

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

**TRANSIÇÕES DE FASE EM MODELOS
DE ISING CINÉTICOS**

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

Márcio Santos

Orientador:

Wagner Figueiredo

UFSC

Florianópolis, fevereiro de 1994

TRANSIÇÕES DE FASE EM MODELOS DE ISING CINÉTICOS

MÁRCIO SANTOS

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. Wagner Figueiredo - Orientador



Prof. Dr. Wagner Figueiredo - Coordenador do Curso

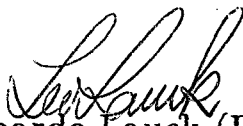
Banca Examinadora



Prof. Dr. Wagner Figueiredo (DF-UFSC) - Presidente



Profa. Dra. Tânia Tomé M. de Castro (IF-USP)



Prof. Dr. Leonardo Lauck (DF-UFSC)

Para Lilian

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Wagner Figueiredo pela orientação.

Aos meus pais e irmãos pelo apoio e incentivo.

Aos colegas do Curso de Pós-Graduação em Física e a todos os amigos que, de uma forma ou de outra me acompanharam ao longo do curso.

À secretária do Curso de Pós-Graduação.

À CAPES pelo auxílio financeiro.

RESUMO

Neste trabalho estudamos dois problemas relativos à transição de fases em modelos magnéticos através da equação Mestra. No primeiro deles, consideramos a evolução, em direção ao estado estacionário, de uma cadeia dupla de spins, através da relaxação inicial do parâmetro de ordem. Mostramos que o expoente crítico dinâmico pode depender dos aspectos microscópicos da Hamiltoniana, não exibindo um caráter universal, para as taxas de transição de Glauber e Kawasaki. No segundo problema determinamos os estados estacionários para o modelo de Ising anisotrópico em duas dimensões, levando-se em conta a correlação entre primeiros vizinhos. Determinamos o diagrama de fases desse modelo que apresenta as fases antiferro, ferro e paramagnética.

ABSTRACT

In this work we study two problems concerning phase transitions in magnetic models through the Master equation. In the first one, we consider the evolution towards the stable state of a double chain of spins, by means of the initial relaxation of the order parameter. We show that the dynamical critical exponent depends on the microscopic details for Glauber and Kawasaki transition rates. In the second problem we find the stable state of the two-dimensional anisotropic Ising model, taking into account the correlation between first neighbours. We obtain the phase diagram for this model which exhibits antiferro, ferro and paramagnetic phases.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO : MODELO DE ISING DINÂMICO	1
CAPÍTULO II - CADEIAS DUPLAS DE SPINS	9
CAPÍTULO III - DINÂMICA DAS CADEIAS DUPLAS DE SPINS	19
CAPÍTULO IV - MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL ANISOTRÓPICO	36
CAPÍTULO V - CONCLUSÃO	45
APÊNDICE I - CADEIAS DUPLAS DE SPIN NO LIMITE DE BAIXAS TEMPERATURAS	47
BIBLIOGRAFIA	52

CAPÍTULO I

Introdução: Modelo de Ising Dinâmico

Para que possamos ter um conhecimento conceitual e matemático da dinâmica de modelos magnéticos é útil começarmos pelo mais simples deles, o modelo de Ising unidimensional. Tal modelo, primeiramente considerado por Glauber [1] e por ele estudado, apresenta solução analítica quando a interação de troca entre spins vizinhos mais próximos se mantém uniforme ao longo da cadeia. De forma mais geral, vamos considerar o modelo de Ising linear e não homogêneo, onde as N variáveis de spin sofrem transições entre os dois valores possíveis ± 1 devido à influência de um agente externo, como por exemplo, um reservatório térmico à temperatura T . Além disto, a probabilidade de transição de um spin individual de seu valor σ_i para $-\sigma_i$ deve depender apenas da interação com seus spins primeiros vizinhos.

A oscilação entre os dois valores, no tempo, faz com que as variáveis de spin possam ser representadas como funções estocásticas do tempo $\sigma_i(t)$ restritas aos valores ± 1 . Tais funções formam um processo de Markov de N variáveis discretas e aleatórias.

Um tratamento adequado do modelo é aquele no qual consideramos o sistema coletivamente e introduzimos 2^N funções de probabilidade $P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N, t)$ para as possíveis configurações $(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)$, e avaliamos sua evolução no tempo através da Equação Mestra, que fornece uma descrição estatística completa de tal sistema:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N, t) = & - \sum_i w_i(\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N, t) \\ & + \sum_i w_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N, t), \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde $w_i(\sigma_i)$ é definido como sendo a probabilidade de transição, por unidade de tempo, de σ_i para $-\sigma_i$. O primeiro termo do lado direito é acompanhado do sinal negativo porque a probabilidade de transição $w_i(\sigma_i)$ tende a destruir a configuração $(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)$ em favor de $(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)$.

Através da observação da equação (1.1) notamos que a probabilidade de transição é essencial para se determinar a evolução dinâmica do sistema. Isto quer dizer que sua expressão deve ser de tal forma que leve à mesma situação de equilíbrio exibida pela teoria convencional do modelo de Ising estático.

Quando o sistema em estudo atinge seu estado de equilíbrio, o lado direito da equação (1.1) se anula e temos a igualdade:

$$\sum_i w_i(\sigma_i) P_{eq}(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N) = \sum_i w_i(-\sigma_i) P_{eq}(\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N).$$

Assumindo a igualdade acima termo a termo, chegamos à chamada Condição de Balanceamento Detalhado (C.B.D.) dada por:

$$\frac{w_i(\sigma_i)}{w_i(-\sigma_i)} = \frac{P_{eq}(-\sigma_i)}{P_{eq}(\sigma_i)}, \quad (1.2)$$

onde $P_{eq}(\pm\sigma_i)$ representa $P_{eq}(\sigma_1, \dots, \pm\sigma_i, \dots, \sigma_N)$, visto que o restante dos spins se mantêm fixos.

Através da equação (1.2) podemos determinar uma probabilidade de transição que leve a uma configuração compatível com aquela do equilíbrio prevista pelas teorias convencionais. Isto pode ser feito com o auxílio da Hamiltoniana H do sistema pois, no equilíbrio,

$$P_{eq}(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N) \propto e^{(-\beta H)},$$

onde $\beta = \frac{1}{K_B T}$, K_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

O modelo de Ising linear não homogêneo, na ausência de campo magnético, pode ser representado conforme a figura abaixo e sua Hamiltoniana escrita como:

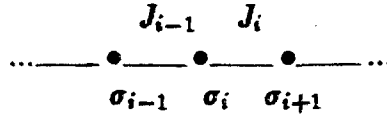


Figura 1-Diagrama esquemático do modelo de Ising unidimensional não-homogêneo.

$$H = - \sum_i J_i \sigma_i \sigma_{i+1}. \quad (1.3)$$

Desta forma, a razão entre as probabilidades $P_{eq}(-\sigma_i)$ e $P_{eq}(\sigma_i)$ dos dois estados possíveis para o i -ésimo spin é:

$$\frac{P_{eq}(-\sigma_i)}{P_{eq}(\sigma_i)} = \frac{e^{-K_i \sigma_i \sigma_{i+1} - K_{i-1} \sigma_i \sigma_{i-1}}}{e^{K_i \sigma_i \sigma_{i+1} + K_{i-1} \sigma_i \sigma_{i-1}}},$$

com $K_i = \frac{J_i}{k_B T}$. Usando o fato de que $e^{\pm k\theta} = \cosh \theta \pm k \sinh \theta$, se $k = \pm 1$, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{P_{eq}(-\sigma_i)}{P_{eq}(\sigma_i)} &= \frac{[\cosh K_i - \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh K_i]}{[\cosh K_i + \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh K_i]} \\ &\times \frac{[\cosh K_{i-1} - \sigma_i \sigma_{i-1} \sinh K_{i-1}]}{[\cosh K_{i-1} + \sigma_i \sigma_{i-1} \sinh K_{i-1}]}. \end{aligned}$$

Abrindo o produto e usando as seguintes identidades das funções hiperbólicas:

$$2 \cosh x \cosh y = [\cosh(x+y) + \cosh(x-y)],$$

$$2 \sinh x \cosh y = [\sinh(x+y) + \sinh(x-y)],$$

$$2 \sinh x \sinh y = [\cosh(x+y) - \cosh(x-y)],$$

podemos escrever que:

$$\frac{P_{eq}(-\sigma_i)}{P_{eq}(\sigma_i)} = \frac{N}{D},$$

onde

$$N = \frac{1}{2}[A \cosh(K_i + K_{i-1}) + B \cosh(K_i - K_{i-1})],$$

$$A = 1 - \sigma_i \sigma_{i-1} \tanh(K_{i-1} + K_i) - \sigma_i \sigma_{i+1} \tanh(K_i + K_{i-1}) + \sigma_{i-1} \sigma_{i+1},$$

$$B = 1 - \sigma_i \sigma_{i-1} \tanh(K_{i-1} - K_i) - \sigma_i \sigma_{i+1} \tanh(K_i - K_{i-1}) - \sigma_{i-1} \sigma_{i+1},$$

e D é escrito de forma semelhante. Se definirmos que

$$\gamma_i^\pm = \tanh(K_i + K_{i-1}) \pm \tanh(K_i - K_{i-1}),$$

$$\delta_i = \tanh K_i \tanh K_{i-1},$$

podemos mostrar que N é dado por:

$$N = (\cosh K_i \cosh K_{i-1}) \{ [1 + \delta_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+1}] [1 - \frac{1}{2} \sigma_i (\gamma_i^- \sigma_{i-1} + \gamma_i^+ \sigma_{i+1})] \}.$$

Analogamente podemos mostrar que:

$$D = (\cosh K_i \cosh K_{i-1}) \{ [1 + \delta_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+1}] [1 + \frac{1}{2} \sigma_i (\gamma_i^- \sigma_{i-1} + \gamma_i^+ \sigma_{i+1})] \},$$

ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{P_{eq}(-\sigma_i)}{P_{eq}(\sigma_i)} &= \frac{\cosh K_i \cosh K_{i-1} [1 + \delta_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+1}]}{\cosh K_i \cosh K_{i-1} [1 + \delta_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+1}]} \\ &\times \frac{[1 - \frac{1}{2} \sigma_i (\gamma_i^- \sigma_{i-1} + \gamma_i^+ \sigma_{i+1})]}{[1 + \frac{1}{2} \sigma_i (\gamma_i^- \sigma_{i-1} + \gamma_i^+ \sigma_{i+1})]}, \end{aligned}$$

de tal forma que podemos identificar a probabilidade de transição $w_i(\sigma_i)$ de duas maneiras distintas:

$$w_i(\sigma_i) = \frac{1}{2} \alpha [1 - \frac{1}{2} \sigma_i (\gamma_i^- \sigma_{i-1} + \gamma_i^+ \sigma_{i+1})], \quad \text{ou} \quad (1.4)$$

$$w_i'(\sigma_i) = [1 + \delta_i \sigma_{i-1} \sigma_{i+1}] w_i(\sigma_i),$$

sendo α a taxa por unidade de tempo na qual uma partícula livre realiza uma transição do seu estado atual para o oposto [1].

Evidentemente as duas taxas de transição devem levar ao mesmo estado de equilíbrio. Porém se escolhermos $w'_i(\sigma_i)$, esse problema torna-se demasiadamente complicado quando comparado com a escolha de $w_i(\sigma_i)$.

Podemos estudar a evolução do sistema no tempo até atingir seu estado de equilíbrio através da magnetização $\langle \sigma_k(t) \rangle$ e da função de correlação $\langle \sigma_k(t) \sigma_j(t) \rangle$ com $k \neq j$, definidas abaixo:

$$\langle \sigma_k(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k P(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_N, t), \quad (1.5)$$

$$\langle \sigma_k(t) \sigma_j(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k \sigma_j P(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N, t), \quad (1.6)$$

Nessas equações, a função $P(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_N, t)$ é aproximada levando-se em conta apenas os dois primeiros momentos da distribuição [1]. A equação para a evolução temporal de $\langle \sigma_k(t) \rangle$ é obtida multiplicando-se a equação Mestra (1.1) por σ_k e somando-se sobre todas as configurações de spin, ou seja:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k P(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_N, t) &= - \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k \sum_i w_i(\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N, t) \\ &\quad + \sum_{\{\sigma\}} \sigma_k \sum_i w_i(-\sigma_i) P(\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N, t). \end{aligned}$$

Os termos com $i \neq k$ se cancelam quando realizamos a soma sobre todas as configurações.

Para $i = k$ mudamos $\sigma_k \rightarrow -\sigma_k$ no segundo termo e obtemos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k(t) \rangle = -2 \langle \sigma_k w_k(\sigma_k(t)) \rangle. \quad (1.7)$$

Seguindo o mesmo procedimento para a função de correlação obtemos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k(t) \sigma_j(t) \rangle = -2 \langle \sigma_k \sigma_j [w_k(\sigma_k(t)) + w_j(\sigma_j(t))] \rangle. \quad (1.8)$$

Substituindo a probabilidade de transição $w_i(\sigma_i)$ nas equações acima, obtemos:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{d}{dt} \langle \sigma_k(t) \rangle = -\langle \sigma_k(t) \rangle + \frac{1}{2} \gamma_k^- \langle \sigma_{k-1}(t) \rangle + \frac{1}{2} \gamma_k^+ \langle \sigma_{k+1}(t) \rangle, \quad (1.9)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha} \frac{d}{dt} \langle \sigma_k(t) \sigma_j(t) \rangle = & -2 \langle \sigma_k(t) \sigma_j(t) \rangle + \frac{1}{2} \gamma_k^- [\langle \sigma_{k-1}(t) \sigma_j(t) \rangle + \langle \sigma_{j-1}(t) \sigma_k(t) \rangle] \\ & + \frac{1}{2} \gamma_k^+ [\langle \sigma_{k+1}(t) \sigma_j(t) \rangle + \langle \sigma_{j+1}(t) \sigma_k(t) \rangle]. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Se tivéssemos utilizado a probabilidade de transição $w'_i(\sigma_i)$, funções de correlação de ordem superior a dois apareceriam nas equações acima. Tais sistemas de equações seriam extremamente complicados e não poderíamos obter uma solução exata em uma dimensão, como resolvido por Glauber. No caso de interações de troca homogêneas, $K_i = K$, este modelo se reduz ao estudado por ele. A solução então, é encontrada à partir da construção de uma função geradora do seguinte tipo:

$$F(\lambda, t) = - \sum_{k=-\infty}^{\infty} \lambda^k \langle \sigma_k(t) \rangle, \quad (1.11)$$

que leva a expressões exatas tanto para o valor médio de um spin quanto para a função de correlação de dois spins. No caso de interações não-homogêneas não existem ainda, funções geradoras capazes de levar a uma solução exata para $\langle \sigma_i(t) \rangle$ e $\langle \sigma_i(t) \sigma_j(t) \rangle$.

Apesar das dificuldades matemáticas encontradas para se resolver completamente os sistemas dinâmicos não-homogêneos, mesmo que unidimensionais, muito se pode conhecer sobre suas características físicas e sobre sua evolução no tempo, estudando grandezas físicas relacionadas à dinâmica, como por exemplo, o expoente crítico dinâmico que mede a taxa com a qual o sistema evolui em direção ao seu estado de equilíbrio próximo a uma transição de fases. Isto pode ser comprovado pela análise da literatura

recente, onde são estudados diferentes modelos e diferentes formas de evolução em direção aos seus respectivos estados de equilíbrio [2], [3], [4].

Neste trabalho estudaremos dois sistemas dinâmicos utilizando métodos diferentes daqueles apresentados originalmente por Glauber. Em primeiro lugar, apresentaremos um estudo dinâmico das cadeias duplas de spins, estudadas por Figueiredo, Salinas e Menezes [5] no estado de equilíbrio, cujos principais resultados serão discutidos no capítulo 2. Nossa atenção estará voltada, primordialmente, para a obtenção de um limite inferior para o expoente crítico dinâmico através da teoria da resposta inicial.

O expoente crítico dinâmico z é definido pela seguinte forma de escala, nas vizinhanças do ponto crítico:

$$\tau_f = \xi^z F(\vec{q}\xi), \quad (1.12)$$

onde τ_f é um tempo característico, chamado de tempo de relaxação, que diverge quando nos aproximamos do ponto crítico do sistema. O parâmetro ξ designa o comprimento de correlação estático e, de acordo com a hipótese de escala dinâmica expressa acima, ele é o comprimento relevante que controla a divergência do tempo de relaxação no ponto crítico. O vetor de onda \vec{q} é o vetor de onda crítico na transição e $F(\vec{q}\xi)$ é uma função analítica de seu argumento.

Um ponto importante é a classificação dos sistemas físicos nas classes de universalidade dinâmica através do expoente z . Em geral, o expoente z além de depender das propriedades estáticas depende também dos aspectos dinâmicos, através das leis de conservação que definem a dinâmica [3],[6].

Conforme veremos, a dinâmica do sistema de cadeias duplas que estudaremos no capítulo 3 apresenta expoente crítico que depende dos detalhes microscópicos de sua Hamiltoniana, ou seja, não apresenta características de universalidade.

Em seguida, no capítulo 4, consideraremos um sistema de spins de Ising numa rede quadrada com interações de troca competitivas nas direções horizontal e vertical. Através da aproximação de pares [7],[8], será possível construir um diagrama de fases desse modelo na situação estacionária.

Finalmente, no capítulo 5, apresentaremos as principais conclusões acerca dos sistemas estudados neste trabalho.

CAPÍTULO II

Cadeias Duplas de Spins

Neste capítulo, apresentamos o estudo do comportamento de uma cadeia dupla de spins no equilíbrio termodinâmico. Consideramos um modelo no qual são levadas em conta interações de intercâmbio entre spins primeiros vizinhos ao longo das cadeias e entre elas. Também consideramos um termo de interação de quatro spins vizinhos mais próximos. A origem desse termo é devido ao acoplamento magneto-elástico, quando permitirmos flutuações dos spins em torno de suas posições de equilíbrio nas cadeias [5]. Na realidade a introdução desse termo não traz dificuldades adicionais no cálculo das propriedades termodinâmicas. Esse estudo no equilíbrio se faz necessário pois, no próximo capítulo estaremos interessados no estudo da dinâmica desse sistema, em particular seguindo as prescrições de Glauber [1] e Kawasaki [2].

Na figura abaixo temos a representação esquemática do modelo e logo a seguir, apresentamos sua Hamiltoniana:

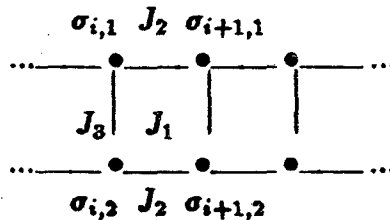


Figura 2-Diagrama esquemático dos acoplamentos entre spins na cadeia dupla.

$$\begin{aligned}
 H = & -J_1 \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2} - J_2 \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1} + \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,2}) \\
 & - \frac{J_3}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_{i,1} \sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2}).
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Podemos determinar as soluções analíticas para as propriedades físicas do sistema, no limite termodinâmico, através da obtenção da função de partição canônica pelo método da matriz de transferência [9].

A função de partição canônica definida por:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_{i,\alpha}\}} e^{-\beta H},$$

transforma-se, com a substituição da Hamiltoniana, equação (2.1), em:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_{i,\alpha}\}} \exp \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} [K_1 \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2} + K_2 (\sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1} + \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,2}) + \frac{K_3}{2} (\sigma_{i,1} \sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2})] \right\}, \quad (2.2)$$

sendo que $K_i = \beta J_i$, $i = 1, 2, 3$. Reescrevemos a expressão (2.2) como

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_{i,\alpha}\}} \prod_{i=0}^{N-1} P_{i,i+1}, \quad (2.3)$$

onde os $P_{i,i+1}$ definidos por:

$$P_{i,i+1} = \exp [K_1 \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2} + K_2 (\sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1} + \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,2}) + \frac{K_3}{2} (\sigma_{i,1} \sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2})], \quad (2.4)$$

são identificados como sendo os elementos da matriz de transferência P devido aos valores assumidos por cada $\sigma_{i,\alpha} = \pm 1$. Usando a ordem de configuração do par de spins $(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})$, para as barras verticais como sendo $(+,+), (+,-), (-,+)$ e $(-,-)$, construímos a matriz P da seguinte forma:

$$P = e^{-K_1} \begin{pmatrix} P_{11} & 1 & 1 & P_{14} \\ 1 & P_{22} & P_{23} & 1 \\ 1 & P_{23} & P_{22} & 1 \\ P_{14} & 1 & 1 & P_{11} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

onde

$$P_{11} = e^{2(K_1+K_2+K_3)},$$

$$P_{14} = e^{2(K_1+K_2)+K_3},$$

$$P_{22} = e^{2(K_1+K_2)-K_3},$$

$$P_{23} = e^{2(K_1-K_2)-K_3}.$$

Efetando o somatório na equação (2.3) sobre todas as configurações de spins resulta que:

$$Z_N = \text{Tr}(P^N),$$

ou seja, a função de partição canônica é igual ao traço da matriz P elevada á N-ésima potência.

Por outro lado, a diagonalização da matriz P ou, no mínimo a sua bloco-diagonalização, permite que a função de partição seja escrita como a soma dos seus autovalores:

$$Z_N = \sum_{k=1}^4 \lambda_k^N, \quad (2.6)$$

onde os λ_k são estes autovalores.

É possível demonstrar que a matriz

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

comuta com a matriz P , e que a matriz

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

diagonaliza a matriz M . Esperamos então que a matriz U possa, pelo menos, bloco-diagonalizar P . Isto de fato é verdadeiro e encontramos que:

$$P' = U^{-1}PU = \begin{pmatrix} P_{11} + P_{14} & 2 & 0 & 0 \\ 2 & P_{22} + P_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P_{22} - P_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{11} - P_{14} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Através da equação característica, $Det[P' - \lambda I] = 0$, determinamos os autovalores λ_k da matriz P . Após a realização dos cálculos chega-se à:

$$\lambda_1 = (e^{K_1+K_3} + e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2 + \{[(e^{K_1+K_3} - e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2]^2 + 4e^{-2K_1}\}^{\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_2 = (e^{K_1+K_3} + e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2 - \{[(e^{K_1+K_3} - e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2]^2 + 4e^{-2K_1}\}^{\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_3 = 2e^{K_1-K_3} \sinh 2K_2,$$

e

$$\lambda_4 = 2e^{K_1+K_3} \sinh 2K_2. \quad (2.10)$$

Como λ_1 é o maior autovalor, a função de partição pode ser escrita como

$$Z_N = \lambda_1^N, \quad (2.11)$$

visto que no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^N = 0 \quad \text{para } k \neq 1.$$

Com a expressão (2.11) para a função de partição podemos calcular todas as propriedades físicas de interesse. Como será visto no próximo capítulo, calcularemos somente a susceptibilidade magnética, pois ela é de interesse direto no cálculo do expoente crítico dinâmico. A susceptibilidade magnética pode ser determinada, na ausência de campo magnético, através do teorema da flutuação-dissipação [8]:

$$\chi_T = \beta \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \left(\sum_i \langle \sigma_i \rangle \right)^2. \quad (2.12)$$

Assim, é necessário determinar primeiramente a função de correlação entre dois spins quaisquer e o valor médio de um único spin. Este último, esperamos que seja nulo devido ao fato do sistema ser essencialmente unidimensional. Antes de entrarmos nestes cálculos especificamente, vamos tentar encontrar uma matriz que diagonalize a matriz de transferência P . Um passo inicial neste processo é a determinação da matriz dos autovetores normalizados da matriz de transferência. A obtenção desta matriz é facilitada pelo conhecimento dos seus autovalores. Depois de algumas manipulações algébricas pode-se mostrar que a matriz abaixo satisfaz essa condição:

$$R = \begin{pmatrix} (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ \alpha_+(1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & \alpha_-(1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

onde

$$\alpha_+ = \left(\frac{\lambda_1}{2} - x\right)e^{-K_1},$$

$$\alpha_- = \left(\frac{\lambda_2}{2} - x\right)e^{-K_1}, \quad (2.14)$$

e

$$x = e^{K_1 + K_3} \cosh 2K_2.$$

Podemos agora escrever que

$$R^{-1}P'R = R^{-1}(U^{-1}PU)R = (UR)^{-1}P(UR) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix},$$

ou seja, a matriz ortonormal T que diagonaliza P completamente é:

$$T = UR = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 1 \\ \alpha_+(1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & \alpha_-(1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 1 & 0 \\ \alpha_+(1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & \alpha_-(1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & -1 & 0 \\ (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Voltamo-nos agora para o cálculo da função de correlação entre os spins $\sigma_{j,\alpha}$ e $\sigma_{k,\beta}$ que é definida por:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} e^{-\beta H}). \quad (2.16)$$

Os índices j e k referem-se às posições dos spins nas cadeias, enquanto α e β especificam cada uma delas. Pode-se colocar a expressão acima na seguinte forma:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma_{i,\alpha}\}} P_{0,1} P_{1,2} \dots P_{j-1,j} \sigma_{j,\alpha} P_{j,j+1} \dots P_{k-1,k} \sigma_{k,\beta} P_{k,k+1} \dots P_{N-1,N}, \quad (2.17)$$

se $k \geq j$.

O par $(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})$ colocado na ordem $(+, +)$, $(+, -)$, $(-, +)$ e $(-, -)$ para a construção da matriz de transferência pode ser representado por meio das matrizes diagonais abaixo:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

e

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Quando efetuamos o somatório sobre todas as possíveis configurações de spin na equação (2.17) podemos substituir os valores de $\sigma_{i,\alpha}$ e $\sigma_{k,\beta}$ por suas respectivas representações matriciais. Neste caso escrevemos:

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(P^j \sigma_\alpha P^{k-j} \sigma_\beta P^{N-k}) \\
 &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\sigma_\alpha P^{k-j} \sigma_\beta P^{N-k+j}) \\
 &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(T^{-1} \sigma_\alpha P^{k-j} \sigma_\beta P^{N-k+j} T),
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

pois $TT^{-1} = I$. Continuando com este processo, chegamos a termos do tipo:

$$\begin{aligned}
 [T^{-1} P^k T]_{rs} &= [P^k]_{rs} = \lambda_r^k \delta_{rs}, \\
 [T^{-1} \sigma_\alpha T]_{lm} &= [\sigma'_\alpha]_{lm},
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

que substituídos na expressão (2.20) levam a:

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \sum_{r,s} \delta_{rs} [\sigma'_\alpha P^{(k-j)} \sigma'_\beta P^{(N-k+j)}]_{rs} \\
 &= \frac{1}{Z_N} \sum_{r,s} \delta_{rs} \left[\sum_{i,t,u} (\sigma'_\alpha)_{ri} \lambda_i^{(k-j)} \delta_{it} (\sigma'_\beta)_{tu} \lambda_u^{[N-(k-j)]} \delta_{us} \right] \\
 &= \frac{1}{Z_N} \sum_{r,i} [(\sigma'_\alpha)_{ri} \lambda_i^{(k-j)} (\sigma'_\beta)_{ir} \lambda_r^{[N-(k-j)]}].
 \end{aligned}$$

como $Z_N = \lambda_1^N$ e $\text{Lim}_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N = \delta_{i1}$ temos então que:

$$\frac{\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle}{\lambda_1^{k-j}} = \sum_{i=1}^4 [(\sigma'_\alpha)_{1i} (\sigma'_\beta)_{i1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^{k-j}]. \tag{2.22}$$

As matrizes σ'_α ($\alpha = 1, 2$) são obtidas diretamente da segunda das expressões (2.21):

$$\sigma'_\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm\alpha_+(1+\alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1+\alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & \pm\alpha_-(1+\alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & (1+\alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} \\ \pm\alpha_+(1+\alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & \pm\alpha_-(1+\alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ (1+\alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1+\alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

onde o sinal superior se refere a $\alpha = 1$ e o inferior a $\alpha = 2$.

Quando calculamos o valor médio de um único spin, seguimos a sequência acima. A partir de sua definição:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_{j,\alpha} e^{-\beta H},$$

chegamos à seguinte expressão:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \rangle = \sum_k (\sigma'_\alpha)_{kk} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1} \right)^N. \quad (2.24)$$

Entretanto, todos os valores da diagonal principal das matrizes σ'_α são nulos, implicando num valor também nulo para a expressão do valor médio de um spin, como era de se esperar.

A partir das equações (2.12) e (2.22) podemos obter a susceptibilidade magnética por spin. No limite termodinâmico ela é dada pela seguinte expressão:

$$\chi_T = 2\beta(1+\alpha_+^2)^{-1} \frac{1 + \frac{\lambda_4}{\lambda_1}}{1 - \frac{\lambda_4}{\lambda_1}}. \quad (2.25)$$

A mesma técnica utilizada acima permite ainda, encontrar funções de correlação entre três, quatro ou mais spins, se assim for desejado. Como veremos no

próximo capítulo, aparecerão funções de correlação de ordem quatro e seis, o que nos obriga a encontrá-las. Entre quatro spins definimos a função de correlação abaixo:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}[\sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho}] e^{-\beta H},$$

onde α, γ, μ e ρ podem assumir os valores 1 ou 2. Utilizando a matriz de transferência P e considerando $m \geq l \geq k \geq j$, podemos reescrever a expressão anterior na forma,

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}[P^j \sigma_\alpha P^{k-j} \sigma_\gamma P^{l-k} \sigma_\mu P^{m-l} \sigma_\rho P^{N-m}], \quad (2.26)$$

onde as matrizes $\sigma_\alpha, \sigma_\gamma, \sigma_\mu$ e σ_ρ são dadas pelas matrizes (2.18) e (2.19). Usando a identidade de $TT^{-1} = I$ na equação anterior, termos do tipo (2.21) aparecem. Com a sua substituição encontramos que:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \sum_{r,s} \delta_{rs} \left[\sum_{o,p,q,t,u,v,x} (\sigma'_\alpha)_{ro} (\lambda_o^{k-j} \delta_{op}) (\sigma'_\gamma)_{pq} (\lambda_q^{l-k} \delta_{qt}) \right. \\ &\quad \left. \times (\sigma'_\mu)_{tu} (\lambda_u^{m-l} \delta_{uv}) (\sigma'_\rho)_{vx} (\lambda_x^{N-m+j} \delta_{xs}) \right]. \end{aligned}$$

Portanto, no limite termodinâmico temos:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \rangle = \sum_{p,t,u=1}^4 (\sigma'_\alpha)_{1p} (\sigma'_\gamma)_{pt} (\sigma'_\mu)_{tu} (\sigma'_\rho)_{u1} \left(\frac{\lambda_p}{\lambda_1} \right)^{k-j} \left(\frac{\lambda_t}{\lambda_1} \right)^{l-k} \left(\frac{\lambda_u}{\lambda_1} \right)^{m-l}. \quad (2.27)$$

A expressão para a função de correlação entre seis spins é obtida de forma idêntica à partir de sua definição:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \sigma_{n,\eta} \sigma_{o,\nu} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} [\sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \sigma_{n,\eta} \sigma_{o,\nu}] e^{-\beta H}.$$

Após algumas manipulações algébricas obtemos:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \sigma_{n,\eta} \sigma_{o,\nu} \rangle = \sum_{p,t,u,v,\alpha=1}^4 (\sigma'_{\alpha})_{1p} (\sigma'_{\gamma})_{pt} (\sigma'_{\mu})_{tu} (\sigma'_{\rho})_{uv} (\sigma'_{\eta})_{vx} (\sigma'_{\nu})_{x1} \quad (2.28)$$

$$\times \left(\frac{\lambda_p}{\lambda_1} \right)^{k-j} \left(\frac{\lambda_t}{\lambda_1} \right)^{l-k} \left(\frac{\lambda_u}{\lambda_1} \right)^{m-l} \left(\frac{\lambda_v}{\lambda_1} \right)^{n-m} \left(\frac{\lambda_{\alpha}}{\lambda_1} \right)^{o-n},$$

com $o \geq n \geq m \geq l \geq k \geq j$.

Então realizando-se os somatórios nas expressões (2.22), (2.27) e (2.28), e substituindo-se os elementos de matriz correspondentes σ'_{α} , obtemos as funções de correlação entre dois, quatro e seis spins, de forma exata no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Isto é feito no apêndice I, no limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$).

CAPÍTULO III

Dinâmica das Cadeias Duplas de Spin

No capítulo anterior, apresentamos o modelo das cadeias duplas de spin juntamente com o cálculo de sua função de partição e das funções de correlação no equilíbrio. No presente capítulo, estaremos interessados nos aspectos dinâmicos deste sistema, ou seja, à partir de uma perturbação inicial, causada por um agente externo, queremos determinar a evolução temporal do sistema desde o estado de não equilíbrio para aquele de equilíbrio. Como no modelo proposto por Glauber [1], assumimos as variáveis de spin como sendo funções estocásticas do tempo e acompanhamos esta evolução através da equação Mestra:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = & - \sum_i w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) \\ & + \sum_i w_i(-\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2}) P(\sigma_{1,1}, \dots, -\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t), \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde $P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t)$ é a probabilidade de se encontrar o sistema no estado $(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2})$ no instante t , e $w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})$ é a probabilidade de transição por unidade de tempo do par de spins da i -ésima barra de seus valores $(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})$ para $(-\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2})$. Tal escolha nos parece conveniente pois, de forma natural, conduz a um modelo dinâmico essencialmente unidimensional. É importante observar que trabalhamos com uma dinâmica diferente daquela proposta por Glauber, ou seja, ao invés de virarmos um único spin, viramos um par de spins. Este tipo de dinâmica já foi considerada por outros autores no estudo de sistemas unidimensionais [4].

A obtenção de uma forma matemática consistente para a probabilidade

de transição é possível graças à Condição de Balanceamento Detalhado (C.B.D.), que em nosso caso é dada por:

$$\frac{w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})}{w_i(-\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2})} = \frac{P_{eq}(-\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2})}{P_{eq}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})}, \quad (3.2)$$

sendo

$$P_{eq} \propto e^{-\beta H}, \quad (3.3)$$

a distribuição de probabilidades no estado de equilíbrio. Com a Hamiltoniana do sistema, conforme visto no capítulo anterior, dada por:

$$\begin{aligned} H = & -J_1 \sum_{i=1}^N \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2} - J_2 \sum_{i=1}^N (\sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1} + \sigma_{i,2} \sigma_{i+1,2}) \\ & - \frac{J_3}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_{i,1} \sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2}), \end{aligned} \quad (3.4)$$

a razão na equação (3.2) torna-se:

$$\frac{w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2})}{w_i(-\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2})} = \frac{e^{-K_2 \sigma_{i,1} (\sigma_{i+1,1} + \sigma_{i-1,1})} e^{-K_2 \sigma_{i,2} (\sigma_{i+1,2} + \sigma_{i-1,2})}}{e^{+K_2 \sigma_{i,1} (\sigma_{i+1,1} + \sigma_{i-1,1})} e^{+K_2 \sigma_{i,2} (\sigma_{i+1,2} + \sigma_{i-1,2})}},$$

com $K_2 = \frac{J_2}{K_B T}$. Assim a probabilidade de transição pode ser escolhida da seguinte forma:

$$\begin{aligned} w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) = & \frac{\alpha}{2} \{1 - \sigma_{i,1} \tanh [K_2 (\sigma_{i+1,1} + \sigma_{i-1,1})]\} \\ & \times \{1 - \sigma_{i,2} \tanh [K_2 (\sigma_{i+1,2} + \sigma_{i-1,2})]\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

De modo geral podemos mostrar que:

$$\tanh [K(\sigma_i + \sigma_j)] = \frac{1}{2} (\sigma_i + \sigma_j) \tanh 2K. \quad (3.6)$$

Levando-se esta última expressão na equação (3.5), ele toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) = & \frac{\alpha}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \gamma_2 \sigma_{i,1} (\sigma_{i+1,1} + \sigma_{i-1,1}) - \frac{1}{2} \gamma_2 \sigma_{i,2} (\sigma_{i+1,2} + \sigma_{i-1,2}) \right. \\
 & \left. + \frac{1}{4} \gamma_2^2 \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} (\sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i-1,2} + \sigma_{i-1,1} \sigma_{i+1,2} + \sigma_{i-1,1} \sigma_{i-1,2}) \right],
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

com $\gamma_2 = \tanh 2K_2$.

A definição da magnetização por spin sendo

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_{i,\alpha}(t) \rangle &= \sum_{\sigma} \sigma_{i,\alpha} P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) \\
 &= -2 \langle \sigma_{i,\alpha} w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) \rangle
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

com $\alpha = 1, 2$, não permite determinarmos exatamente a sua evolução temporal, visto que aparecem funções de correlação de ordem três. Mesmo definindo-se uma magnetização por barra de spin como

$$\langle (\sigma_{i,1}(t) + \sigma_{i,2}(t)) \rangle = \sum_{\sigma} (\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2}) P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t), \tag{3.9}$$

a dificuldade persiste. Então, para que possamos obter algum conhecimento sobre como o sistema evolui para o estado de equilíbrio é necessário outro tipo de abordagem matemática. Para tanto, comecemos por definir o tempo de relaxação τ como sendo o tempo que o sistema leva para atingir o estado de equilíbrio, partindo de uma situação de não equilíbrio. A hipótese de escala [3], [6], [9], relaciona o tempo de relaxação, assim definido, com o comprimento de correlação (ξ) do sistema pela seguinte forma de escala:

$$\tau_{\vec{q}} = \xi^z F(\vec{q}\xi), \tag{3.10}$$

onde \vec{q} é um vetor de onda crítico apropriado, z é o expoente crítico dinâmico e $F(\vec{q}\xi)$ uma função analítica do seu argumento. Através desta relação e da resposta inicial do parâmetro

de ordem do sistema que veremos a seguir [3],[6], é possível encontrar um limite inferior para o expoente crítico dinâmico em baixas temperaturas, para sistemas essencialmente unidimensionais.

Resposta Inicial do Parâmetro de Ordem

A teoria abaixo descrita segue a sequência daquela apresentada por Leal da Silva [3] e desenvolvida por Halperin [10] para estabelecer um limite inferior rigoroso para o expoente crítico dinâmico do sistema.

Inicialmente definimos uma função $\Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t)$ dada por:

$$P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = P_{eq}(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}) \times \Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t), \quad (3.11)$$

que é substituída na equação Mestra (3.1). Usando-se a C.B.D. (3.2) vem que:

$$\frac{d}{dt} \Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = -D\Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t), \quad (3.12)$$

onde o operador D é definido como sendo:

$$DF(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = \sum_{i=1}^N w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) \times [F(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) - F(\sigma_{1,1}, \dots, -\sigma_{i,1}, -\sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t)]. \quad (3.13)$$

Sabendo-se que a solução formal da equação (3.12) é:

$$\Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = e^{-Dt} \Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, 0),$$

a expressão (3.9) da magnetização por barra torna-se:

$$\langle (\sigma_{i,1}(t) + \sigma_{i,2}(t)) \rangle = \langle (\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2}) e^{-Dt} \Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}, \dots, \sigma_{N,2}, 0) \rangle_{eq}, \quad (3.14)$$

sendo que no lado direito dessa expressão a média é tomada no estado de equilíbrio.

Consideremos um sistema ferromagnético sob a influência de um campo magnético fraco e uniforme $B = \frac{b}{k_B T}$ em $t < 0$ e $T > T_c$. Em $t = 0$, desligamos o campo e a magnetização evolui para o seu valor de equilíbrio. Pode-se mostrar então que o valor inicial de P é dado por:

$$P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, 0) = P_{eq}(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{N,2}) [1 + B \sum_i (\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2}) + O(B^2)].$$

Por inspeção direta da equação (3.12) encontra-se que:

$$\Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, 0) = [1 + B \sum_i (\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2})].$$

e que a equação (3.14) torna-se:

$$\langle (\sigma_{i,1}(t) + \sigma_{i,2}(t)) \rangle = B \sum_j \langle (\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2})(\sigma_{j,1}(t) + \sigma_{j,2}(t)) \rangle_{eq}, \quad (3.15)$$

onde

$$(\sigma_{j,1}(t) + \sigma_{j,2}(t)) = e^{-Dt} (\sigma_{j,1} + \sigma_{j,2}). \quad (3.16)$$

Usando-se o fato de D ser um operador real juntamente com a C.B.D., equação (3.2), é possível mostrar que:

$$\begin{aligned} \langle f^* Dg \rangle_{eq} &= \langle g Df^* \rangle_{eq} \quad \text{e que} \\ \langle g^* Dg \rangle_{eq} &\geq 0, \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde g e f são funções quaisquer de $\{\sigma_{i,\alpha}\}$ e g^* e f^* as suas respectivas conjugadas complexas [11], [12].

Seja $C_g(t)$ uma função de auto-correlação dependente do tempo no equilíbrio térmico:

$$C_g(t) = \langle g^*(0)g(t) \rangle_{eq}. \quad (3.18)$$

Esta função possui uma representação espectral da forma:

$$C_g(t) = \int_0^\infty \varphi_g(\nu) e^{-\nu t} d\nu, \quad (3.19)$$

com $\varphi_g(\nu) \geq 0$ para todos os valores de ν . Se consideramos o valor médio de g no equilíbrio como sendo igual a zero, podemos definir o tempo de relaxação τ_g e a taxa de relaxação inicial ν_g através de:

$$\begin{aligned} \tau_g &= C_g(0)^{-1} \int_0^\infty C_g(t) dt, \\ &= C_g(0)^{-1} \int_0^\infty \varphi_g(\nu) \nu^{-1} d\nu, \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \nu_g &= -C_g(0)^{-1} \frac{d}{dt} C_g(t) \Big|_{t=0}, \\ &= -C_g(0)^{-1} \int_0^\infty \varphi_g(\nu) \nu d\nu. \end{aligned}$$

Pela aplicação da desigualdade de Schwartz às equações acima, derivamos a seguinte relação:

$$\tau_g \geq \nu_g^{-1}. \quad (3.21)$$

Se tomamos g como sendo a transformada de Fourier da magnetização por barra de spin, ou seja,

$$g = \sigma_g = N^{\frac{-1}{2}} \sum_j (\sigma_{j,1} + \sigma_{j,2}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j}, \quad (3.22)$$

então, $C_{\sigma_{\vec{q}}}(t)$ em $t = 0$ estará relacionada à susceptibilidade magnética através do teorema da flutuação-dissipação [3],[9] por:

$$C_{\sigma_{\vec{q}}}(0) = K_B T \chi_{\vec{q}}, \quad (3.23)$$

onde

$$\chi_{\vec{q}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{j,k} \langle (\sigma_{j,1} + \sigma_{j,2})(\sigma_{k,1} + \sigma_{k,2}) \rangle e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_k - \vec{r}_j)},$$

é a susceptibilidade magnética correspondente ao vetor de onda \vec{q} . Se $\vec{q} = 0$, essa expressão é a mesma que calculamos no capítulo anterior.

Tomando a derivada da equação (3.18) em $t = 0$ temos que:

$$\frac{d}{dt} C_{\sigma_{\vec{q}}}(t) |_{t=0} = \frac{d}{dt} \langle \sigma_{\vec{q}}^*(0) \sigma_{\vec{q}}(t) \rangle_{eq} |_{t=0}. \quad (3.24)$$

Mas, de acordo com as equações (3.16) e (3.22) notamos que:

$$\sigma_{\vec{q}}(t) = e^{-Dt} \sigma_{\vec{q}}, \quad (3.25)$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt} C_{\sigma_{\vec{q}}}(t) |_{t=0} = -\langle \sigma_{-\vec{q}} D \sigma_{\vec{q}} \rangle_{eq}. \quad (3.26)$$

Substituindo-se nesta última expressão a equação (3.22) encontra-se que:

$$\frac{d}{dt} C_{\sigma_{\vec{q}}}(t) |_{t=0} = -\frac{1}{N} \sum_{j,k} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_k)} \langle (\sigma_{k,1} + \sigma_{k,2}) D (\sigma_{j,1} + \sigma_{j,2}) \rangle_{eq}. \quad (3.27)$$

Entretanto, é possível mostrar pela definição do operador D que:

$$D(\sigma_{j,1} + \sigma_{j,2}) = 2(\sigma_{j,1} + \sigma_{j,2}) w_j(\sigma_{j,1}, \sigma_{j,2}),$$

e com a ajuda da C.B.D. (3.2), a expressão (3.27) torna-se:

$$\frac{d}{dt}C_{\sigma_q}(t) |_{t=0} = -\frac{4}{N} \sum_{j,k} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_k)} \delta_{kj} \langle (1 + \sigma_{j,1} \sigma_{j,2}) w_j(\sigma_{j,1}, \sigma_{j,2}) \rangle_{eq},$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}C_{\sigma_q}(t) |_{t=0} = -\frac{4}{N} \sum_j \langle (1 + \sigma_{j,1} \sigma_{j,2}) w_j(\sigma_{j,1}, \sigma_{j,2}) \rangle_{eq}. \quad (3.28)$$

De posse desta equação e das equações (3.20) e (3.23), podemos reescrever a desigualdade (3.21) da seguinte forma:

$$\tau_q \geq \frac{K_B T \chi_q}{\frac{4}{N} \sum_{j=1}^N \langle (1 + \sigma_{j,1} \sigma_{j,2}) w_j(\sigma_{j,1}, \sigma_{j,2}) \rangle_{eq}}. \quad (3.29)$$

Assim, é possível de se determinar um limite inferior para o expoente crítico dinâmico, definido anteriormente através da equação (3.10), calculando-se as expressões no lado direito da desigualdade acima na situação de equilíbrio termodinâmico.

De acordo com a expressão (3.7) da probabilidade de transição, o valor

médio no denominador da desigualdade (3.29) pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\langle (1 + \sigma_{i,1}\sigma_{i,2})w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) \rangle_{eq} = & \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 + \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i,2} \rangle - \frac{1}{2}\gamma_2 \left[\langle \sigma_{i,1}\sigma_{i-1,1} \rangle \right. \right. \\
& + \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i+1,1} \rangle + \langle \sigma_{i,2}\sigma_{i-1,2} \rangle + \langle \sigma_{i,2}\sigma_{i+1,2} \rangle \\
& + \langle \sigma_{i,2}\sigma_{i-1,1} \rangle + \langle \sigma_{i,2}\sigma_{i+1,1} \rangle + \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i-1,2} \rangle \\
& + \left. \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i+1,2} \rangle \right] + \frac{1}{4}\gamma_2^2 \left[\langle \sigma_{i+1,1}\sigma_{i+1,2} \rangle \right. \\
& + \langle \sigma_{i+1,1}\sigma_{i-1,2} \rangle + \langle \sigma_{i-1,1}\sigma_{i+1,2} \rangle + \langle \sigma_{i-1,1}\sigma_{i-1,2} \rangle \\
& + \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i,2}\sigma_{i+1,1}\sigma_{i+1,2} \rangle + \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i,2}\sigma_{i+1,1}\sigma_{i-1,2} \rangle \\
& + \left. \left. \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i,2}\sigma_{i-1,1}\sigma_{i+1,2} \rangle + \langle \sigma_{i,1}\sigma_{i,2}\sigma_{i-1,1}\sigma_{i-1,2} \rangle \right] \right\}_{eq}.
\end{aligned} \tag{3.30}$$

O vetor de onda crítico para sistemas n-dimensionalis ferromagnéticos corresponde ao caso uniforme, ou seja, $\vec{q} = 0$. A susceptibilidade magnética $\chi_{\vec{q}=0}$, como sabemos, diverge no limite $T \rightarrow 0$. Portanto, encontramos o valor médio na equação acima usando as funções de correlação calculadas no apêndice I no limite $T \rightarrow 0$ e para $J_1, J_2, J_3 \geq 0$. Após algumas manipulações algébricas é possível mostrar que:

$$\langle (1 + \sigma_{i,1}\sigma_{i,2})w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i,2}) \rangle_{eq} \approx 2\alpha e^{-4K_2}. \tag{3.31}$$

Substituindo-se na expressão (3.29) as equações (3.10) e (3.31), para $\vec{q} = 0$, obtém-se:

$$\xi^2 \geq \frac{K_B T \chi_{\vec{q}=0}}{C e^{-4K_2}},$$

onde C é uma constante. Se as equações para o comprimento de correlação e para a susceptibilidade magnética, dadas no apêndice I para o caso ferromagnético no limite de

$T \rightarrow 0$, são substituídas na expressão acima, encontramos que

$$z \geq 2$$

é o limite inferior para o expoente crítico dinâmico associado à uma probabilidade de transição que leva em conta a inversão simultânea de dois spins de uma mesma barra. Esse resultado é o mesmo que o obtido para o modelo de Ising unidimensional com interações entre primeiros vizinhos. Notamos que os detalhes microscópicos da Hamiltoniana, como por exemplo, a interação entre quatro spins, não modifica o valor esperado de z . Se a condição $2J_1 + 2J_2 + J_3 \geq 0$ for satisfeita, mesmo que consideremos algumas interações como sendo antiferromagnéticas, obtemos a mesma condição determinada acima, ou seja, $z \geq 2$.

Para melhor compreendermos a dinâmica do sistema em estudo, seria interessante determinarmos o expoente crítico dinâmico associado a outras formas de taxas de transição. Uma destas poderia ser, por exemplo, a inversão simultânea de dois spins vizinhos pertencentes à mesma linha. Como no caso anterior, a evolução do sistema para o estado de equilíbrio se dá através da equação Mestra:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = & - \sum_i w_i(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}) \\ & \times P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2}, t) \\ & + \sum_i w_i(-\sigma_{i,\beta}, -\sigma_{i+1,\beta}) \\ & \times P(\sigma_{1,1}, \dots, -\sigma_{i,\beta}, -\sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2}, t), \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde $\beta = 1, 2$ é a linha onde se encontram os spins, e $w_i(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})$ é a probabilidade de transição, por unidade de tempo, do estado $(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2})$ para o estado $(\sigma_{1,1}, \dots, -\sigma_{i,\beta}, -\sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2})$.

Com a ajuda da C.B.D. dada por:

$$\frac{w_i(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})}{w_i(-\sigma_{i,\beta}, -\sigma_{i+1,\beta})} = \frac{P_{eq}(-\sigma_{i,\beta}, -\sigma_{i+1,\beta})}{P_{eq}(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})}, \quad (3.33)$$

e utilizando a distribuição de probabilidades no equilíbrio, a seguinte expressão para a probabilidade de transição é obtida:

$$\begin{aligned} w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) &= \frac{1}{2}\alpha \left[1 - \frac{1}{2}\gamma_1(\sigma_{i-1,1}\sigma_{i-1,2}\sigma_{i,1}\sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1}\sigma_{i+1,2}\sigma_{i+2,1}\sigma_{i+2,2}) \right] \times \\ &\quad \left[1 - \frac{1}{2}\gamma_2(\sigma_{i-1,1}\sigma_{i,1} + \sigma_{i+1,1}\sigma_{i+2,1}) \right] \times \\ &\quad \left[1 - \frac{1}{2}\gamma_3(\sigma_{i,1}\sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1}\sigma_{i+1,2}) \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

sendo que os spins foram escolhidos na linha $\beta = 1$, e $\gamma_i = \tanh 2K_i$ com $i = 1, 2, 3$.

A substituição da função $\Phi(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t)$, definida anteriormente, na equação Mestra (3.32) tem como resultado a equação (3.11) se redefinimos o operador D como sendo:

$$\begin{aligned} DF(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t) &= \sum_i w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) \\ &\quad \times [F(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t) \\ &\quad - F(\sigma_{1,1}, \dots, -\sigma_{i,1}, -\sigma_{i+1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t)]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Com esta definição é possível chegar ao mesmo resultado dado pela equação (3.16). Além disso, o fato de D ser um operador real faz com que as propriedades (3.17) permaneçam válidas. Desta forma, as relações (3.18-3.21) podem ser usadas. Se utilizamos a definição (3.22), as equações (3.23 e (3.27) continuam válidas. Porém, a aplicação do operador D nesta última resulta em:

$$D(\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2}) = 2\sigma_{i,1} w_i(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}),$$

de tal forma que uma desigualdade análoga à (3.29) é obtida:

$$\tau_q \geq \frac{K_B T \chi_q}{\frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \langle (1 + \sigma_{j,1} \sigma_{j,2}) w_j (\sigma_{j,1}, \sigma_{j+1,1}) \rangle_{eq}} \quad (3.36)$$

O valor médio no denominador da equação anterior é calculado para interações ferromagnéticas no limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$), com o auxílio das aproximações encontradas no apêndice I para as funções de correlação. Após algumas manipulações algébricas é possível mostrar que:

$$\langle (1 + \sigma_{j,1} \sigma_{j,2}) w_j (\sigma_{j,1}, \sigma_{j+1,1}) \rangle_{eq} \approx 16\alpha e^{-4K_1 - 4K_2 - 4K_3} \quad (3.37)$$

No caso ferromagnético o vetor de onda se anula e as expressões da susceptibilidade magnética e do comprimento de correlação, dadas no apêndice I, podem ser substituídas na equação (3.36). Se utilizarmos a relação de escala para τ podemos determinar um limite inferior para o expoente crítico dinâmico z , para a taxa de transição considerada. Levando-se em conta estas considerações podemos mostrar que:

$$z \geq 2 + \frac{K_1}{K_2} + \frac{K_3}{K_2}$$

Surpreendentemente, observamos que este limite difere daquele obtido anteriormente. Embora não tenhamos calculado o valor exato desse expoente, notamos que ele parece mostrar uma dependência nos aspectos microscópicos. Apenas se K_1 e K_3 forem nulos (sistema unidimensional) é que obtemos $z \geq 2$. Essa aparente quebra na universalidade do expoente crítico dinâmico também já foi verificada para o modelo de Ising em uma dimensão quando as interações de intercâmbio são não homogêneas [3]. Uma possível justificativa para o caráter não universal de z , para sistemas essencialmente unidimensionais, deve estar relacionada com o fato desses sistemas apresentarem uma temperatura crítica nula.

Quando nos aproximamos do limite $T \rightarrow 0$, as taxas de transição devem se anular muito mais rapidamente que o inverso do comprimento de correlação.

Um outro tipo de dinâmica que não deve ser excluída de nossos estudos é aquela proposta originalmente por Glauber, ou seja, a inversão de um spin por vez. Escolhemos este spin como sendo $\sigma_{i,1}$ e acompanhamos a evolução do sistema para o estado de equilíbrio quando o spin sofre uma transição do seu estado atual para o oposto. Neste caso, a equação Mestra é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = & - \sum_i w_i(\sigma_{i,1})P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t) \\ & + \sum_i w_i(-\sigma_{i,1})P(\sigma_{1,1}, \dots, -\sigma_{i,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t), \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde $w_i(\sigma_{i,1})$ é a taxa de transição, por unidade de tempo, na qual o i -ésimo spin da linha 1 tem seu valor $\sigma_{i,1}$ alterado para $-\sigma_{i,1}$. A obtenção de uma expressão para $w_i(\sigma_{i,1})$ segue da C.B.D. dada por:

$$\frac{w_i(\sigma_{i,1})}{w_i(-\sigma_{i,1})} = \frac{P_{eq}(-\sigma_{i,1})}{P_{eq}(\sigma_{i,1})}, \quad (3.39)$$

e das equações (3.3) e (3.4). Da mesma forma que nos casos anteriores, podemos mostrar que:

$$\begin{aligned} w_i(\sigma_{i,1}) = & \frac{1}{2}\alpha \left[1 - \frac{1}{2}\gamma_1 (\sigma_{i,1}\sigma_{i,2}\sigma_{i+1,1}\sigma_{i+1,2} + \sigma_{i-1,1}\sigma_{i-1,2}\sigma_{i,1}\sigma_{i,2}) \right] \times \\ & \left[1 - \frac{1}{2}\gamma_2 (\sigma_{i-1,1}\sigma_{i,1} + \sigma_{i,1}\sigma_{i+1,1}) \right] \times \\ & \left[1 - \gamma_3 \sigma_{i,1}\sigma_{i,2} \right], \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde $\gamma_i = \tanh 2K_i$; $i = 1, 2$ e $\gamma_3 = \tanh K_3$.

A partir deste ponto procedemos de forma semelhante aos casos anteriores e determinamos uma desigualdade, análoga às desigualdades (3.29) e (3.36), da seguinte forma:

$$\tau_{\vec{q}} \geq \frac{K_B T \chi_{\vec{q}}}{\frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \langle (1 + \sigma_{j,1} \sigma_{j,2}) w_j(\sigma_{j,1}) \rangle_{eq}} \quad (3.41)$$

No limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$) e considerando interações ferromagnéticas, o vetor de onda \vec{q} se anula. Com a utilização das expressões do apêndice I, o limite inferior do expoente crítico dinâmico é obtido e dado por:

$$z \geq 2 + \frac{K_1}{K_2} + \frac{K_3}{2K_2}$$

Notamos também neste caso a não universalidade do expoente crítico dinâmico z .

Os casos até aqui estudados levam em consideração somente a inversão do sinal dos spins, de tal forma que as magnetizações global e local não se conservam. Estes não são, porém, os únicos casos de dinâmica encontrados na literatura. Existe um tipo, proposto por Kawasaki [2], onde a perturbação externa induz a uma troca de sinais entre dois spins vizinhos mais próximos quando o produto dessas variáveis de spin for igual a -1. Neste caso, não há conservação da magnetização local, porém a magnetização total do sistema é conservada. Semelhantemente aos casos anteriores, é através da equação Mestre que podemos acompanhar a evolução do sistema desde o estado inicial de não equilíbrio em direção ao estado estacionário. No caso de trocarmos dois spins vizinhos mais próximos de uma mesma linha, a equação Mestre para o modelo de duas linhas de spins interagentes

que estamos considerando, toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = & - \sum_i w_{i \leftrightarrow i+1, \beta}(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}) \\
& \times P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta}, \dots, \sigma_{N,2}, t) \\
& + \sum_i w_{i \leftrightarrow i+1, \beta}(\sigma_{i+1,\beta}, \sigma_{i,\beta}) \\
& \times P(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i+1,\beta}, \sigma_{i,\beta}, \dots, \sigma_{N,2}, t),
\end{aligned} \tag{3.42}$$

sendo que $w_{i \leftrightarrow i+1, \beta}(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})$ é a probabilidade de transição, por unidade de tempo, para a troca de sinais entre os spins do par $(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})$ com $\beta = 1, 2$. Para uma equação deste tipo, a C.B.D. toma a seguinte forma:

$$\frac{w_{i \leftrightarrow i+1, \beta}(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})}{w_{i \leftrightarrow i+1, \beta}(\sigma_{i+1,\beta}, \sigma_{i,\beta})} = \frac{P_{eq}(\sigma_{i+1,\beta}, \sigma_{i,\beta})}{P_{eq}(\sigma_{i,\beta}, \sigma_{i+1,\beta})}. \tag{3.43}$$

Com o auxílio das equações (3.3) e (3.4) é possível identificar a probabilidade de transição associada a este tipo de dinâmica. Após alguns cálculos encontramos que:

$$\begin{aligned}
w_{i \leftrightarrow i+1, 1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) = & \frac{1}{2} \alpha [1 - \sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1}] \times \\
& [1 - \frac{1}{2} \gamma_1 (\sigma_{i-1,1} \sigma_{i-1,2} \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2} \sigma_{i+2,1} \sigma_{i+2,2})] \times \\
& [1 - \frac{1}{2} \gamma_2 (\sigma_{i-1,1} \sigma_{i,1} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+2,1})] \times \\
& [1 - \frac{1}{2} \gamma_3 (\sigma_{i,1} \sigma_{i,2} + \sigma_{i+1,1} \sigma_{i+1,2})],
\end{aligned} \tag{3.44}$$

onde $\gamma_i = \tanh 2K_i$; $i = 1, 2, 3$ e escolhemos $\beta = 1$.

Quando a função $\Phi(\sigma_{i,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t)$, definida anteriormente, é introduzida na equação Mestra (3.42), uma expressão similar à equação (3.12) é obtida se

o operador D é definido por:

$$DF(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t) = \sum_i w_{i \leftrightarrow i+1,1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) \times [F(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t) - F(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{i+1,1}, \sigma_{i,1}, \dots, \sigma_{N,2}, t)]. \quad (3.45)$$

A sequência de operações matemáticas à partir da equação (3.13) é inalterada até chegarmos a equação (3.27). Porém, a aplicação do operador D nesta última resulta em:

$$D(\sigma_{i,1} + \sigma_{i,2}) = (\sigma_{i,1} - \sigma_{i+1,1})w_{i \leftrightarrow i+1,1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) + (\sigma_{i,1} - \sigma_{i-1,1})w_{i-1 \leftrightarrow i,1}(\sigma_{i-1,1}, \sigma_{i,1}). \quad (3.46)$$

Portanto, com a ajuda da C.B.D., equação (3.43), a equação (3.27) torna-se:

$$\frac{d}{dt} C_{\sigma\sigma} |_{t=0} = -\frac{4}{N} \sum_i [1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{a})] \langle (1 + \sigma_{i,1} \sigma_{i,2}) w_{i \leftrightarrow i+1,1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) \rangle_{eq}, \quad (3.47)$$

onde \vec{a} é o vetor entre os spins vizinhos mais próximos ao longo da cadeia. Desta forma obtemos a seguinte desigualdade para o tempo de relaxação:

$$\tau_{\vec{q}} \geq \frac{K_B T \chi_{\vec{q}}}{\frac{4}{N} \sum_{i=1}^N [1 - \cos(\vec{q} \cdot \vec{a})] \langle (1 + \sigma_{i,1} \sigma_{i,2}) w_{i \leftrightarrow i+1,1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) \rangle_{eq}}. \quad (3.48)$$

Considerando-se novamente o caso ferromagnético no limite de baixas temperaturas $T \rightarrow 0$, podemos calcular o valor médio no denominador da expressão acima usando a equação (3.44) e as funções de correlação encontradas no apêndice I. Após algumas manipulações algébricas é possível mostrar que:

$$\langle (1 + \sigma_{i,1} \sigma_{i,2}) w_{i \leftrightarrow i+1,1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) \rangle_{eq} \approx 8\alpha e^{-4K_1 - 8K_2 - 4K_3}. \quad (3.49)$$

A desigualdade (3.48) pode ser expressa de forma um pouco diferente com a ajuda da equação (3.10) e da expansão de $\cos(\vec{q} \cdot \vec{a})$ nas vizinhanças de $\vec{q} = 0$ (vetor de onda crítico do modelo ferromagnético). O resultado que se obtém é o seguinte:

$$\tau_{\vec{q}} \geq \frac{F(\vec{q} \approx 0, \xi) \chi_{\vec{q} \approx 0} \xi^2}{\langle (1 + \sigma_{i,1} \sigma_{i,2}) w_{i \rightarrow i+1,1}(\sigma_{i,1}, \sigma_{i+1,1}) \rangle_{eq}}$$

Substituindo-se nesta última expressão as equações para o comprimento de correlação e para a susceptibilidade magnética, dadas no apêndice I, juntamente com a equação (3.49), mostramos que o expoente crítico dinâmico tem a seguinte forma:

$$z \geq 5 + \frac{K_1}{K_2} + \frac{K_3}{K_2}$$

O modelo de Ising dinâmico em uma dimensão não tem solução exata para a taxa de transição de Kawasaki. No caso do modelo de Ising em uma dimensão com interação de intercâmbio apenas entre primeiros vizinhos é possível de se determinar exatamente o expoente z através da técnica da resposta linear [6],[13]. O resultado que se obtém é $z = 5$. Da mesma forma que para a dinâmica de Glauber, quando são consideradas interações não homogêneas, o expoente crítico dinâmico z passa a depender dos detalhes microscópicos da Hamiltoniana [3]. Claramente, nosso resultado para z se reduz aquele do esperado para uma cadeia linear quando $K_1 = K_3 = 0$, ou seja, $z \geq 5$.

CAPÍTULO IV

Modelo de Ising Bidimensional Anisotrópico

Neste capítulo estudamos o comportamento de uma rede quadrada de spins de Ising que está em contato com um banho térmico à temperatura T , e onde as interações de troca entre os spins nas direções horizontal e vertical são diferentes e podem competir entre si. Este modelo é similar àquele estudado por Tomé, de Oliveira e Santos [7] que levam em conta não o contato do sistema com um único banho térmico mas sim estudam o efeito da interação do sistema com dois banhos térmicos em temperaturas distintas com probabilidades p e $1 - p$ de ocorrerem. Nossos modelos são equivalentes quando um dos banhos térmicos desaparece, e se tomamos interações de troca idênticas nas duas direções consideradas da rede.

A representação esquemática do modelo proposto, e sua respectiva Hamiltoniana são dadas abaixo:

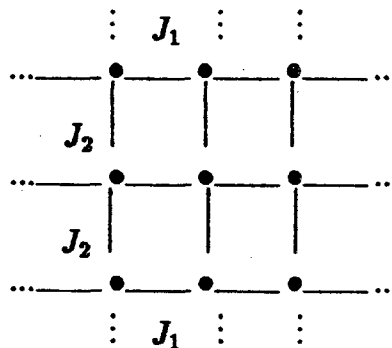


Figura 3 - Diagrama das interações de troca do modelo de Ising em duas dimensões

$$H = - \sum_{i,j} \sigma_{i,j} [J_1 \sigma_{i+1,j} + J_2 \sigma_{i,j+1}]. \quad (4.1)$$

O sistema, que está em contato com um banho térmico à temperatura T , é descrito pela dinâmica de Glauber, e evolui para o seu estado estacionário de acordo

com a equação Mestra dada por:

$$\frac{d}{dt}P(\sigma, t) = - \sum_{\sigma'} w(\sigma, \sigma')P(\sigma, t) + \sum_{\sigma'} w(\sigma', \sigma)P(\sigma', t), \quad (4.2)$$

onde $\sigma = \{\sigma_{i,j}\}$ representa um estado do sistema e o conjunto de variáveis $\sigma_{i,j}$ toma os valores ± 1 . Também, $w(\sigma, \sigma')$ representa a probabilidade de transição, por unidade de tempo, para a transição do estado σ para o estado σ' , quando um spin é invertido de cada vez. Se invertermos o spin $\sigma_{i,j}$, podemos escrever uma equação para $w(\sigma, \sigma')$, que leva em conta a condição de balanceamento detalhado:

$$\frac{w(\sigma_{i,j})}{w(-\sigma_{i,j})} = \frac{P_{eq}(-\sigma_{i,j})}{P_{eq}(\sigma_{i,j})}, \quad (4.3)$$

onde $P_{eq}(\sigma_{i,j})$ é a probabilidade do sistema ser encontrado no seu estado de equilíbrio. Levando-se em conta a forma da Hamiltoniana do sistema, podemos escolher a seguinte forma para a probabilidade de transição, quando invertemos o spin $\sigma_{i,j}$, enquanto os outros permanecem fixos:

$$w(\sigma_{i,j}) = \frac{1}{2} \{1 - \sigma_{i,j} \tanh[K_1(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j}) + K_2(\sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1})]\}, \quad (4.4)$$

sendo $K_i = \frac{J_i}{K_B T}$, $i = 1, 2$. As equações para a evolução temporal da magnetização e da função de correlação entre dois spins, deduzidas no capítulo I, podem ser reescritas aqui como sendo:

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_{i,j}(t) \rangle = -2\langle \sigma_{i,j} w(\sigma_{i,j}) \rangle, \quad (4.5)$$

e

$$\frac{d}{dt}\langle \sigma_{i,j}(t) \sigma_{k,l}(t) \rangle = -2\langle \sigma_{i,j} \sigma_{k,l} [w(\sigma_{i,j}) + w(\sigma_{k,l})] \rangle. \quad (4.6)$$

A partir de um método aproximado descrito a seguir, calcularemos as funções que aparecem no lado direito das equações acima.

Aproximação de Pares

Inicialmente vamos assumir que a rede quadrada seja dividida em duas subredes conforme a figura abaixo:

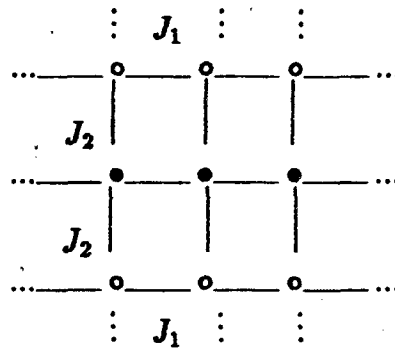


Figura 4 - A rede quadrada é dividida em duas subredes (● representando a subrede 1 e ○ a subrede 2), sendo cada uma delas constituída por linhas alternadas de spins.

Além disso, a magnetização dos spins localizados na subrede 1 será designada por m_1 e a da subrede 2 por m_2 . Também as funções de correlação serão de dois tipos: r_v para as correlações entre subredes e r_h para as correlações na mesma subrede. Seja σ_1 um spin localizado na subrede 1 e σ_2 um spin na subrede 2. As probabilidades de que esses spins assumam os valores σ_1 e σ_2 são dadas respectivamente por:

$$P_1(\sigma_1) = \frac{1}{2}(1 + m_1\sigma_1), \quad (4.7)$$

e

$$P_2(\sigma_2) = \frac{1}{2}(1 + m_2\sigma_2). \quad (4.8)$$

A probabilidade de se encontrar um spin σ_1 na subrede 1 e σ_2 na subrede 2 é dada por:

$$P_v(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{4}(1 + m_1\sigma_1 + m_2\sigma_2 + r_v\sigma_1\sigma_2). \quad (4.9)$$

Se os spins σ_1 e σ_2 se situam na mesma subrede, a probabilidade de se encontrar esse par é dada por:

$$P_h(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{4}(1 + m_1(\sigma_1 + \sigma_2) + r_h \sigma_1 \sigma_2), \quad (4.10)$$

se eles estão na subrede 1. No caso de estarem na subrede 2, basta trocar m_1 por m_2 .

Para que possamos calcular os valores médios no lado direito das equações (4.5) e (4.6) precisamos determinar a probabilidade de um aglomerado de spins estar num estado específico. Se tomarmos σ_1 como um spin central cercado pelos seus vizinhos, a probabilidade deste aglomerado pode ser aproximada por [7],[8]:

$$P_1(\sigma_1) \prod_j \frac{P_v(\sigma_1, \sigma_j)}{P_1(\sigma_1)} \prod_i \frac{P_h(\sigma_1, \sigma_i)}{P_1(\sigma_1)}, \quad (4.11)$$

onde o produtório em $i(j)$ é realizado sobre os spins vizinhos da mesma (outra) subrede. Também podemos escrever a probabilidade para um par de spins vizinhos mais próximos σ_1 e σ_2 , cercados pelos seus spins vizinhos mais próximos. Neste caso teremos:

$$P_{12}(\sigma_1, \sigma_2) \prod_{j \neq 2} \frac{P_{12}(\sigma_1, \sigma_j)}{P_1(\sigma_1)} \prod_{i \neq 1} \frac{P_{12}(\sigma_i, \sigma_2)}{P_2(\sigma_2)}, \quad (4.12)$$

Essa expressão deve ser particularizada para as situações nas quais os dois spins estão na mesma subrede ou em subredes diferentes.

Com a divisão da rede quadrada em duas subredes podemos escrever expressões para a probabilidade de transição dos spins em cada uma delas como sendo:

$$w_1(\sigma_1) = \frac{1}{2} \{1 - \sigma_1 \tanh[K_1 \sum_i \sigma_i + K_2 \sum_j \sigma_j]\}, \quad (4.13)$$

e

$$w_2(\sigma_2) = \frac{1}{2} \{1 - \sigma_2 \tanh[K_1 \sum_i \sigma_i + K_2 \sum_j \sigma_j]\}. \quad (4.14)$$

Novamente, o somatório em $i(j)$ é sobre os spins vizinhos da própria (outra) subrede.

Com o objetivo de calcular a magnetização em cada subrede e as funções de correlação entre spins vizinhos na horizontal e na vertical, substituímos as expressões (4.7)-(4.14) nas equações (4.5) e (4.6). Após algumas manipulações algébricas é possível mostrar que elas são dadas por:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}m_1 = & -m_1 + \gamma_1 \left[\frac{u_1^2 z^2 - q^2 v_1^2}{x_1^8} + \frac{q^2 v_2^2 - u_2^2 w^2}{y_1^8} \right] \\
 & + 2\gamma_2 \left[\frac{qu_1(z^2 - v_1^2)}{x_1^8} + \frac{qu_2(v_2^2 - w^2)}{y_1^8} \right] \\
 & - \gamma_3 \left[\frac{q^2 z^2 - u_1^2 v_1^2}{x_1^8} + \frac{u_2^2 v_2^2 - q^2 w^2}{y_1^8} \right] \\
 & + 2\gamma_4 \left[\frac{v_1 z(u_1^2 - q^2)}{x_1^8} + \frac{v_2 w(q^2 - u_2^2)}{y_1^8} \right],
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}m_2 = & -m_2 + \gamma_1 \left[\frac{t_1^2 z^2 - q^2 v_2^2}{x_2^8} + \frac{q^2 v_1^2 - t_2^2 w^2}{y_2^8} \right] \\
 & + 2\gamma_2 \left[\frac{qt_1(z^2 - v_2^2)}{x_2^8} + \frac{qt_2(v_1^2 - w^2)}{y_2^8} \right] \\
 & - \gamma_3 \left[\frac{q^2 z^2 - t_1^2 v_2^2}{x_2^8} + \frac{t_2^2 v_1^2 - q^2 w^2}{y_2^8} \right] \\
 & + 2\gamma_4 \left[\frac{v_2 z(t_1^2 - q^2)}{x_2^8} + \frac{v_1 w(q^2 - t_2^2)}{y_2^8} \right],
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}r_h = & -2r_h + 2\gamma_1 \left[\frac{u_1^2 z^2 + q^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{q^2 v_2^2 + u_2^2 w^2}{y_1^3} \right] \\
& + 2\gamma_3 \left[\frac{q^2 z^2 + u_1^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2 v_2^2 + q^2 w^2}{y_1^3} \right] \\
& + 4\gamma_4 \left[\frac{v_1 z(u_1^2 + q^2)}{x_1^3} + \frac{v_2 w(q^2 + u_2^2)}{y_1^3} \right], \tag{4.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}r_v = & -2r_v + \gamma_1 \left[\frac{u_1^2 z^2 + q^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{q^2 v_2^2 + u_2^2 w^2}{y_1^3} + \frac{t_1^2 z^2 + q^2 v_2^2}{x_2^3} + \frac{q^2 v_1^2 + t_2^2 w^2}{y_2^3} \right] \\
& + 2\gamma_2 \left[\frac{qu_1(z^2 + v_1^2)}{x_1^3} + \frac{qu_2(v_2^2 + w^2)}{y_1^3} + \frac{qt_1(z^2 + v_2^2)}{x_2^3} + \frac{qt_2(v_1^2 + w^2)}{y_2^3} \right] \\
& - \gamma_3 \left[\frac{q^2 z^2 + u_1^2 v_1^2}{x_1^3} + \frac{u_2^2 v_2^2 + q^2 w^2}{y_1^3} + \frac{q^2 z^2 + t_1^2 v_2^2}{x_2^3} + \frac{t_2^2 v_1^2 + q^2 w^2}{y_2^3} \right], \tag{4.18}
\end{aligned}$$

sendo que as quantidades auxiliares são dadas por:

$$\gamma_1 = \tanh(2K_1 + 2K_2), \quad \gamma_2 = \tanh 2K_2,$$

$$\gamma_3 = \tanh(2K_1 - 2K_2), \quad \gamma_4 = \tanh 2K_1,$$

$$x_1 = P_1(+)=\frac{1}{2}(1+m_1), \quad x_2 = P_2(+)=\frac{1}{2}(1+m_2),$$

$$y_1 = P_1(-)=\frac{1}{2}(1-m_1), \quad y_2 = P_2(-)=\frac{1}{2}(1-m_2),$$

$$v_1 = P_v(+, -)=\frac{1}{4}(1+m_1-m_2-r_v), \quad v_2 = P_v(-, +)=\frac{1}{4}(1-m_1+m_2-r_v),$$

$$u_1 = P_h(+, +)=\frac{1}{4}(1+2m_1+r_h), \quad u_2 = P_h(-, -)=\frac{1}{4}(1-2m_1+r_h),$$

$$t_1 = P_h(+, +)=\frac{1}{4}(1+2m_2+r_h), \quad t_2 = P_h(-, -)=\frac{1}{4}(1-2m_2+r_h),$$

$$z = P_v(+, +)=\frac{1}{4}(1+m_1+m_2+r_v), \quad w = P_v(-, -)=\frac{1}{4}(1-m_1-m_2+r_v),$$

e

$$q = P_h(+, -) = P_h(-, +) = \frac{1}{4}(1 - r_h). \quad (4.19)$$

Quando o sistema atinge o seu estado estacionário, o lado direito das equações (4.15)-(4.18) se anulam. Estamos interessados em estudar a transição de fase do estado ordenado para o desordenado (paramagnético) que é caracterizado por $m_1 = m_2 = 0$. Neste caso as funções de correlação horizontal e vertical são dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned} r_h = \frac{1}{8} & [\gamma_1(1 + r_v^2 + r_h^2 + 4r_v r_h + r_v^2 r_h^2) \\ & + \gamma_3(1 + r_v^2 + r_h^2 - 4r_v r_h + r_v^2 r_h^2) \\ & + 2\gamma_4(1 - r_v^2 + r_h^2 - r_v^2 r_h^2)], \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} r_v = \frac{1}{8} & [\gamma_1(1 + r_v^2 + r_h^2 + 4r_v r_h + r_v^2 r_h^2) \\ & + 2\gamma_2(1 + r_v^2 - r_h^2 - r_v^2 r_h^2) \\ & - \gamma_3(1 + r_v^2 + r_h^2 - 4r_v r_h + r_v^2 r_h^2)]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Com a definição das grandezas $m_f = \frac{(m_1 + m_2)}{2}$ e $m_a = \frac{(m_1 - m_2)}{2}$ também podemos determinar as fases ferromagnética e antiferromagnética. Porém, para obtermos equações diferenciais que dependam somente de m_f ou de m_a é preciso fazer uma expansão até primeira ordem nestas grandezas, após a realização da soma e da subtração das equações (4.15) e (4.16). Próximo à transição de fases, podemos escrever as seguintes equações diferenciais para os desvios infinitesimais δm_f e δm_a na seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \delta m_f = \lambda_f \delta m_f, \quad (4.22)$$

e

$$\frac{d}{dt} \delta m_a = \lambda_a \delta m_a, \quad (4.23)$$

onde

$$\begin{aligned}
 \lambda_f = & -1 + \frac{1}{2}\gamma_1[1 + 2r_v r_h + \frac{1}{2}(r_v^2 + r_h^2) - r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\
 & + \frac{1}{2}\gamma_2[1 - 2r_v r_h - r_h^2 + 2r_v r_h^2] \\
 & + \frac{1}{2}\gamma_3[\frac{1}{2}(r_v^2 - r_h^2) + r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\
 & + \frac{1}{2}\gamma_4[1 - 2r_v r_h - r_v^2 + 2r_v^2 r_h],
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\begin{aligned}
 \lambda_a = & -1 + \frac{1}{2}\gamma_1[\frac{1}{2}(r_v^2 - r_h^2) - r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\
 & - \frac{1}{2}\gamma_2[1 + 2r_v r_h - r_h^2 - 2r_v r_h^2] \\
 & + \frac{1}{2}\gamma_3[1 + \frac{1}{2}(r_v^2 + r_h^2) - 2r_v r_h + r_v r_h^2 - r_v^2 r_h] \\
 & + \frac{1}{2}\gamma_4[1 + 2r_v r_h - r_v^2 + 2r_v^2 r_h],
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Se $\lambda_f < 0$ e $\lambda_a < 0$, a fase paramagnética é estável. Portanto, a condição $\lambda_f = 0$, juntamente com as equações (4.20) e (4.21), permite determinar a linha de transição entre as fases ferromagnética e paramagnética. Da mesma forma a condição $\lambda_a = 0$, juntamente com as equações (4.20) e (4.21) determinam a fronteira entre as fases antiferromagnética e paramagnética. O diagrama de fases, obtido numericamente, é apresentado na figura 5 abaixo.

Quando $K_2 = 0$ ($J_2 = 0$) a temperatura crítica é nula, visto que neste caso teremos cadeias desacopladas, e como sabemos, a aproximação de pares fornece a temperatura crítica correta em uma dimensão.

Se tomarmos $J_1 = J_2$ é fácil mostrar que nossas equações anteriores se reduzem àquelas do trabalho de Tomé, de Oliveira e Santos [7], quando as temperaturas dos dois banhos térmicos são idênticas.

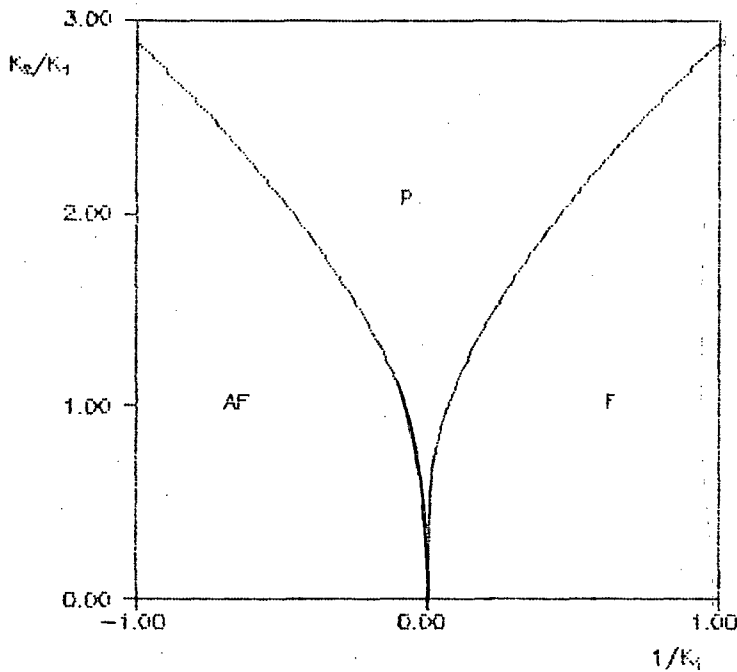


Figura 5 - Diagrama de fases do modelo de Ising bidimensional com

interações anisotrópicas. No diagrama $k_1 = \frac{J_1}{K_B T}$

$$\text{e } \frac{k_2}{K_1} = \frac{J_2}{J_1}$$

CAPÍTULO V

Conclusão

Estudamos nesta dissertação o comportamento de dois modelos magnéticos nas vizinhanças de seus respectivos pontos críticos. Em ambos os problemas utilizamos o formalismo da equação Mestra, juntamente com a Condição de Balanceamento Detalhado, para descrever a evolução temporal dos sistemas em direção aos seus respectivos estados estacionários.

Inicialmente consideramos uma cadeia dupla de spins com interações de quatro spins que apresenta solução analítica no estado de equilíbrio. Embora não pudéssemos resolver exatamente este modelo fora do estado de equilíbrio, utilizamos a taxa de relaxação inicial do parâmetro de ordem para determinar um limite inferior para o expoente crítico dinâmico z . Consideramos também duas taxas de transição diferentes: a de Glauber e a de Kawasaki. Mostramos que para estas duas taxas o expoente crítico dinâmico depende dos detalhes microscópicos da Hamiltoniana, o que parece confirmar um caráter não universal. Esse mesmo tipo de comportamento também foi observado no modelo de Ising unidimensional com interações de troca não homogêneas. Esse comportamento pode ser atribuído ao fato que a probabilidade de transição converge a zero muito mais rapidamente que o inverso do comprimento de correlação, nas vizinhanças da temperatura crítica dos sistemas essencialmente unidimensionais. Quando os parâmetros da Hamiltoniana são escolhidos de tal forma que obtemos duas cadeias desacopladas, nossos resultados se reduzem àqueles obtidos para o sistema unidimensional.

Também estudamos um modelo de Ising em duas dimensões com interações competitivas nas direções horizontal e vertical. Utilizando a aproximação de

pares para a probabilidade dos aglomerados de spins, determinamos o diagrama de fases do modelo, que exhibe as fases antiferro, ferro e paramagnética. Quando o acoplamento em uma das direções se anula, a temperatura crítica vai a zero, o que já era esperado, visto que a aproximação de pares fornece a temperatura crítica exata para o modelo de Ising unidimensional.

APÊNDICE I

Cadeias Duplas de Spins no Limite de Baixas Temperaturas

No capítulo II foram calculadas as funções de correlação entre dois, quatro e seis spins cujas expressões finais são dadas respectivamente por:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle = \sum_{i=1}^4 [(\sigma'_{\alpha})_{i1} (\sigma'_{\beta})_{i1} \left(\frac{\lambda_i^{(k-j)}}{\lambda_1} \right)], \quad (I.1)$$

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \rangle = \sum_{p,t,u=1}^4 (\sigma'_{\alpha})_{1p} (\sigma'_{\gamma})_{pt} (\sigma'_{\mu})_{tu} (\sigma'_{\rho})_{u1} \left(\frac{\lambda_p}{\lambda_1} \right)^{k-j} \left(\frac{\lambda_t}{\lambda_1} \right)^{l-k} \left(\frac{\lambda_u}{\lambda_1} \right)^{m-l}, \quad (I.2)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\gamma} \sigma_{l,\mu} \sigma_{m,\rho} \sigma_{n,\eta} \sigma_{o,\nu} \rangle &= \sum_{p,t,u,v,w=1}^4 (\sigma'_{\alpha})_{1p} (\sigma'_{\gamma})_{pt} (\sigma'_{\mu})_{tu} (\sigma'_{\rho})_{uv} (\sigma'_{\eta})_{vw} (\sigma'_{\nu})_{w1} \\ &\times \left(\frac{\lambda_p}{\lambda_1} \right)^{k-j} \left(\frac{\lambda_t}{\lambda_1} \right)^{l-k} \left(\frac{\lambda_u}{\lambda_1} \right)^{m-l} \left(\frac{\lambda_v}{\lambda_1} \right)^{n-m} \left(\frac{\lambda_w}{\lambda_1} \right)^{o-n}, \end{aligned} \quad (I.3)$$

sendo que $j \leq k \leq l \leq m \leq n \leq o \leq$. Também sabemos que:

$$\sigma'_{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm \alpha_+ (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 & \pm \alpha_- (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} \\ \pm \alpha_+ (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & \pm \alpha_- (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ (1 + \alpha_+^2)^{-\frac{1}{2}} & (1 + \alpha_-^2)^{-\frac{1}{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (I.4)$$

onde o sinal superior significa $\alpha = 1$ e o inferior $\alpha = 2$. Definimos ainda que

$$\alpha_+ = \left(\frac{\lambda_1}{2} - x\right)e^{-K_1},$$

$$\alpha_- = \left(\frac{\lambda_2}{2} - x\right)e^{-K_1},$$

$$x = e^{K_1+K_3} \cosh 2K_2,$$

$$\lambda_1 = (e^{K_1+K_3} + e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2 + \{[(e^{K_1+K_3} - e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2]^2 + 4e^{-2K_1}\}^{\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_2 = (e^{K_1+K_3} + e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2 - \{[(e^{K_1+K_3} - e^{K_1-K_3}) \cosh 2K_2]^2 + 4e^{-2K_1}\}^{\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_3 = 2e^{K_1-K_3} \sinh 2K_2,$$

e

$$\lambda_4 = 2e^{K_1+K_3} \sinh 2K_2,$$

sendo que $K_i = \frac{J_i}{K_B T}$, $i = 1, 2, 3$.

Substituindo-se na expressão (I.1) os elementos das matrizes σ'_α , após a realização do somatório, encontramos que:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle = \pm \frac{\alpha_+^2}{1 + \alpha_+^2} \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^{k-j} + \frac{1}{1 + \alpha_+^2} \left(\frac{\lambda_4}{\lambda_1}\right)^{k-j}, \quad (I.5)$$

sendo o sinal superior para $\alpha = \beta$ e o inferior para o caso contrário. Esta mesma substituição nas equações (I.2) e (I.3) leva a expressões mais complicadas que as atuais. Por isso, deixaremos como estão até tomarmos o limite $T \rightarrow 0$.

Vamos considerar o caso ferromagnético $J_1, J_2, J_3 > 0$ no limite de

baixas temperaturas ($K_i \rightarrow \infty$). Neste limite podemos escrever que:

$$\lambda_1 \approx (e^{K_1+K_3+2K_2} + e^{K_1+K_3-2K_2}),$$

$$\lambda_2 \approx (e^{K_1-K_3+2K_2} + e^{K_1-K_3-2K_2}),$$

$$\lambda_3 = (e^{K_1-K_3+2K_2} - e^{K_1-K_3-2K_2}),$$

$$\lambda_4 = (e^{K_1+K_3+2K_2} - e^{K_1+K_3-2K_2}),$$

e

$$z = \frac{1}{2}(e^{K_1+K_3+2K_2} + e^{K_1+K_3-2K_2}),$$

o que implica em

$$\alpha_+ = 0,$$

$$\alpha_- \approx \frac{-1}{2}e^{2K_1+2K_2+K_3},$$

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \rightarrow 0,$$

$$\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \rightarrow 0,$$

$$\frac{\lambda_4}{\lambda_1} \rightarrow 1 - 2e^{-4K_2},$$

de tal forma que as matrizes σ'_α tornam-se:

$$\sigma'_1 \approx \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma'_2 \approx \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Substituindo-se esses valores na função de correlação entre dois spins, obtemos:

$$\langle \sigma_{j,\alpha} \sigma_{k,\beta} \rangle \approx \left(\frac{\lambda_4}{\lambda_1} \right)^{k-j}. \quad (I.6)$$

Calculamos as funções de correlação entre quatro e seis spins, apenas para os spins envolvidos nos cálculos do capítulo III. Por exemplo, calculamos a função de correlação entre os spins $\sigma_{i-1,2}$, $\sigma_{i,2}$, $\sigma_{i,1}$ e $\sigma_{i+1,1}$, a partir da expressão (I.2), ou seja,

$$\langle \sigma_{i-1,2} \sigma_{i,2} \sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1} \rangle = \sum_{p,t,u=1}^4 (\sigma'_2)_{1p} (\sigma'_2)_{pt} (\sigma'_1)_{tu} (\sigma'_1)_{u1} \left(\frac{\lambda_p}{\lambda_1} \right) \left(\frac{\lambda_u}{\lambda_1} \right).$$

Efetuada-se o somatório em p , t e u , e substituindo-se os valores dos elementos das matrizes σ'_α obtemos, no limite de baixas temperaturas que

$$\langle \sigma_{i-1,2} \sigma_{i,2} \sigma_{i,1} \sigma_{i+1,1} \rangle \approx \left(\frac{\lambda_4}{\lambda_1} \right)^2.$$

Podemos usar esse mesmo procedimento para calcular as outras funções de correlação de interesse.

Uma grandeza física encontrada no capítulo II é a susceptibilidade magnética por spin dada por:

$$\chi_T = 2\beta(1 + \alpha_+^2)^{-1} \frac{1 + \frac{\lambda_4}{\lambda_1}}{1 - \frac{\lambda_4}{\lambda_1}}, \quad (I.7)$$

que no limite de baixas temperaturas torna-se:

$$\chi_T = 2\beta e^{4k_2}. \quad (I.8)$$

O comprimento de correlação (ξ) é definido da seguinte forma para sistemas essencialmente unidimensionais [3], já que a temperatura crítica é nula:

$$\langle \sigma_j \sigma_k \rangle = \exp\left[\frac{-|k-j|}{\xi}\right].$$

Substituindo-se o valor da função de correlação dada pela expressão (I.6), obtemos:

$$\left(\frac{\lambda_4}{\lambda_1}\right)^{k-j} \approx \left(e^{\frac{-1}{\xi}}\right)^{k-j},$$

onde $k \geq j$. Desta forma obtemos que:

$$\xi \approx \frac{1}{2} e^{4K_2}. \quad (I.9)$$

Comparando-se as expressões (I.8) e (I.9) notamos que:

$$\chi_T \propto \xi.$$

BIBLIOGRAFIA

- 1- Glauber, R.J.; *J. of Math. Phys.* 4, 294 (1963).
- 2- Kawasaki, K.; "Kinetics of Ising Models", vol. 2, ed. C. Domb and M.S. Green, Academic Press, London (1972).
- 3- Leal da Silva, J.K.; "On The Critical Dynamics of Ising Models", Tese de Doutorado, Université de Genève, Genève, Suíça (1987).
- 4- Felderhof, B.U. e Suzuki, M.; *Physica* 56, 43 (1971).
- 5- Figueiredo, W., de Menezes, L.C. e Salinas, S.R.; *Z. Physik B* 31, 321 (1978).
- 6- Hohenberg, P.C. e Halperin, B.I.; *Rev. Mod. Phys.* 49, 435 (1977).
- 7- Tomé, T., de Oliveira, M.J. e Santos, M.A.; *J. Phys. A: Math. Gen.* 24, 3677 (1991).
- 8- Mamada, H. e Takano, F.; *J. Phys. Soc. Japan* 25, 675 (1968).
- 9- Stanley, H.E.; "Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena", Clarendon Press, Oxford (1971).
- 10- Halperin, B.I.; *Phys. Rev. B* 8, 4437 (1973).
- 11- Abe, R.; *Progr. Theor. Phys.* 39, 947 (1968).
- 12- Kadanoff, L.P. e Swift, J.; *Phys. Rev.* 165, 310 (1968).
- 13- Suzuki, M. e Kubo, R.; *J. Phys. Soc. Japan* 24, 51 (1967).