics of Ising Models", Tese de doutorado, Université de Genève, Genève, Suíça (1987)